# Quantenmechanik

Gerhard Soff

Institut für Theoretische Physik

Technische Universität Dresden

Vorlesung im Wintersemester 1996/97

**Vorbemerkungen**

Im Rahmen dieser Vorlesung soll eine Einführung in die Grundprinzipien der nichtrelativistischen Quantenmechanik erfolgen. Wir bauen dabei explizit auf dem Kenntnisstand der Theoretischen Mechanik und der Elektrodynamik auf. Diese Vorlesung ist gegenwärtig für Studenten des 5. Semesters, also im allgemeinen nach dem Vordiplom, vorgesehen. Zukünftig wird die Quantenmechanik-Vorlesung bereits für Studenten des 4. Semesters angeboten, um einerseits anstreben zu können, die Studienzeiten für Physik zu verkürzen, und um andererseits am Ende des Studiums auch den vielfältigen neuen Entwicklungen in der Theoretischen Physik Rechnung tragen zu können. Die Quantenmechanik-Vorlesung bildet ihrerseits die Basis für das Verständnis nachfolgender Bereiche der theoretischen Physik, insbesondere für die relativistische Quantenmechanik, für die theoretische Atom- und Kernphysik sowie für die Festkörperphysik. Diese aufgezählten Bereiche bleiben ohne profunde Kenntnisse der elementaren Quantenmechanik unverständlich.

Die Grundprinzipien der Quantenmechanik wurden in den 20er bis 40er Jahren erarbeitet. Die Grundgleichung der Quantenmechanik – die Schrödinger-Gleichung – wurde 1926 publiziert. Wenn auch wohlfundierte Kenntnisse der nichtrelativistischen Quantenmechanik zum grundsätzlichen Verständnis von Quantenphänomenen im Mikrokosmos beitragen, so muß man heute jedoch konstatieren, daß eine Präzisionsbeschreibung mikroskopischer Systeme damit noch nicht gelingen kann. Eine rigorose theoretische Analyse muß im strengen Sinn sogar zu dem Schluß kommen, daß die Schrödinger-Gleichung als Grenzfall einer umfassenderen Theorie angesehen werden muß und angesichts heutiger Präzisionsexperimente sogar vielfach zu falschen Resultaten führt.

Die mathematischen Anforderungen ähneln in vielen Bereichen denen der Elektrodynamik und übersteigen nur selten deren Komplexität. Neu hinzu kommt das Operator-Kalkül. Der Umgang mit Operatoren, z.B. Differential- oder Integraloperatoren, ohne dabei direkten Bezug zu nehmen auf die Funktionen, auf die diese Operatoren wirken, ist zunächst etwas ungewohnt und muß ausführlich behandelt werden. Operatoren werden wir in der Anfangsphase deutlich durch ein Dach "$\hat{\ }$" über dem Buchstaben kennzeichnen: $\hat{O}$.

Inhaltlich wollen wir folgende Teilbereiche behandeln:

1. Einführung in die Wellenmechanik
2. Schrödinger-Gleichung
3. Operatoren und Hilbert-Raum
4. Die Unschärferelation
5. Der harmonische Oszillator
6. Teilchen in äußeren Feldern
7. Das Wasserstoff-Problem
8. Spin

9. Störungstheorie

Es wird die folgende Empfehlung bezüglich der ergänzenden Literatur gegeben:

## Literaturverzeichnis


1. W. Greiner, Theoretische Physik 4, Quantenmechanik, (Harri Deutsch, Zürich, 1975)
2. W. Nolting, Grundkurs: Theoretische Physik 5, Quantenmechanik, (Zimmermann-Neufang, Ulmen, 1992)
3. E. Fick, Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie, (Akademische Verlagsgesellschaft, Frankfurt, 1974)
4. D. I. Blochinzew, Grundlagen der Quantenmechanik, (Harri Deutsch, Frankfurt, 1966)
5. A. Messiah, Quantum Mechanics I and II, (North Holland, Amsterdam, 1991)
6. E. Merzbacher, Quantum Mechanics, (Wiley, New York, 1961)
7. L. I. Schiff, Quantum Mechanics, (McGraw-Hill, Tokyo, 1955)
8. A. S. Dawydow, Quantenmechanik, (VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1967)
9. S. Flügge, Practical Quantum Mechanics, (Springer, New York, 1974)
10. L. D. Landau, E. M. Lifschitz, Lehrbuch der Theoretischen Physik III, Quantenmechanik, (Akademie-Verlag, Berlin, 1974)
11. R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands, The Feynman Lectures on Physics, Quantum Mechanics, (Addison-Wesley, Reading, 1965)
12. G. Baym, Lectures on Quantum Mechanics, (Addison-Wesley, Reading, 1969)
13. L. E. Ballentine, Quantum Mechanics, (Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1990)
14. M. Schubert, G. Weber, Quantentheorie, (Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 1993)


Dieses Script soll wieder im World Wide Web für jedermann verfügbar sein. Dieses Script ist kein Originalwerk. Es basiert auf mehreren publizierten Monographien. Als Vorlesungsmitschrift reflektiert es die in den jeweiligen Vorlesungen präsentierten Inhalte.


Bei der Erstellung der Übungsaufgaben halfen Dr. Christian Hofmann und Dr. Günter Plunien. Die Übungsgruppen geleitet haben die Herren Dipl.-Phys. Ulrich Jentschura, Dipl.-Phys. André Peshier, Dipl.-Phys. Jörg Urban und Ralf Schützhold. Dieses Script wäre nicht entstanden ohne die hilfreiche und wertvolle Unterstützung zahlreicher Mitarbeiter. Den Herren Dr. Günter Plunien und Dr. Jochen Rau danke ich für einige Originalbeiträge. Bei der technischen Erstellung des Scriptes halfen dankenswerterweise Dr. Thomas Beier, Dr. Günter Plunien, Dipl.-Phys. Frank

Krauss, Dipl.-Phys. Mark Beinker, Dipl.-Phys. André Peshier, Dipl.-Phys. Jörg Urban, Dipl.-Phys. Ulrich Jentschura sowie Felix Eikemeyer und Christian Dürr. Mein ausdrücklicher und besonderer Dank gilt Herrn Dr. Jörg Bergmann und Frau Dipl.-Ing. Gundala Schädlich für das Erstellen der umfangreichen LATEX-Texte sowie für das Zeichnen der zahlreichen Figuren mit Hilfe des Software-Pakets “Corel DRAW”.

In der Diplomprüfung stellt die Quantenmechanik ein Hauptprüfungsfach dar. Insbesondere die mehr experimentell orientierten Studenten werden vielfach mit quantenmechanischen Fragestellungen konfrontiert. Hingegen werden die in Theoretische Physik sehr versierten Studenten dominanterweise in den darauf aufbauenden Bereichen geprüft. Ähnliches gilt für das Rigorosum in der Doktorprüfung.

# Vorausblick

Die Fundamentalgleichung zur Beschreibung quantenmechanischer Prozesse ist die Schrödinger-Gleichung. Abweichend vom Grundprinzip eines didaktischen Aufbaus und einer schrittweisen rigorosen Ableitung diskutieren wir kurz einige Implikationen dieser Elementargleichung, um einen ersten mehr emotional- als ratiobetonten Eindruck von dem mathematischen Rahmen der Quantenmechanik zu erhalten.

Die Schrödinger-Gleichung lautet

$$i\hbar \, \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{H} \, \Psi(\vec{r},t) \quad . \tag{1}$$

Hierbei ist $\hbar$ eine Naturkonstante. $\hbar$ ist das Planck'sche Wirkungsquantum dividiert durch $2\pi$,

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad . \tag{2}$$

Es ist

$$\begin{aligned} \hbar &= 1.054\,572\,66 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js} \\ &= 6.582\,122\,0 \cdot 10^{-22}\,\mathrm{MeVs} \quad . \end{aligned}$$

Die Dimension von $\hbar$ ist Energie $\cdot$ Zeit und damit die Dimension einer Wirkung. $\hbar$ ist eine der fundamentalen Konstanten der Quantenmechanik. Auffällig ist ferner das Auftreten der imaginären Einheit $i = \sqrt{-1}$ in der Schrödinger-Gleichung. Dies deutet darauf hin, daß die in der Quantenmechanik auftretenden Funktionen komplexwertige Funktionen sind. Dies gilt auch für die orts- und zeitabhängige Funktion $\psi(\vec{r},t)$, die wir später als Wellenfunktion bezeichnen werden. Die Schrödinger-Gleichung ist offensichtlich eine partielle Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeitvariablen $t$. Die gesuchte Lösungsfunktion ist $\Psi(\vec{r},t)$. Auf der rechten Seite der Schrödinger-Gleichung steht in linearer Form diese Lösungsfunktion $\Psi(\vec{r},t)$. Die Schrödinger-Gleichung ist eine lineare Gleichung. Für lineare Gleichungen gilt das Superpositionsprinzip. Hat man zwei Lösungen $\Psi_1(\vec{r},t)$ und $\Psi_2(\vec{r},t)$ der Schrödinger-Gleichung gefunden, so ist auch jede beliebige Linearkombination dieser Lösungen wieder eine Lösung der Schrödinger-Gleichung.

Wir wenden uns jetzt dem Operator $\hat{H}$ zu. Es ist der Hamilton-Operator, was die Buchstabenwahl erklärt. Aus der klassischen Mechanik kennen wir bereits die Hamilton-Funktion $H$, die für konservative Systeme die Gesamtenergie des Systems beschreibt,

$$H = T + V = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V = E \quad . \tag{3}$$

Es ist

$$H = H(\vec{p},\vec{r}) \quad , \tag{4}$$

wobei $\vec{r}$ die generalisierte Koordinate angibt. Ferner ist

$$V = V(\vec{r}, t) \quad . \tag{5}$$

In der Quantenmechanik wird aus dem Impulsvektor der Impulsoperator,

$$\vec{p} \rightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad , \tag{6}$$

und somit

$$\hat{\vec{p}}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad . \tag{7}$$

Der Hamilton-Operator der Quantenmechanik lautet damit

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\vec{r}, t) \tag{8}$$

mit $\hat{\vec{p}}^2$ aus (7). Auch in der Quantenmechanik beschreibt der Hamilton-Operator die Gesamtenergie eines quantenmechanischen Systems.

Wir erkennen, daß die Schrödinger-Gleichung eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung in den Ortsvariablen $x$, $y$ und $z$ ist. Die Asymmetrie in der Zeit- und den Ortskoordinaten ist eine direkte Folge der nichtrelativistischen Betrachtungsweise und der Verwendung der nichtrelativistischen kinetischen Energie.

Die Lösungsfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$ ist komplexwertig und damit einer experimentellen Beobachtung nicht zugänglich. Beobachtbare Größen sind immer reellwertig. Jedoch ist die reelle Größe $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ eine meßbare Größe. $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ ist ein Maß für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines durch die Funktion $\Psi$ beschriebenes quantenmechanischen Objektes am Orte $\vec{r}$ zum Zeitpunkt $t$. Im Sinne dieser Wahrscheinlichkeitsinterpretation muß bei einer Integration über den gesamten Raum folgen

$$\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \, d^3r = 1 \quad . \tag{9}$$

Im Rahmen der Quantenmechanik müssen wir uns von der aus der Theoretischen Mechanik und Elektrodynamik vertrauten Vorstellung lösen, daß wir im deterministischen Sinne zu jedem Zeitpunkt den Ort $\vec{r}$ und die Geschwindigkeit $\vec{v}$ eines Teilchens beliebig genau bestimmen könne. Vielmehr müssen wir lernen, hierzu nur noch Wahrscheinlichkeitsaussagen machen zu können.

Für quantenmechanische Systeme ohne explizite Zeitabhängigkeit ist die Energie konstant. Demzufolge gilt

$$\hat{H}\,\Psi(\vec{r},t) = E\,\Psi(\vec{r},t) \quad . \tag{10}$$

Dies ist die sogenannte stationäre Schrödinger-Gleichung. Ausführlich ausgeschrieben haben wir in kartesischen Koordinaten

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi(\vec{r},t)+V(\vec{r},t)\,\Psi(\vec{r},t) = E\,\Psi(\vec{r},t) \quad . \tag{11}$$

Es ist eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung in den Ortskoordinaten $x$, $y$ und $z$. Im folgenden wollen wir die Schrödinger-Gleichung ableiten, ihre Gültigkeit verifizieren und sie für verschiedene Potentiale $V(\vec{r},t)$ lösen.

# Die Compton-Streuung

Als ersten Einstieg in quantenmechanische Phänomene wollen wir die Streuung von Licht an Elektronen – die sogenannte Compton-Streuung – behandeln. Qbwohl eine rigorose theoretische Beschreibung erst im Rahmen der Quantenelektrodynamik (QED) erfolgen kann, ist es möglich, mit Hilfe einiger Grundprinzipien aus der Theoretischen Mechanik und der Elektrodynamik wesentliche Aspekte dieses fundamentalen Streuprozesses zu verstehen.

Bereits in der Elektrodynamik hatten wir Licht als Ebene Wellen dargestellt, also Lösungen der Maxwell-Gleichungen für das Vakuum ohne Berücksichtigung äußerer Quellen. Die Lösungen der resultierenden Wellengleichung für die Feldstärken konnten partiell dargestellt werden als

$$\Psi(\vec{r}, t) = A\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} \quad . \tag{12}$$

Hierbei ist $A$ die Amplitude der Schwingung. Im Argument der Exponentialfunktion tritt der Wellenzahlvektor $\vec{k}$ auf mit dem Betrag $|\vec{k}| = k$. $k$ hängt mit dem Abstand benachbarter Wellenfronten, also der Wellenlänge $\lambda$, zusammen über

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} \quad . \tag{13}$$

Die Periode der Schwingungsdauer ist fixiert durch

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega} \quad . \tag{14}$$

Folglich gilt für den Zusammenhang der Frequenz $\nu$ der Schwingung

$$\nu = \frac{1}{\tau} \tag{15}$$

und der Kreisfrequenz

$$\omega = 2\pi\nu \quad . \tag{16}$$

Mit der Phasengeschwindigkeit

$$\frac{\omega}{k} = c \tag{17}$$

haben wir ferner

$$c = \lambda\nu \quad . \tag{18}$$

Die freien elektromagnetischen Felder können dargestellt werden als

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} \quad , \tag{19}$$
$$\vec{B} = \vec{B}_0 \, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} \quad . \tag{20}$$

Die Amplituden $\vec{E}_0$ und $\vec{B}_0$ bilden zusammen mit $\vec{k}$ ein orthogonales Rechtssystem. $\vec{E}$ und $\vec{B}$ stehen immer und überall senkrecht auf $\vec{k}$ und aufeinander. Aus (17) folgt die Dispersionsrelation

$$\omega = ck \quad . \tag{21}$$

Durch Berechnung des Poynting-Vektors konnte nachgewiesen werden, daß der Energiefluß der elektromagnetischen Welle in Richtung von $\vec{k}$ zeigt. Ferner wurde bemerkt, daß für die Energie der ebenen Welle gilt

$$E = \hbar\omega \tag{22}$$

und für den Impuls

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad . \tag{23}$$

Mit (21), (22) und (23) folgt aus

$$\omega^2 = \vec{k}^2 c^2 \tag{24}$$

die Relation

$$E^2 = \vec{p}^{\,2} c^2 \quad . \tag{25}$$

Erinnern wir uns an den relativistische Enrgiesatz der Mechanik

$$E^2 = \vec{p}^{\,2} c^2 + m_0^2 c^4 \quad , \tag{26}$$

so entspricht (25) dem relativistischen Energiesatz für ein Teilchen der Ruhemasse $m_0 = 0$.

Wir wollen nun die Streuung von Licht an einem Elektron unter Berücksichtigung des allgemeinen Erhaltungssatzes von Energie und Impuls beschreiben. Die Energie des Elektrons vor dem Stoß bezeichnen wir mit $E$, dem korrespondierenden Impuls mit $p$. Nach dem Streuprozeß kennzeichnen wir die modifizierte Energie des Elektrons mit $E'$, den Impuls demzufolge mit $\vec{p}\,'$. Aus dem Gesetz der Erhaltung der Energie und des Impulses resultiert

$$\hbar\omega + E = \hbar\omega' + E' \quad , \tag{27}$$
$$\hbar\vec{k} + \vec{p} = \hbar\vec{k}\,' + \vec{p}\,' \quad . \tag{28}$$

$\hbar\omega'$ und $\hbar\vec{k}\,'$ sind die Energie beziehungsweise der Impuls des Lichtes nach dem Streuprozeß. Streut das Elektron an einem hochenergetischen Lichtquant, einem Röntgenquant, so kann die Energie des Elektrons sehr groß werden. Wir wenden daher die Formeln der speziellen Relativitätstheorie an, die die Abhängigkeit der Masse eines Teilchens von seiner Geschwindigkeit berücksichtigen. Nach der speziellen Relativitätstheorie ist die kinetische Energie eines Elektrons, das sich mit der Geschwindigkeit $\vec{v}\,'$ bewegt

$$E' = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v'^2}{c^2}}} - m_0 c^2 \quad , \tag{29}$$

wobei $m_0$ die Ruhemasse,

$$\begin{aligned} m_o &= 9.109\,387\,7 \cdot 10^{-31}\,\mathrm{kg} \\ &= 0.510\,999\,06\,\mathrm{MeV}/c^2 \quad , \end{aligned} \tag{30}$$

und $c$ die Lichtgeschwindigkeit

$$c = 299\,792\,458\,\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}} \tag{31}$$

bedeuten. Entsprechend gilt für den Impuls des Elektrons

$$\vec{p}\,' = \frac{m_0 \vec{v}\,'}{\sqrt{1 - \frac{v'^2}{c^2}}} \quad . \tag{32}$$

Als Spezialfall untersuchen wir jetzt die Streuung an einem ruhenden Elektron mit $E = 0$ und $\vec{p} = 0$. Damit erhalten wir

$$\hbar\omega = \hbar\omega' + m_0 c^2 \left[ \frac{1}{\sqrt{1 - \beta'^2}} - 1 \right] \quad , \tag{33}$$

$$\hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}\,' + \frac{m_0 \vec{v}\,'}{\sqrt{1 - \beta'^2}} \tag{34}$$

mit $\beta' = v'/c$. Aus der ersten Gleichung folgt unmittelbar, daß $\omega > \omega'$ ist. Die gestreute Strahlung muß folglich eine größere Wellenlänge besitzen als die einfallende.

Aus diesen Gleichungen läßt sich ein weiterer wichtiger Schluß ziehen: Das freie Elektron kann das Licht nicht absorbieren, sondern nur streuen. Die völlige Absorption würde bedeuten, daß $\omega' = 0$ und $k' = 0$ sind. Dann kann (34) auch in skalarer Form dargestellt werden,

$$\hbar k = \frac{m_0 v'}{\sqrt{1 - \beta'^2}} \quad . \tag{35}$$

Mit (21) und (33) erhalten wir für den Fall der vollständigen Absorption

$$\frac{1}{\sqrt{1-\beta'^2}} - 1 = \frac{\beta'}{\sqrt{1-\beta'^2}} \quad . \tag{36}$$

Dies wird gelöst für $\beta' = 0$ und demzufolge nach (35) $k = 0$. Damit ist die Unmöglichkeit einer Absorption an einem ruhenden Elektron bewiesen. Die Forderung nach gleichzeitiger Erhaltung von Energie und Impuls verbietet die Absorption eines Lichtquants an einem ruhenden Elektron. Das gleiche gilt aber auch für ein gleichförmig bewegtes Elektron. Hier können wir aufgrund des Kovarianzprinzips immer ein Bezugssystem wählen, relativ zu dem das einfallende Elektron ruht. Die Tatsache der Unmöglichkeit einer Absorption darf nicht vom gewählten Bezugssystem abhängen.

Der zeitumgekehrte Prozeß zur Absorption ist die Emission des Lichtquants. Hier gilt aus Symmetriegründen die gleiche Schlußfolgerung. Ein gleichförmig bewegtes Elektron kann aus Gründen der gleichzeitigen Energie- und Impulserhaltung kein Lichtquant emmitieren. Daher strahlt ein gleichförmig bewegtes Elektron nicht.

Wir wollen nun ermitteln wie die Frequenz $\omega'$ des gestreuten Lichtes vom Streuwinkel $\Theta$ des Lichtes abhängt. In Figur 1 zeigt der Pfeil OA die Fortpflanzungsrichtung des ursprünglichen Lichtquants an. Die Richtung OC ist jene, in der die vom Elektron gestreuten Lichtstrahlen beobachtet werden. Der Streuwinkel ist $\Theta$. Die Richtung des gestreuten Elektrons mit dem Impuls $\vec{p}\,'$ wird durch OD angezeigt. Der Winkel zwischen dem einlaufenden Lichtquant und dem gestreuten Elektron wird mit $\alpha$ bezeichnet.

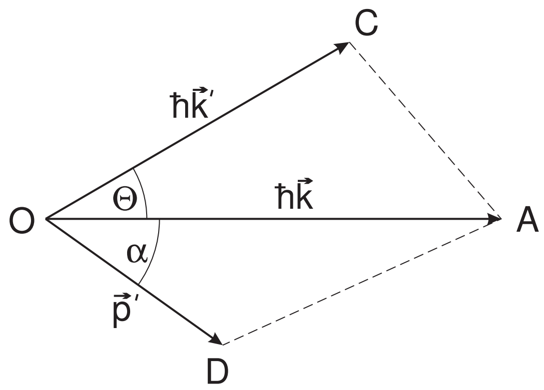


Abbildung 1: Impulsparallelogramm der Compton-Streuung an einem ruhenden Elektron

Wir stellen die Impulsbilanz auf. Wir zerlegen die Impulse in Komponenten parallel zu $\hbar\vec{k}$ und senkrecht zu $\hbar\vec{k}\,'$. Mit $|\vec{k}| = \omega/c$ und $|\vec{k}\,'| = \omega'/c$ erhalten wir

$$\frac{\hbar\omega}{c} = \frac{\hbar\omega'}{c}\cos\Theta + \frac{m_0 v'}{\sqrt{1-\beta'^2}}\cos\alpha \quad , \tag{37}$$

$$0 = \frac{\hbar\omega'}{c}\sin\Theta - \frac{m_0 v'}{\sqrt{1-\beta'^2}}\sin\alpha \quad . \tag{38}$$

Wir eliminieren jetzt aus diesen Gleichungen den Winkel $\alpha$. Wir quadrieren (37) und (38)

$$\begin{aligned}
(\hbar\omega - \hbar\omega' \cos\Theta)^2 &= (m_0 c v' \gamma' \cos\alpha)^2 \quad , &(39)\\
(\hbar\omega' \sin\Theta)^2 &= (m_0 c v' \gamma' \sin\alpha)^2 &(40)
\end{aligned}$$

mit

$$\gamma' = \frac{1}{\sqrt{1-\beta'^2}} \quad . \tag{41}$$

Die Addition der quadratischen Gleichung führt auf

$$(\hbar\omega)^2 - 2\hbar^2\omega\omega'\cos\Theta + (\hbar\omega')^2 = (m_0c^2)^2 \frac{\beta'^2}{1-\beta'^2} \quad . \tag{42}$$

Wir verwenden den Energieerhaltungssatz (33), um $\beta'^2$ zu eliminieren,

$$\frac{\hbar\omega - \hbar\omega'}{m_0c^2} + 1 = \frac{1}{\sqrt{1-\beta'^2}} \tag{43}$$

und somit

$$\left(\frac{\hbar\omega - \hbar\omega'}{m_0c^2} + 1\right)^2 = \frac{1}{1-\beta'^2} \quad . \tag{44}$$

Dies ergibt

$$\beta'^2 = 1 - \frac{1}{\left(\frac{\hbar\omega - \hbar\omega'}{m_0c^2} + 1\right)^2} \quad . \tag{45}$$

Für $\beta^2/(1-\beta^2)$ erhält man

$$\begin{aligned}
\frac{\beta'^2}{1-\beta'^2} &= \left[1 - \frac{1}{\left(\frac{\hbar\omega - \hbar\omega'}{m_0c^2} + 1\right)^2}\right] \left(\frac{\hbar\omega - \hbar\omega'}{m_0c^2} + 1\right)^2 \\
&= \left(\frac{\hbar\omega - \hbar\omega'}{m_0c^2} + 1\right)^2 - 1 \\
&= \frac{1}{(m_0c^2)^2} \left[(\hbar\omega - \hbar\omega' + m_0c^2)^2 - (m_0c^2)^2\right] \quad . &(46)
\end{aligned}$$

Wir setzen dies ein in (42). Mit

$$1 - \cos\Theta = 2\sin^2\frac{\Theta}{2} \tag{47}$$

folgt dann

$$\omega - \omega' = \frac{2\hbar}{m_0 c^2}\omega\omega'\,\sin^2\frac{\Theta}{2} \quad . \tag{48}$$

Wir setzen jetzt ein $\omega = 2\pi c/\lambda$ und $\omega' = 2\pi c/\lambda'$.
Es folgt

$$\frac{2\pi c}{\lambda} - \frac{2\pi c}{\lambda'} = \frac{2\hbar}{m_0 c^2}\,\frac{2\pi c}{\lambda}\,\frac{2\pi c}{\lambda'}\,\sin^2\frac{\Theta}{2} \tag{49}$$

und weiter

$$2\pi c(\lambda' - \lambda) = \frac{2\hbar}{m_0 c^2}\,(2\pi c)^2\,\sin^2\frac{\Theta}{2} \quad . \tag{50}$$

Schließlich haben wir

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{4\pi\hbar}{m_0 c}\,\sin^2\frac{\Theta}{2} \quad . \tag{51}$$

Dies ist die gesuchte Compton-Streuformel. Basierend auf dem Energie-Impuls-Erhaltungssatz wurde die Änderung der Wellenlänge in Abhängigkeit vom Streuwinkel abgeleitet.

## Symmetrietransformationen und Erhaltungsgrößen

Bei der Untersuchung physikalischer Systeme ist oft nicht das Aufstellen der Bewegungsgleichung für die als relevant erkannten Observablen problematisch, sondern ihre Integration. Diese ist in den meisten Fällen gar nicht exakt möglich. Um so mehr stellt sich die Frage, wie wir wesentliche Kenntnisse über ein System gewinnen können, ohne die Bewegungsgleichung explizit lösen zu müssen. Hier hilft das Aufspüren von Erhaltungsgrößen oft entscheidend weiter, um wesentliche Informationen über die Lösungen, d.h. über die Eigenschaften des Systems, zu erhalten. Man denke z.B. an den Energiesatz, der bereits eine zumindest qualitative Diskussion der Bewegung des Systems erlaubt. Räumliche Symmetrieeigenschaften, wie die Translations- oder Rotationsinvarianz des Systems, spiegeln sich in der Erhaltung von Impuls oder Drehimpuls wider. Die große Bedeutung dieser Erhaltungsgrößen ist uns bereits aus der Mechanik bekannt. Es zeigt sich, daß zwischen den Symmetrien eines Systems und bestimmten Erhaltungsgrößen ein allgemeiner, tiefer Zusammenhang besteht. Hierüber handelt das von Emmy Noether 1918 gefundene und nach ihr benannte Theorem in sehr allgemeiner Form. Für die Physik liegt die Bedeutung des Noether-Theorems im Auffinden von Erhaltungsgrößen durch Untersuchen des Transformationsverhaltens der Wirkung bzw. der Lagrange-Funktion (oder der Hamilton-Funktion) des Systems. Jede Transformation, welche die Wirkung invariant läßt, führt zu einem Erhaltungssatz für eine entsprechende Observable. Die Symmetrien des Systems sind mit bestimmten Erhaltungsgrößen inhärent verknüpft.

Um einen ersten Eindruck für die weitreichende Bedeutung des Noether-Theorems zu vermitteln leiten wir jetzt seine spezielle Form im Rahmen der Lagrange-Mechanik her. Dazu betrachten wir ein mechanisches System mit $f$ Freiheitsgraden, welches durch einen Satz geeigneter, generalisierter Koordinaten $\{q_i, i = 1, \ldots, f\}$ charakterisiert werde. Die physikalischen Bewegungen des Systems werden durch jene Trajektorien $\vec{q}\,(t)$ im $f$-dimensionalen Konfigurationsraum beschrieben, welche die klassische Wirkung

$$S = \int \mathrm{d}t\, L\left(q_i(t), \dot{q}_i(t), t\right) \tag{52}$$

minimieren. Wir untersuchen nun das Transformationsverhalten der Wirkung bzw. der Lagrange-Funktion $L$ unter speziellen Koordinatentransformationen mit dem Ziel jene Transformationen zu finden, welche die Wirkung oder die Lagrange-Funktion invariant lassen. Die Forderung nach Invarianz ist selbstevident, garantiert diese doch, daß die physikalischen Bewegungen des Systems nicht von der Wahl der generalisierten Koordinaten abhängen darf. Demgemäß ergibt sich das folgende Programm:

Wir untersuchen zuerst, wie sich die Lagrange-Funktion unter Koordinatentransformation verändern darf, damit die Bewegungsgleichungen forminvariant sprich kovariant bleiben. Die Kovarianz der Bewegungsgleichungen stellt bestimmte Forderungen an die zugelassene Klasse von Transformationen. Im Anschluß daran werden wir an die Definition von Erhaltungsgrößen erinnern. Ausgehend von dem Begriff der zyklischen Koordinate werden wir den Begriff der Symmetrietransformation einführen und das Noether-Theorem als eine Verallgemeinerung begreiflich machen. Für die Lagrange-Mechanik folgt:

$$\left\{ \begin{array}{c} \text{Symmetrietransformation} \\ \text{der Lagrange-Funktion} \end{array} \right\} \Longrightarrow \{\text{Erhaltungsgröße}\} \tag{53}$$

Jeder Symmetrietransformation der Lagrange-Funktion entspricht eine Erhaltungsgröße. Dieses Noether-Theorem erfaßt jedoch nicht alle Erhaltungsgrößen des Systems.

## Kovarianz der Euler-Lagrange-Gleichungen

Wir betrachten Punkttransformationen zwischen zwei Sätzen generalisierter Koordinaten $\{q_i, i = 1, \ldots, f\}$ und $\{Q_i, i = 1, \ldots, f\}$ der Form

$$\begin{aligned} q_i &\longrightarrow Q_i = Q_i\left(q_k, t\right) \quad , && (54)\\ \dot{q}_i &\longrightarrow \dot{Q}_i = \dot{Q}_i\left(q_k, \dot{q}_k, t\right) \quad . && (55)\end{aligned}$$

Ferner seien die Transformationen invertierbar, d.h. es soll gelten:

$$\begin{aligned} Q_i &\longrightarrow q_i = q_i\left(Q_k, t\right) \quad , && (56)\\ \dot{Q}_i &\longrightarrow \dot{q}_i = \dot{q}_i\left(Q_k, \dot{Q}_k, t\right) \quad , && (57)\end{aligned}$$

sowie (beliebig oft) stetig differenzierbar. Die Lagrange-Funktion $L\left(q_i, \dot{q}_i, t\right)$ gehe dabei in die neue Lagrange-Funktion $\tilde{L}\left(Q_i, \dot{Q}_i, t\right)$ über. Die Forderung der Kovarianz, d.h., der Forminvarianz der Euler-Lagrange-Gleichungen bedeutet:

$$\frac{\delta}{\delta q_i}\int \mathrm{d}t\, L\left(q_k, \dot{q}_k, t\right) = 0 \iff \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0 \quad , \tag{58}$$

$$\frac{\delta}{\delta Q_i}\int \mathrm{d}t\, \tilde{L}\left(Q_k, \dot{Q}_k, t\right) = 0 \iff \frac{\partial \tilde{L}}{\partial Q_i} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{Q}_i} = 0 \quad . \tag{59}$$

Nun darf aber die Beschreibung des physikalischen Systems nicht von der Wahl der Koordinaten abhängen, d.h. die Wirkung $S$ muß eine Invariante bleiben. Dies schränkt die Möglichkeiten, wie sich die Lagrange-Funktion $L\left(q, \dot{q}, t\right)$ unter Punkttransformationen verändern darf, erheblich ein. Die für unsere Diskussion relevanten Fälle sind (Indizes seien unterdrückt):

**Typ I:** Die neue (transformierte) Lagrange-Funktion $\bar{L}\left(Q, \dot{Q}, t\right)$ soll aus der alten $L\left(q, \dot{q}, t\right)$ durch Einsetzen der inversen Transformationen ohne Änderung der funktionalen Abhängigkeit (Gestalt) hervorgehen, d.h.:

$$L\left(q, \dot{q}, t\right) \longrightarrow \bar{L}\left[q\left(Q, t\right), \dot{q}\left(Q, \dot{Q}, t\right), t\right] \quad . \tag{60}$$

**Typ II:** Die neue (transformierte) Lagrange-Funktion $L'\left(Q, \dot{Q}, t\right)$ soll aus der alten $L\left(q, \dot{q}, t\right)$ durch Einsetzen der inversen Transformation hervorgehen und dabei ihre Gestalt in der Form ändern:

$$L\left(q, \dot{q}, t\right) \longrightarrow L'\left(Q, \dot{Q}, t\right) = L\left(Q, \dot{Q}, t\right) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F\left(Q, t\right) \quad . \tag{61}$$

Wir zeigen zunächst die Kovarianz der Euler-Lagrange-Gleichungen (58,59) bezüglich Koordinatentransformation vom Typ I:

Man berechne zunächst

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{L}}{\partial Q_i} &= \sum_{k=1}^{f}\left[\frac{\partial L}{\partial q_k}\frac{\partial q_k}{\partial Q_i}+\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\frac{\partial \dot{q}_k}{\partial Q_i}\right] \quad , &(62)\\
\frac{\partial \bar{L}}{\partial \dot{Q}_i} &= \sum_{k=1}^{f}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{Q}_i}=\sum_{k=1}^{f}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\frac{\partial q_k}{\partial Q_i} \quad , &(63)
\end{aligned}
$$

und verwende dabei

$$
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}q_k=\dot{q}_k=\sum_{i=1}^{f}\frac{\partial q_k}{\partial Q_j}\dot{Q}_j+\frac{\partial q_k}{\partial t} \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{Q}_i}=\frac{\partial q_k}{\partial Q_i} \quad . \tag{64}
$$

Berechne weiter

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial \bar{L}}{\partial \dot{Q}_i} &= \sum_{k=1}^{f}\left[\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right)\frac{\partial q_k}{\partial Q_i}+\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial q_k}{\partial Q_i}\right)\right]\\
&= \sum_{k=1}^{f}\left[\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right)\frac{\partial q_k}{\partial Q_i}+\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\frac{\partial \dot{q}_k}{\partial Q_i}\right] \quad , &(65)
\end{aligned}
$$

und verwende dazu

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial q_k}{\partial Q_i} &= \sum_{j=1}^{f}\frac{\partial^2 q_k}{\partial Q_j\partial Q_i}\dot{Q}_j+\frac{\partial^2 q_k}{\partial t\partial Q_i}\\
&= \frac{\partial}{\partial Q_i}\left[\sum_{j=1}^{f}\frac{\partial q_k}{\partial Q_j}\dot{Q}_j+\frac{\partial q_k}{\partial t}\right]=\frac{\partial \dot{q}_k}{\partial Q_i} \quad . &(66)
\end{aligned}
$$

Subtrahieren wir (65) von (62), so folgt die Kovarianz der Euler-Lagrange-Gleichung:

$$
\frac{\partial \bar{L}}{\partial Q_i}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial \bar{L}}{\partial \dot{Q}_i}=0=\sum_{k=1}^{f}\underbrace{\left[\frac{\partial L}{\partial q_k}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right]}_{=0}\left(\frac{\partial q_k}{\partial Q_i}\right) \quad . \tag{67}
$$

An dieser Stelle beweisen wir noch folgendes:

Führt man den Differentialoperator

$$
\hat{D}_i \equiv \hat{D}_i\left(q,\dot{q},t\right):=\left(\frac{\partial}{\partial q_i}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial \dot{q}_i}\right) \quad , \quad i=1,\ldots,f \tag{68}
$$

ein, so lassen sich die Euler-Lagrange-Gleichungen in der kompakten Form

$$
\hat{D}_i\left(q,\dot{q},t\right)L\left(q,\dot{q},t\right)=0 \tag{69}
$$

schreiben. Untersucht man das Transformationsverhalten des Differentialoperators $\hat{D}_i\left(q,\dot{q},t\right)$ unter Punkttransformationen (54–57), so erhält man:

$$\hat{D}_i\left(q,\dot{q},t\right) \quad\longrightarrow\quad \hat{D}_i\left(Q,\dot{Q},t\right)=\sum_{k=1}^{f}\left(\frac{\partial q_k}{\partial Q_i}\right)\hat{D}_k\left(q,\dot{q},t\right) \quad , \tag{70}$$

d.h. der Differentialoperator (68) transformiert sich wie die Komponenten eines Vektors.

Wir weisen jetzt die Kovarianz der Bewegungsgleichungen (58,59) unter Koordinatentransformationen vom Typ II nach. Gemäß (61) soll sich die transformierte Lagrange-Funktion $L'\left(Q,\dot{Q},t\right)$ um ein totales Zeitdifferential einer beliebigen Funktion $F\left(Q,t\right)$ unterscheiden. Zunächst haben wir zu zeigen:

$$\begin{aligned} 0 &= \hat{D}_i\left(Q,\dot{Q},t\right)L'\left(Q,\dot{Q},t\right)\\ &= \hat{D}_i\left(Q,\dot{Q},t\right)\left[L\left(Q,\dot{Q},t\right)+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F\left(Q,t\right)\right] \quad . \end{aligned} \tag{71}$$

Da unter Berücksichtigung von(69) und (70) unmittelbar

$$\hat{D}_i\left(Q,\dot{Q},t\right)L'\left(Q,\dot{Q},t\right)=\sum_{k=1}^{f}\frac{\partial q_k}{\partial Q_i}\hat{D}_k\left(q,\dot{q},t\right)L\left(q,\dot{q},t\right) \tag{72}$$

folgt, haben wir zum Nachweis der Kovarianz (72) lediglich zu prüfen, ob der zweite Term in (71) verschwindet:

$$\hat{D}_i\left(Q,\dot{Q},t\right)\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F\left(Q,t\right)\right)=0 \quad . \tag{73}$$

Es gilt nun

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial Q_i}\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} &= \frac{\partial}{\partial Q_i}\left[\sum_{k=1}^{f}\frac{\partial F}{\partial Q_k}\dot{Q}_k+\frac{\partial F}{\partial t}\right]\\ &= \sum_{k=1}^{f}\frac{\partial^2 F}{\partial Q_i\,\partial Q_k}\dot{Q}_k+\frac{\partial^2 F}{\partial Q_i\,\partial t} \end{aligned} \tag{74}$$

sowie

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial \dot{Q}_i}\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial F}{\partial Q_i}=\sum_{k=1}^{f}\frac{\partial^2 F}{\partial Q_k\,\partial Q_i}\dot{Q}_k+\frac{\partial^2 F}{\partial t\,\partial Q_i} \quad . \tag{75}$$

Nehmen wir an, daß die partiellen Ableitungen vertauschen, so sind die Ausdrücke (74) und (75) identisch und Gleichung (73) erfüllt. Damit ist auch die Kovarianz der Euler-Lagrange-Gleichungen unter Transformation gemäß (61) nachgewiesen.

## Erhaltungsgrößen

Kommen wir nun zur Definition von Erhaltungsgrößen. Unserem intuitiven Verständnis folgend heißt eine Größe $G(q, \dot{q}, t)$ genau dann eine Erhaltungsgröße, wenn gilt

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} G(q, \dot{q}, t) = 0 \quad . \tag{76}$$

Wir sprechen auch von einer Konstanten der Bewegung oder auch von einem Bewegungsintegral. Letztere Namensgebung erscheint sofort einleuchtend, wenn wir uns an das wohlbekannte Beispiel des kanonischen Impuls erinnern. Der zur generalisierten Koordinaten $q_i$ kanonisch konjugierte Impuls $p_i$ ist definiert als

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{77}$$

Aus den Bewegungsgleichungen folgt direkt, daß $p_i$ genau dann eine Erhaltungsgröße im Sinne der Definition (76) ist, wenn die Lagrange-Funktion nicht explizit von der Koordinate $q_i$ abhängt, d.h.:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} p_i = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad . \tag{78}$$

$q_i$ heißt dann zyklische Koordinate. Hieran läßt sich nun leicht einsehen, daß die Translationsinvarianz Impulserhaltung oder eine Rotationsinvarianz Drehimpulserhaltung liefert. Die Lagrange-Funktion für ein System mit Zylindersymmetrie hängt dann z.B. eben nicht von der (kartesischen) Koordinate $z$ oder dem Azimutwinkel $\varphi$ ab. Insbesondere ändert sich die Lagrange-Funktion auch nicht, wenn wir sie einer Transformation

$$z \;\to\; z' = z + a, \quad a \text{ beliebig aber fest} \tag{79}$$

$$\text{oder} \quad \varphi \;\to\; \varphi' = \varphi + \delta, \quad \delta \text{ beliebig aber fest} \tag{80}$$

unterwerfen. Allgemeiner formuliert: Wenn ein mechanisches System unter beliebigen Verschiebungen $\alpha_i$ der Koordinate $q_i$ der Form

$$q_i \quad \to \quad Q_i = q_i + \alpha_i \tag{81}$$

invariant ist, so ist $q_i$ bzw. $Q_i$ zyklisch und der dazugehörige kanonische Impuls $p_i$ bzw. $P_i$ eine Erhaltungsgröße. Somit liefern Symmetrien zyklische Koordinaten und damit die Erhaltung bestimmter Impulse:

$$\frac{\partial \bar{L}}{\partial Q_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \Longrightarrow P_i = \frac{\partial \bar{L}}{\partial \dot{Q}_i} = p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \text{konst.} \tag{82}$$

Für den Fall der speziellen Koordinatentransformation (81) werden wir auch auf die Aussage (82) geführt, wenn wir die Abhängigkeit der transformierten Lagrange-Funktion $\bar{L}$ von dem Verschiebungsparameter $\alpha_i$ untersuchen. Verschiebungsinvarianz bedeutet insbesondere

$$\left. \frac{\partial \bar{L}}{\partial \alpha_i} \right|_{\alpha \text{ beliebig}} = 0 \quad . \tag{83}$$

Diese Betrachtungen vermitteln uns bereits deutliche Hinweise auf den engen Zusammenhang zwischen den Symmetrien des Systems bzw. speziellen Koordinatentransformationen, die die Lagrange-Funktion invariant lassen und bestimmten Erhaltungsgrößen.

## Noether-Theorem für die Lagrange-Mechanik

Wir wollen jetzt unsere Überlegungen des vorigen Abschnitts verallgemeinern. Zu diesem Zweck betrachten wir Koordinatentransformationen

$$q_i \quad \longrightarrow \quad Q_i = Q_i\left(q_k, t; \alpha\right), \quad i,k = 1,\ldots,f, \tag{84}$$

die invertierbar

$$Q_i \quad \longrightarrow \quad q_i = q_i\left(Q_i, t; \alpha\right) \tag{85}$$

und in dem kontinuierlichen Parameter $\alpha$ stetig differenzierbar sein müssen. Insbesondere soll für $\alpha = 0$ die identische Transformation folgen, d.h.:

$$Q_i\left(q_k, t; \alpha = 0\right) = q_i, \quad i = 1,\ldots,f. \tag{86}$$

Entsprechende Transformationsgleichungen sollen für die generalisierten Geschwindigkeiten gelten.

Wiederum betrachten wir zuerst solche Transformationen, die die Lagrange- Funktion selber invariant lassen (die Indizes seien aus Gründen der Übersicht unterdrückt)

$$\begin{aligned} q \quad \longrightarrow \quad Q \quad &= \quad Q\left(q, t; \alpha\right), && (87)\\ L\left(q,\dot q, t\right) \longrightarrow \bar L\left(Q, \dot Q; \alpha\right) \quad &:= \quad L\left[q\left(Q,t;\alpha\right), \dot q\left(Q,\dot Q, t;\alpha\right), t\right] \\ &\equiv \quad L\left(q,\dot q,t\right) \quad . && (88)\end{aligned}$$

Als nächsten Schritt untersuchen wir die Abhängigkeit der neuen Lagrange- Funktion $\bar L\left(q, \dot Q, t; \alpha\right)$ von dem Parameter $\alpha$. Dabei sollen die Werte der neuen Koordinaten $Q_i$ und der Geschwindigkeiten $\dot Q_i$ fest bleiben:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \bar L}{\partial \alpha}\right)_{Q,\dot Q\,\text{fest}} \quad &\equiv \quad \frac{\partial \bar L}{\partial \alpha} = \sum_{k=1}^{f}\left(\frac{\partial L}{\partial q_k}\frac{\partial q_k}{\partial \alpha} + \frac{\partial L}{\partial \dot q_k}\frac{\partial \dot q_k}{\partial \alpha}\right) \\ &= \quad \sum_{k=1}^{f}\left[\left(\frac{\mathrm d}{\mathrm dt}\frac{\partial L}{\partial \dot q_k}\right)\frac{\partial q_k}{\partial \alpha} + \frac{\partial L}{\partial \dot q_k}\left(\frac{\mathrm d}{\mathrm dt}\frac{\partial q_k}{\partial \alpha}\right)\right] \quad , && (89)\\ \Longrightarrow \quad \frac{\partial \bar L}{\partial \alpha} \quad &= \quad \frac{\mathrm d}{\mathrm dt}\left\{\sum_{k=1}^{f}\frac{\partial L}{\partial \dot q_k}\frac{\partial q_k}{\partial \alpha}\right\} \quad . && (90)\end{aligned}$$

wobei

$$\frac{\partial q_k}{\partial \alpha} = \frac{\partial}{\partial \alpha} q_k\left(Q = \text{fest}, t; \alpha\right) \quad . \tag{91}$$

Da Gleichung (90) für beliebige Werte $\alpha$ des Parameters gelten soll, folgt insbesondere

$$\left.\frac{\partial \bar L}{\partial \alpha}\right|_{\alpha=0} = \frac{\mathrm d}{\mathrm dt}\left\{\sum_{k=1}^{f}\frac{\partial L}{\partial \dot q_k}\left(\frac{\partial q_k}{\partial \alpha}\right)_{\alpha=0}\right\} \quad . \tag{92}$$

Es genügt daher, das Transformationsverhalten unter infinitesimalen Koordinatentransformationen $Q(q,t;\delta\alpha)$ zu untersuchen, was in vielen Fällen die Diskussion sehr vereinfacht. Nun folgt aber für die transformierte Lagrange-Funktion $\bar{L}$ nach Voraussetzung (88)

$$\left.\frac{\partial \bar{L}}{\partial \alpha}\right|_{\alpha=0} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\{\sum_{k=1}^{f}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\left(\frac{\partial q_k}{\partial \alpha}\right)_{\alpha=0}\right\} = 0 \quad . \tag{93}$$

Somit können wir das Noether-Theorem in der Form formulieren:
Die Funktion (Observable)

$$G(q,\dot{q},t) = \sum_{k=1}^{f}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\left(\frac{\partial q_k}{\partial \alpha}\right)_{\alpha=0} \tag{94}$$

ist eine Erhaltungsgröße, wenn die Lagrange-Funktion $L(q,\dot{q},t)$ unter kontinuierlichen, stetig differenzierbaren Transformationen $q \to Q = Q(q,t;\alpha)$ **invariant** bleibt. Zu jeder solchen Transformation gehört eine Erhaltungsgröße.

Die oben hergeleitete Form (94) des Noether-Theorems für die Lagrange-Mechanik läßt sich noch einen Schritt verallgemeinern, indem wir ebenfalls Transformationen analog zu Typ II (61) zulassen:

$$q \quad \longrightarrow \quad Q = Q(q,t;\alpha) \tag{95}$$

$$L(q,\dot{q},t) \quad \longrightarrow \quad L'\left(Q,\dot{Q},t;\alpha\right) = L\left(Q,\dot{Q},t\right) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F(q,t;\alpha) \quad . \tag{96}$$

Koordinatentransformationen (84–86), die von dem kontinuierlichen Parameter $\alpha$ abhängen und die Lagrange-Funktion in der Form (96) ändern, heißen Symmetrie-Transformationen. Die Trajektorien $q(t)$ und $Q(t)$ erfüllen die selben Bewegungsgleichungen. Untersuchen wir jetzt die Abhängigkeit der Lagrange-Funktion $L'$ in (96) vom Parameter $\alpha$, so erhalten wir:

$$\left.\frac{\partial L'}{\partial \alpha}\right|_{\alpha=0} = \left.\frac{\partial L}{\partial \alpha}\right|_{\alpha=0} + \left.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial F}{\partial \alpha}\right|_{\alpha=0} \quad . \tag{97}$$

Der erste Term auf der rechten Seite der obigen Gleichung verschwindet, da $L$ nicht explizit von $\alpha$ abhängt. Den Term auf der linken Seite können wir wieder gemäß (92) umschreiben:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\{\sum_{k=1}^{f}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\left(\frac{\partial q_k}{\partial \alpha}\right)_{\alpha=0}\right\} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial F}{\partial \alpha}\right)_{\alpha=0} \quad . \tag{98}$$

Somit resultiert die Erhaltungsgröße

$$J(q,\dot{q},t) = \sum_{k=1}^{f}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\left.\frac{\partial q_k}{\partial \alpha}\right|_{\alpha=0} - \left.\frac{\partial F}{\partial \alpha}\right|_{\alpha=0} \quad . \tag{99}$$

Die allgemeine Version des Noether-Theorems für die Lagrange-Mechanik lautet dann: Zu jeder Symmetrietransformation ((84)–(86) und (96)) gehört eine Erhaltungsgröße $J(q,\dot{q},t)$ (99). In dieser Formulierung sind die Fälle (94) ebenfalls enthalten.

**Beispiel: Translationsinvarianz und Impulserhaltung**

Betrachten wir den Effekt infinitesimaler Verschiebungen:

$$\begin{aligned} q_i &\longrightarrow Q_i = Q_i\left(q_k, t; \alpha\right) = q_i - \alpha a_i \quad , & (100)\\ Q_i &\longrightarrow q_i = q_i\left(Q_k, t; \alpha\right) = Q_i + \alpha a_i \quad . & (101)\end{aligned}$$

Dabei bezeichnen $a_i$ die Komponenten einer festen aber beliebigen Verschiebung und $\alpha$ einen infinitesimalen Parameter. Offensichtlich gilt $\dot{q}_i = \dot{Q}_i$. Die Lagrange-Funktion $L\left(q, \dot{q}, t\right)$ transformiert sich gemäß (88):

$$L\left(q, \dot{q}, t\right) \quad \longrightarrow \quad \bar{L}\left(Q, \dot{Q}, t; \alpha\right) = L\left[q\left(Q, t; \alpha\right), \dot{q}\left(Q, \dot{Q}; \alpha\right), t\right] \quad . \tag{102}$$

Folglich erhalten wir unmittelbar:

$$\begin{aligned} \left.\frac{\partial \bar{L}}{\partial \alpha}\right|_{\alpha=0} &= \sum_k \frac{\partial L}{\partial q_k}\left(\frac{\partial}{\partial \alpha} q_k\left(Q_j, t; \alpha\right)\right)_{\alpha=0} = \sum_k \frac{\partial L}{\partial q_k} a_k \\ &= \sum_k \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\right) a_k = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_k \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} a_k \stackrel{!}{=} 0 \end{aligned} \tag{103}$$

Da die $a_k$ beliebig sind, führt die Invarianz der Lagrange-Funktion bezüglich infinitesimaler Verschiebungen auf die Erhaltungsgrößen

$$G_k\left(q, \dot{q}, t\right) = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \equiv p_k \quad , \tag{104}$$

d.h. auf erhaltene, kanonische Impulse $p_k$.

**Beispiel: Freier Fall im homogenen Gravitationsfeld**

Wir betrachten die eindimensionale Bewegung eines Massepunktes im homogenen Gravitationsfeld. Die Lagrange-Funktion lautet:

$$L\left(z, \dot{z}\right) = \frac{m}{2}\dot{z}^2 - mgz \quad . \tag{105}$$

Die Bewegungsgleichung lautet:

$$\frac{\partial L}{\partial z} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \ddot{z} = -g \quad . \tag{106}$$

Nun unterwerfen wir das System einer eigentlichen Galilei-Transformation:

$$z \quad \longrightarrow \quad z' = z + \alpha t, \qquad \dot{z} \quad \longrightarrow \quad \dot{z}' = \dot{z} + \alpha \quad . \tag{107}$$

Der Parameter $\alpha$ entspricht physikalisch der konstanten Relativgeschwindigkeit $v_R$. Die ursprüngliche Lagrange-Funktion transformiert sich gemäß:

$$
\begin{aligned}
L'\left(z',\dot{z}',t;\alpha\right) &= \frac{m}{2}\left(\dot{z}'-\alpha\right)^2 - mg\left(z'-\alpha t\right) \\
&= \frac{m}{2}\dot{z}'^2 - mgz' + \frac{m}{2}\alpha^2 - m\alpha\dot{z}' + mg\alpha t \\
&= \frac{m}{2}\dot{z}'^2 - mgz' - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\{\frac{m}{2}\alpha^2 t - m\alpha z' + \frac{m}{2}g\alpha t^2 + C\right\} \\
&\equiv L\left(z',\dot{z}'\right) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F\left(z',t;\alpha\right) \quad , \qquad (108) \\
F\left(z',t;\alpha\right) &= \frac{m}{2}\alpha^2 t - m\alpha z' + \frac{m}{2}g\alpha t^2 + C \quad . \qquad (109)
\end{aligned}
$$

Die reine Galilei-Transformation ist also eine Symmetrie-Transformation der Lagrange-Funktion. Mit Hilfe der Gleichung (99) berechnen wir die dazugehörige Erhaltungsgröße:

$$
\begin{aligned}
J\left(z,\dot{z},t\right) &= \frac{\partial L}{\partial \dot{z}}\left.\frac{\partial z\left(z',t;\alpha\right)}{\partial\alpha}\right|_{\alpha=0} - \left.\frac{\partial F}{\partial\alpha}\right|_{\alpha=0} \\
&= -m\dot{z}t - \left(m\alpha t - mz' + \frac{m}{2}gt^2\right)_{\alpha=0} \quad , \qquad (110) \\
J\left(z,\dot{z},t\right) &= m\left(-\dot{z}t + z - \frac{g}{2}t^2\right) \quad . \qquad (111)
\end{aligned}
$$

Mittels der Bewegungsgleichung $\ddot{z} = -g$ weist man die Erhaltung von $J$ direkt nach:

$$
\frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}t} = m\left(-\ddot{z}t - gt\right) = -m\left(\ddot{z}+g\right)t = 0 \quad . \qquad (112)
$$

**Beispiel: Harmonischer Oszillator**

Gegeben sei die Lagrange-Funktion des eindimensionalen harmonischen Oszillators:

$$
L\left(x,\dot{x}\right) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2}x^2 \quad , \qquad (113)
$$

mit der Eigenfrequenz $\omega$. Wir untersuchen den Effekt von Koordinatentransformationen der Gestalt

$$
\begin{aligned}
x &\longrightarrow x' = x + \alpha\cos\left(\omega t\right) \quad , \qquad (114) \\
\dot{x} &\longrightarrow \dot{x}' = \dot{x} - \alpha\omega\sin\left(\omega t\right) \quad . \qquad (115)
\end{aligned}
$$

Setzen wir wiederum die Umkehrtransformationen in die ursprüngliche Lagrange-Funktion ein, so resultiert:

$$
\begin{aligned}
L'\left(x',\dot{x}',t;\alpha\right) &= \frac{m}{2}\left[\dot{x}' + \alpha\omega\sin\left(\omega t\right)\right]^2 - \frac{m}{2}\omega^2\left[x' - \alpha\cos\left(\omega t\right)\right]^2 \\
&= \frac{m}{2}\dot{x}'^2 - \frac{m}{2}\omega^2 x'^2 \\
&\quad +\alpha\left[m\omega\dot{x}'\sin\left(\omega t\right) + m\omega^2 x'\cos\left(\omega t\right)\right] \\
&\quad +\alpha^2\underbrace{\left[\frac{m}{2}\omega^2\sin^2\left(\omega t\right) - \frac{m}{2}\omega^2\cos^2\left(\omega t\right)\right]}_{=-\frac{m}{2}\omega^2 + m\omega^2\sin^2(\omega t) = \frac{-m\omega^2}{2}\cos(2\omega t)} \\
&= L\left(x',\dot{x}'\right) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F\left(x',t;\alpha\right) \quad , \qquad (116)
\end{aligned}
$$

mit

$$F\left(x',t;\alpha\right) = \alpha m\omega x' \sin\left(\omega t\right) - \alpha^2 \frac{m\omega}{4} \sin\left(2\omega t\right) + C \quad . \tag{117}$$

Es handelt sich offenbar um eine Symmetrietransformation des harmonischen Oszillators. Die dazu gehörige Erhaltungsgröße lautet:

$$\begin{aligned}
J\left(x,\dot{x},t\right) &= \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \left.\frac{\partial x(x',t;\alpha)}{\partial \alpha}\right|_{\alpha=0} - \left.\frac{\partial F}{\partial \alpha}\right|_{\alpha=0} \quad , \\
&= m\dot{x}\left(-\cos(\omega t)\right) \\
&\quad - \left(m\omega[x + 2\alpha\cos(\omega t)]\sin(\omega t) - 2\alpha\frac{m\omega}{4}\sin(2\omega t)\right)_{\alpha=0} \quad , \\
J\left(x,\dot{x},t\right) &= -m\left(\dot{x}\cos\left(\omega t\right) + \omega x \sin\left(\omega t\right)\right) \quad .
\end{aligned} \tag{118}$$

Mit Hilfe der bekannten, allgemeinen Lösung $x(t) = A\sin(\omega t) + B\cos(\omega t)$ läßt sich die zeitliche Konstanz der Größe $J$ direkt verifizieren.

## Hamilton-Jacobi-Theorie und Wirkungswellen

Wir erinnern an die Hamilton-Jacobi-Theorie der klassischen Mechanik. Wir betrachten eine kanonische Transformation der generalisierten Koordinaten $\vec{q}$ und der generalisierten Impulse $\vec{p}$ auf neue Variable

$$\vec{Q} = \vec{Q}(\vec{q}, \vec{p}, t) \quad , \tag{119}$$
$$\vec{P} = \vec{P}(\vec{q}, \vec{p}, t) \quad . \tag{120}$$

Die Hamilton-Gleichungen bleiben dabei invariant

$$\begin{aligned} \dot{Q}_k &= \frac{\partial \tilde{H}}{\partial P_k} \quad , \\ \dot{P}_k &= -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial Q_k} \end{aligned} \tag{121}$$

mit der transformierten Hamilton-Funktion $\tilde{H}(\vec{Q}, \vec{P}, t)$. Im Rahmen der Hamilton-Jacobi-Theorie versucht man durch eine kanonische Transformation zu erreichen, daß gilt

$$\tilde{H} = 0 \quad . \tag{122}$$

Als Konsequenz lassen sich die Hamilton-Gleichungen (121) sofort integrieren mit der Lösung

$$\begin{aligned} Q_k &= \text{const} \quad , \\ P_k &= \text{const} \quad . \end{aligned} \tag{123}$$

Die Erzeugende dieser Transformation war $F_2(\vec{q}, \vec{P}, t)$. Aus

$$p_k = \frac{\partial F_2}{\partial q_k} \tag{124}$$

und

$$\tilde{H} = H + \frac{\partial F_2}{\partial t} \tag{125}$$

folgt die Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$H(q_1, \cdots, q_s, \frac{\partial F_2}{\partial q_1}, \cdots, \frac{\partial F_2}{\partial q_s}, t) = 0 \quad . \tag{126}$$

Wir hatten gefunden, daß gilt

$$\frac{dF_2}{dt} = \sum_k p_k \dot{q}_H - H = L \tag{127}$$

und somit

$$F_2 = \int L\, dt \quad , \tag{128}$$

d.h., $F_2$ ist gerade die vom Hamilton-Prinzip her bekannte Wirkungsfunktion. Wir beschränken uns in den folgenden Betrachtungen auf ein einzelnes Teilchen in einem konservativen Kraftfeld mit

$$H = T + V = E = \mathrm{const.} \tag{129}$$

Dann steckt die ganze Zeitabhängigkeit in (126) im zweiten Summanden. Um die Zeitabhängigkeit zu separieren, machen wir den folgenden naheliegenden Ansatz

$$F_2(\vec{q}, \vec{P}, t) = W(\vec{q}, \vec{P}) - Et \quad , \tag{130}$$

und wir haben

$$H(\vec{q}, \frac{\partial W}{\partial q_1}, \cdots, \frac{\partial W}{\partial q_s}) = E \quad . \tag{131}$$

Die Funktion $W(\vec{q}, \vec{P})$ wird die Hamiltonsche charakteristische Funktion genannt. Wegen $\vec{P} = \mathrm{const}$, definiert die Bedingung $W = \mathrm{const}$ eine feste Fläche in dem durch die Koordinaten $q_j$ aufgespannten Konfigurationsraum. Wir nennen im folgenden $F_2(\vec{q}, \vec{P}, t) = S(\vec{q}, \vec{P}, t)$.

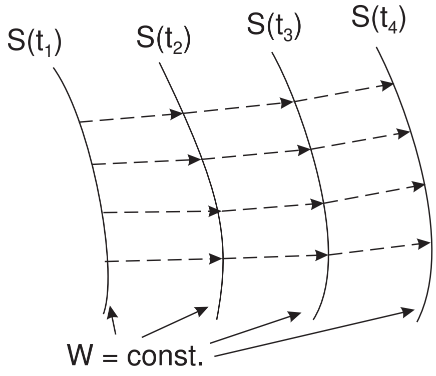


Abbildung 2:

Die Flächen $S = \text{const.}$ bewegen sich dagegen im Konfigurationsraum, sie schieben sich mit der Zeit $t$ über die festliegenden $W$-Flächen hinweg. Sie bilden im Konfigurationsraum fortschreitende Wellenfronten der sogenannten Wirkungswellen.

Wir nehmen an, daß das betrachtete System aus einem einzigen Teilchen besteht mit $\vec{q} = (x, y, z)$, so daß der Konfigurationsraum mit den gewöhnlichen dreidimensionalen Ortsraum übereinstimmt. Die Wellengeschwindigkeit $u$ ist die Fortpflanzungsgeschwindigkeit eines bestimmten Punktes der Front der Wirkungswelle. Da die Flächenkonstanten $S$ mit der Zeit ihre Gestalt ändern werden, ist auch die Wellengeschwindigkeit nicht für alle Punkte der Wellenfront gleich. Betrachten wir die zwei benachbarten Punkte $A = (x, y, z)$ zur Zeit $t$ und $B = (x + dx, y + dy, z + dz)$ zur Zeit $t + dt$ im Konfigurationsraum, so ändert sich die Wirkungsfunktion um $dS$ mit

$$\begin{aligned} dS &= \frac{\partial S}{\partial t}dt + \frac{\partial S}{\partial x}dx + \frac{\partial S}{\partial y}dy + \frac{\partial S}{\partial z}dz \\ &= -E\,dt + \vec{\nabla} W \cdot d\vec{r} \quad . \end{aligned} \tag{132}$$

Wie schnell müssen wir uns von $A$ nach $B$ bewegen, damit sich die Wirkung nicht ändert, um also mit der Wirkungsquelle mitzuwandern? Aus der Forderung

$$dS \overset{!}{=} 0 = -E\,dt + (\vec{\nabla} W \cdot \vec{u})\,dt \tag{133}$$

folgt

$$\vec{\nabla} W \cdot \vec{u} = E \quad . \tag{134}$$

$\vec{u}$ ist senkrecht zur Wellenfront orientiert. $\vec{\nabla} W$ steht senkrecht auf der Fläche $W = \text{const}$, ist somit parallel oder antiparallel zu $\vec{u}$ gerichtet.

$$|\vec{u}| = \frac{|E|}{|\vec{\nabla} W|} \quad . \tag{135}$$

$W$ ist eine Erzeugende vom Typ $F_2$, und es war $p_j = \partial F_2 / \partial q_j$. Damit gilt in unserem Fall für den Teilchenimpuls

$$\vec{p} = \vec{\nabla} W \quad . \tag{136}$$

Der Teilchenimpuls und damit die gesamte Teilchenbahn verlaufen also ebenfalls senkrecht zur Wellenfront $S = \mathrm{const}$, bzw. $W = \mathrm{const.}$

Wirkungswellen- und Teilchengeschwindigkeit sind also antiparallel oder parallel. Für die Beträge gilt

$$u = \frac{|E|}{|\nabla W|} = \frac{|E|}{p} = \frac{|E|}{mv} \tag{137}$$

und somit

$$uv = \frac{|E|}{m} = \mathrm{const.} \tag{138}$$

Teilchen- und Wirkungswellengeschwindigkeit sind also (anti-) parallel orientiert, wobei ihre Beträge umgekehrt proportional sind. Neben der eigentlichen Teilchenbewegung können auch die Wirkungswellen für die Beschreibung des Systems herangezogen werden. Es deutet sich hier bereits ein Teilchen-Welle-Dualismus an, der für die Quantenmechanik noch bedeutsam wird.

Wir formen nun die Hamilton-Jacobi-Differentialgleichung der Teilchenbewegung in eine Wellengleichung für Wirkungswellen um. Wir haben

$$u = \frac{|E|}{p} = \frac{|E|}{\sqrt{2mT}} = \frac{|E|}{\sqrt{2m(E-V)}} \quad . \tag{139}$$

Aus

$$H\left(\vec{q}, \frac{\partial \omega}{\partial q_1}, \cdots, \frac{\partial \omega}{\partial q_s}\right) = E \tag{140}$$

ergibt sich als Hamilton-Jacobi-Differentialgleichung

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial z}\right)^2\right] + V = E \quad , \tag{141}$$

wobei wir in der kinetischen Energie $T = \vec{p}^{\,2}/(2m)$ den Impuls $\vec{p}$ durch $\vec{\nabla} W$ ersetzt haben. Aus (141) folgt

$$|\nabla W|^2 = 2m(E-V) \quad . \tag{142}$$

Der Vergleich mit (139) liefert

$$|\vec{\nabla} W|^2 = \frac{E^2}{u^2} \quad . \tag{143}$$

Wegen

$$\vec{\nabla} W = \vec{\nabla} S \tag{144}$$

und

$$-E = \frac{\partial S}{\partial t} \tag{145}$$

erhalten wir aus (141)

$$(\vec{\nabla} S)^2 = \frac{1}{u^2} \left( \frac{\partial S}{\partial t} \right)^2 \quad . \tag{146}$$

Diese Gleichung beschreibt eine Wellenausbreitung im Rahmen der klassischen Mechanik.

# Eikonaltheorie der Optik

Licht können wir im Rahmen der skalaren Wellengleichung der Optik beschreiben,

$$\nabla^2 \phi - \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = 0 \quad . \tag{147}$$

Hierbei ist $\phi$ das skalare elektromagnetische Potential und $n$ der Brechungsindex eines Mediums mit $n = n(\vec{r})$. Dann ist die Lichtgeschwindigkeit im Medium

$$u = \frac{c}{n} \quad . \tag{148}$$

Wir studieren zunächst einfachste Lösungen der Wellengleichung für $n = \mathrm{const}$. Die ebenen Wellen

$$\phi = \phi_0 \, e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \tag{149}$$

lösen die Wellengleichung mit

$$k = \omega \, \frac{n}{c} = \frac{2\pi\nu}{u} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad . \tag{150}$$

Somit ist auch

$$\begin{aligned} \omega &= 2\pi\nu \quad , \\ u &= \nu\lambda \quad . \end{aligned} \tag{151}$$

Die Richtung des Wellenvektors $\vec{k}$ definiere die $z$-Achse. $\vec{k}_0$ sei der Wellenvektor im Vakuum $(n = 1)$,

$$\begin{aligned} \vec{k} &= n\vec{k}_0 \quad , \\ \omega &= ck_0 \quad . \end{aligned} \tag{152}$$

Wir können dann die Lösung der Wellengleichung auch schreiben als

$$\phi = \phi_0 \, e^{i \, k_0 (nz - ct)} \quad . \tag{153}$$

Jetzt sei $n = n(\vec{r})$. Die Ortsabhängigkeit des Brechungsindex verursacht Beugungen der Lichtwelle. Wir nehmen nun als Näherung an, daß $n$ nur eine schwache räumliche Abhängigkeit aufweist. $n$ sei näherungsweise konstant über das Gebiet der Ausdehnung $\lambda$. Wir machen den Ansatz

$$\phi = \exp\{A(r) + i\,k_0[L(\vec{r}) - ct]\} \quad . \tag{154}$$

Der erste Term legt die Amplitude fest, er ist somit konstant für $n = \mathrm{const}$. Die Größe $L(\vec{r})$ nennt man das Eikonal. Für einen konstanten Brechungsindex folgt einfach $L(\vec{r}) = nz$. Damit folgt

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}\phi &= \phi\left[\vec{\nabla}\left\{A(\vec{r}) + ik_0\,L(\vec{r})\right\}\right] \quad , \\ \vec{\nabla}^{\,2}\phi &= \phi\left[\left\{\vec{\nabla}\left(A(\vec{r}) + ik_0\,L(\vec{r})\right)\right\}^2 + \vec{\nabla}^{\,2}\left\{A(\vec{r}) + ik_0\,L(\vec{r})\right\}\right] \\ &= \phi\left[\left\{\vec{\nabla}\,A(\vec{r})\right\}^2 - k_0^2\left\{\vec{\nabla}\,L(\vec{r})\right\}^2 + 2i\,k_0\left\{\vec{\nabla}\,A(\vec{r})\right\}\cdot\left\{\vec{\nabla}\,L(\vec{r})\right\}\right. \\ &\quad \left. + \,\vec{\nabla}^{\,2}\,A(\vec{r}) + ik_0\,\vec{\nabla}^{\,2}\,L(\vec{r})\right] \quad . \end{aligned} \tag{155}$$

Die Wellengleichung liefert somit

$$\begin{aligned} 0 &= i\,k_0\left[\vec{\nabla}^{\,2}\,L(\vec{r}) + 2\left\{\vec{\nabla}\,A(\vec{r})\right\}\cdot\left\{\vec{\nabla}\,L(\vec{r})\right\}\right] \\ &\quad + \left[\vec{\nabla}^{\,2}\,A(\vec{r}) + \left\{\vec{\nabla}\,A(\vec{r})\right\}^2 - k_0^2\left\{\vec{\nabla}\,L(\vec{r})\right\}^2 + n^2k_0^2\right] \quad . \end{aligned} \tag{156}$$

Real- und Imaginärteil müssen für sich genommen jeweils verschwinden.

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}^{\,2}\,L(\vec{r}) + 2\left\{\vec{\nabla}\,A(\vec{r})\right\}\cdot\left\{\vec{\nabla}\,L(\vec{r})\right\} &= 0 \quad , \\ \vec{\nabla}^{\,2}\,A(\vec{r}) + \left\{\vec{\nabla}\,A(\vec{r})\right\}^2 + k_0^2\left[n^2 - \left\{\vec{\nabla}\,L(\vec{r})\right\}^2\right] &= 0 \quad . \end{aligned} \tag{157}$$

Im Rahmen der geometrischen Optik machen wir jetzt die folgenden Näherungsannahmen:
$A(\vec{r})$ habe nur eine schwache $\vec{r}$-Abhängigkeit und $\lambda_0$ sei klein gegenüber Änderungen im Medium. Wegen $k_0 = 4\pi/\lambda_0^2$ dominiert dann der letzte Term in (157). Dies führt auf eine Eikonalgleichung der geometrischen Optik

$$\left\{\vec{\nabla}\,L(\vec{r})\right\}^2 = n^2 = \frac{c^2}{u^2} \quad . \tag{158}$$

Die Lösungen definieren Flächen konstanter Phase $(L = \mathrm{const})$, d.h. Wellenfronten. Die Strahlentrajektorien oder Bahnen der Lichtstrahlen verlaufen senkrecht zu diesen Wellenfronten.

Die Eikonalgleichung ist formal identisch mit der Wellengleichung der klassischen Mechanik. Zwischen der klassischen Mechanik und der Optik besteht insofern eine Analogie, als die klassische Mechanik über die Wirkungsfunktion $S$ dieselben Aussagen macht wie die geometrische Optik über das Eikonal $L$.

# Heuristische Ableitung der Schrödinger-Gleichung

Wir wollen nun versuchen, die klassische Mechanik als geometrisch-optischen Grenzfall einer Wellenmechanik aufzufassen. Die enge formale Verbindung zwischen geometrischer Optik und klassischer Mechanik legt es auch nahe, die Teilchenbewegung als Wellenbewegung zu interpretieren. Der konkrete Vergleich zwischen Theorie und Experiment wird dann diese Vorstellung rechtfertigen.

Falls ein Teilchen wirklich als Welle interpretierbar ist, sollten wir ihm auch eine Wellenlänge $\lambda$ und eine Frequenz $\nu$ zuordnen können. Entsprechend der Korrespondenz von geometrischer Optik und Hamilton-Mechanik sollte

$$S = W - Et \tag{159}$$

der gesamten Phase $k_0(L - ct)$ entsprechen. Dies impliziert $E \sim ck_0$ und damit $E \sim \nu$. Der Proportionalitätsfaktor muß die Dimension einer Wirkung haben. Dieser Faktor wird durch das Experiment festgelegt. Es gilt

$$E = h\nu \quad . \tag{160}$$

Dies ist das Energiespektrum der Teilchenwelle. Weiter gilt $u = \lambda\nu$. Also folgt

$$\lambda = \frac{u}{\nu} = \frac{E/p}{E/h} \quad . \tag{161}$$

Wir haben somit für die Wellenlänge des Teilchens

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad . \tag{162}$$

Das Experiment bestätigt wieder diese Relation mit dem Plankschen Wirkungsquantum $h$. Wir sehen, daß Energie und Impuls des Teilchens Frequenz und Wellenlänge der Teilchenwelle festlegen. Damit läßt sich also die Teilchenbewegung als Wellenbewegung interpretieren. Zur Wellenoptik gelangt man durch Lösen der Wellengleichung. Mit dem Ansatz für das Zeitverhalten

$$\phi \approx e^{-i\omega t} \tag{163}$$

wird daraus die zeitunabhängige Wellengleichung

$$\vec{\nabla}^2\phi + \frac{\omega^2}{u^2}\,\phi = \vec{\nabla}^2\phi + \frac{4\pi^2}{\lambda^2}\,\phi = 0 \quad . \tag{164}$$

Analog möge der Zustand des Teilchens durch die Wellenfunktion $\Psi = \Psi(\vec{r}, t)$ beschrieben sein, d.h. in der Wellengleichung wird $\phi$ durch $\Psi$ ersetzt. Dann folgt mit

$$\frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{4\pi^2}{h^2}\, p^2 = \frac{1}{\hbar^2}\, 2m(E-V) \tag{165}$$

durch Analogie mit der zeitabhängigen Wellengleichung

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}\,(E-V)\,\Psi = 0 \quad . \tag{166}$$

Dies ist die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung. Wir multiplizieren noch mit $\frac{\hbar^2}{2m}$ und erhalten

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta + V(\vec{r})\right)\,\Psi(\vec{r},t) = E\,\Psi(\vec{r},t) \quad . \tag{167}$$

Dies ist die Eigenwertgleichung für den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta + V(\vec{r}) \tag{168}$$

und wir haben

$$\hat{H}\,\Psi(\vec{r},t) = E\,\Psi(\vec{r},t) \quad . \tag{169}$$

Aus der klassischen Hamilton-Funktion erhalten wir durch Zuordnung

$$\vec{q} \to \vec{r} \quad ; \quad \vec{p} \to -i\hbar\vec{\nabla} \tag{170}$$

den Hamilton-Operator.

Wir lassen auf den Ansatz (163) für das Zeitverhalten der Wellenfunktion den Operator $i\hbar\,\partial/\partial t$ wirken. Es resultiert

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\Psi(\vec{r},t) = i\hbar(-i\omega)\,\Psi(\vec{r},t) = \hbar\omega\,\Psi(\vec{r},t) \quad . \tag{171}$$

Mit dem Zusammenhang $E = \hbar\omega$ erkennen wir die Äquivalenz des Operators in $i\hbar\,\partial/\partial t$ und der Energie $E$. Motiviert durch diese Äquivalenz machen wir für die zeitabhängige Differentialgleichung den Ansatz

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\Psi(\vec{r},t) = \hat{H}\,\Psi(\vec{r},t) \quad . \tag{172}$$

Dies ist die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung.

## Eigenschaften des Schrödinger-Feldes

Die Schrödinger-Gleichung wurde bislang als Differentialgleichung abgeleitet, ohne irgendeine Interpretation der Feldfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$ zu geben. Zum weiteren Verständnis der Feldfunktion werden wir nun Erhaltungssätze ableiten in Anlehnung an die Erhaltungsätze der Elektrodynamik. Hier hatten wir Erhaltungsätze für Energie- und Impulsdichte bzw. Energie- und Impulsströmung abgeleitet. Im Gegensatz zu den reellen Feldstärken der Elektrodynamik, die direkt beobachtbare Größen sind, ist die Feldfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$ der Quantenmechanik jedoch komplexwertig und kann daher keine beobachtbare Größe repräsentieren. Man muß vielmehr aus $\Psi(\vec{r}, t)$ reelle Größen aufbauen, die mit beobachtbaren Größen identifiziert werden können.

Zunächst werden wir eine Kontinuitätsgleichung für Materie ableiten. Wir gehen von der Schrödingerschen Feldgleichung und ihrer konjugiert komplexen Form aus,

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V\Psi = 0 \quad , \tag{173}$$

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi^* + V\Psi^* = 0 \quad . \tag{174}$$

Wir multiplizieren nun (173) mit $\frac{i}{\hbar}\Psi^*$ und (174) mit $-\frac{i}{\hbar}\Psi$ und addieren beide Gleichungen. Es folgt

$$\frac{\partial(\Psi^*\Psi)}{\partial t} + \frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*\right) = 0 \quad . \tag{175}$$

Für den zweiten Term können wir schreiben

$$\Psi^*\,\Delta\Psi - \Psi\,\Delta\Psi^* = \mathrm{div}\left(\Psi^*\,\mathrm{grad}\Psi - \Psi\,\mathrm{grad}\Psi^*\right) \quad . \tag{176}$$

Damit erhalten wir die Form einer Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathrm{div}\vec{j} = 0 \quad , \tag{177}$$

wobei wir formal identifizieren

$$\rho = \Psi^*\Psi \quad , \tag{178}$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*\,\mathrm{grad}\Psi - \Psi\,\mathrm{grad}\Psi^*\right) \quad . \tag{179}$$

Wir integrieren die Kontinuitätsgleichung über den gesamten Raum und erhalten unter Verwendung des Gaussschen Satzes

$$\frac{d}{dt}\int\rho\, d^3x + \int\vec{j}\cdot d\vec{f} = 0 \quad . \tag{180}$$

Stellt man die Forderung, daß durch eine unendlich ferne Kugel kein Strom tritt, so verschwindet das Oberflächenintegral. Damit erhalten wir

$$\int \Psi^*(\vec{r},t)\, \Psi(\vec{r},t)\, d^3x = \mathrm{const.} \tag{181}$$

Die Normierungskonstante wird durch die Schrödinger-Gleichung nicht fixiert. Wir legen sie zunächst etwas willkürlich auf 1 fest, d.h.

$$\int \Psi^*(\vec{r},t)\, \Psi(\vec{r},t)\, d^3x = 1 \quad . \tag{182}$$

Damit ist auch die Dimension der Feldfunktion $\Psi$ eindeutig bestimmt zu

$$\dim \Psi = (\text{Länge})^{-3/2} \quad . \tag{183}$$

## Einbeziehung des klassischen elektromagnetischen Feldes

Das Newtonsche Grundgesetz für die Bewegung eines geladenen Teilchens in einem elektromagnetischen Feld lautet unter Berücksichtigung der Lorentz-Kraft

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(m\vec{v}\right) = q\left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}\right) \quad . \tag{184}$$

Wir wollen diese Gleichung in die Lagrange-Form bringen und daraus die zugehörige Lagrange-Funktion bestimmen. Dazu führen wir die elektromagnetischen Potentiale ein. Es ist

$$\vec{E} = -\mathrm{grad}\,\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} \quad , \tag{185}$$

$$\vec{B} = \mathrm{rot}\,\vec{A} \quad . \tag{186}$$

$q$ ist die Ladung des betrachteten Teilchens. Damit haben wir

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(m\vec{v}\right) = q\left(-\mathrm{grad}\,\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} + \frac{\vec{v}}{c} \times \mathrm{rot}\,\vec{A}\right) \quad . \tag{187}$$

Es gilt jetzt

$$\vec{v} \times \left(\vec{\nabla} \times \vec{A}\right) = \vec{\nabla}\left(\vec{v} \cdot \vec{A}\right) - \left(\vec{v} \cdot \vec{\nabla}\right)\vec{A} \quad . \tag{188}$$

Damit bekommen wir

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\vec{v}) = q\left(-\mathrm{grad}\,\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} - \left(\frac{\vec{v}}{c}\mathrm{grad}\right)\vec{A} + \mathrm{grad}\left(\frac{\vec{v}}{c} \cdot \vec{A}\right)\right) \quad . \tag{189}$$

Nun ist allgemein

$$\frac{\mathrm{d}\vec{A}\left(\vec{r},t\right)}{\mathrm{d}t} = \left(\vec{v}\,\mathrm{grad}\right)\vec{A} + \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} \quad . \tag{190}$$

Damit können wir die Bewegungsgleichung umtransformieren in

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(m\vec{v} + \frac{q}{c}\vec{A}\right) = \mathrm{grad}\left(-q\Phi + q\frac{\vec{v}}{c}\vec{A}\right) \quad . \tag{191}$$

Wir vergleichen dies mit der Euler-Lagrange-Differentialgleichung

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad . \tag{192}$$

Wir identifizieren

$$\frac{\partial L}{\partial x_i}i = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(-q\Phi + q\frac{\vec{v}}{c} \cdot \vec{A}\right) \quad , \tag{193}$$

$$\frac{\partial L}{\partial\dot{x}_i} = m\dot{x}_i + \frac{q}{c}A_i \quad . \tag{194}$$

Aus (193) folgt

$$L = -q\Phi + q\frac{\vec{v}}{c} \cdot \vec{A} + f\left(\dot{\vec{r}}\right) \quad . \tag{195}$$

Wir differenzieren nach $\dot{x}_i$ und vergleichen mit (194). Es resultiert

$$\frac{\partial f}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i \tag{196}$$

und somit

$$f = \frac{1}{2}m\vec{v}^{\,2} \quad . \tag{197}$$

Die Lagrange-Funktion für die nichtrelativistische Bewegung eines geladenen Teilchens in einem vorgegebenen elektromagnetischen Feld lautet also

$$L\left(\vec{r}, \vec{v}, t\right) = \frac{1}{2}m\vec{v}^{\,2} + q\left(\frac{\vec{v}}{c}\vec{A}\left(\vec{r}, t\right) - \Phi\left(\vec{r}, t\right)\right) \quad . \tag{198}$$

Wir differenzieren die Lagrange-Funktion nach der Geschwindigkeit und erhalten damit als kanonischen Impuls

$$\vec{p} = m\vec{v} + \frac{q}{c}\vec{A} \quad . \tag{199}$$

Er setzt sich aus dem mechanischen Impuls $m\vec{v}$ und dem Impuls $\frac{q}{c}\vec{A}$ resultierend aus dem elektromagnetischen Feld zusammen. Mit

$$H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L \tag{200}$$

folgt für die Hamilton-Funktion eines Teilchens im elektromagnetischen Feld

$$H\left(\vec{r}, \vec{p}, r\right) = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\left(\vec{r}, t\right)\right)^2 + q\Phi\left(\vec{r}, t\right) \quad . \tag{201}$$

Beim Übergang von der klassischen Hamilton-Theorie oder der Hamilton-Jacobi Theorie zur Schrödinger-Gleichung haben wir den klassischen Impuls $\vec{p}$ ersetzt durch den Operator $-i\hbar\vec{\nabla}$. Die gleiche Motivation und der gleiche Übergang führt uns jetzt zum Hamilton-Operator der Quantenmechanik

$$\hat{H}\left(\vec{r}, \hat{\vec{p}}, t\right) = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\vec{A}\left(\vec{r}, t\right)\right)^2 + q\Phi \quad , \tag{202}$$

wobei selbstverständlich gilt

$$\Phi\left(\vec{r}, t\right) = V\left(\vec{r}, t\right) \quad . \tag{203}$$

Damit lautet die Schrödinger-Gleichung unter Berücksichtigung des elektromagnetischen Feldes

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2 \psi + qV\left(\vec{r}, t\right)\psi \quad . \tag{204}$$

Den ersten Term aus der rechten Seite quadrieren wir aus

$$\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2 \psi = -\hbar^2\Delta\psi + i\frac{\hbar q}{c}\left(\vec{\nabla}\vec{A}\right)\psi + 2i\frac{\hbar q}{c}\vec{A}\vec{\nabla}\psi + \frac{q^2}{c^2}A^2\psi \quad . \tag{205}$$

Wir hatten im feldfreien Fall für die Dichte $\varrho$ und die Stromdichte $j$ des Schrödinger-Feldes

$$\varrho = \psi^*\psi \quad , \tag{206}$$

$$\vec{j} = \frac{1}{2m}\left(\psi^*\hat{\vec{p}}\psi - \psi\hat{\vec{p}}\psi^*\right) \quad . \tag{207}$$

Berücksichtigen wir das elektromagnetische Feld, so haben wir den kanonischen Impuls in Rechnung zu setzen und substituieren

$$\hat{\vec{p}} \quad \longrightarrow \quad \hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\vec{A} \quad . \tag{208}$$

Damit erhalten wir für die Dichte und die Stromdichte die Ausdrücke

$$\begin{aligned} \varrho &= \psi^*\psi \quad , && (209)\\ \vec{j} &= \frac{1}{2m}\left[\psi^*\left(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)\psi - \psi\left(-i\hbar\vec{\nabla} + \frac{q}{c}\vec{A}\right)\psi^*\right] && (210)\\ &= \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \,\mathrm{grad}\, \psi - \psi \,\mathrm{grad}\, \psi^*\right) - \frac{q^2}{mc}\vec{A}\psi^*\psi \quad . && (211)\end{aligned}$$

Aus der Elektrodynamik wissen wir, daß die elektromagnetischen Potentiale nicht eindeutig fixiert sind und nur bis auf eine Eichtransformation festgelegt sind. Die transformierten Potentiale

$$\begin{aligned} \vec{A} \quad &\longrightarrow \quad \vec{A}' = \vec{A} - \mathrm{grad}\,\lambda \quad , && (212)\\ \Phi \quad &\longrightarrow \quad \Phi' = \Phi + \frac{1}{c}\frac{\partial\lambda}{\partial t} && (213)\end{aligned}$$

erfüllen gleichermaßen die Maxwell-Gleichungen. Die Eichfunktion $\lambda(\vec{r},t)$ hat keine physikalisch beobachtbaren Konsequenzen. Damit lautet die korrespondierende Forderung an die Schrödinger-Theorie, daß die Wahl einer beliebigen Eichfunktion $\lambda(\vec{r},t)$ sich nicht in beobachtbaren Größen manifestieren darf. Wir untersuchen gleichermaßen die Phasentransformation des Schrödinger-Feldes

$$\psi' = \psi e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\lambda} \quad . \tag{214}$$

Mit den Eichtransformationen (212) und (213) lautet die Schrödinger-Gleichung

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi'}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}'\right)^2\psi' + q\Phi'\psi' = 0 \tag{215}$$

mit $\psi'$ aus (214). Damit bekommen wir

$$\begin{aligned} &\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\lambda} + \frac{\hbar}{i}\psi\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\frac{\partial\lambda}{\partial t}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\lambda} + \frac{1}{2m}\left(-\hbar^2\right)\Delta\psi' - \frac{\hbar q}{2mic}\left(\vec{\nabla}\vec{A}'\right)\psi'\\ &-\frac{2\hbar q}{2mic}\vec{A}'\cdot\vec{\nabla}\psi' + \frac{q^2}{c^2}\vec{A}'^2\psi' + q\left(\Phi + \frac{1}{c}\frac{\partial\lambda}{\partial t}\right)\psi e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\lambda} = 0 \quad . \end{aligned} \tag{216}$$

Jetzt ist

$$\vec{\nabla}\psi' = \left(\vec{\nabla}\psi\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\lambda} - \frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\left(\vec{\nabla}\lambda\right)\psi\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\lambda} \tag{217}$$

und weiter

$$\begin{aligned} \Delta\psi' = \vec{\nabla}\left(\vec{\nabla}\psi'\right) = &\left(\vec{\nabla}^2\psi\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\lambda} + \vec{\nabla}\psi\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\vec{\nabla}\lambda\right)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\lambda} -\\ &\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\left(\vec{\nabla}^2\lambda\right)\psi\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\lambda} - \frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\left(\vec{\nabla}\lambda\right)\vec{\nabla}\psi\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\lambda} +\\ &\left(\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\vec{\nabla}\lambda\right)^2\psi\, e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\lambda} \quad . \end{aligned} \tag{218}$$

Wir dividieren (216) durch $e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\lambda}$ und bekommen

$$\begin{aligned}
&\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{\hbar}{i}\psi\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\frac{\partial\lambda}{\partial t}\right)-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\psi\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\vec{\nabla}\lambda\right)-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)\frac{q}{c}\left(\vec{\nabla}^2\lambda\right)\psi\\
&-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\frac{q}{c}\left(\vec{\nabla}\lambda\right)\vec{\nabla}\psi-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\vec{\nabla}\lambda\right)^2\psi-\frac{\hbar q}{2mic}\vec{\nabla}\vec{A}\psi-\frac{\hbar q}{2mic}\left(-\vec{\nabla}\lambda\right)\psi\\
&-\frac{2\hbar q}{2mic}\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\psi-\frac{2\hbar q}{2mic}\vec{A}\psi\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\vec{\nabla}\lambda\right)+\frac{q^2}{2mc^2}\vec{A}^2\psi+\frac{q^2}{2mc^2}\left(\vec{\nabla}^2\lambda\right)-\frac{2}{2m}\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\lambda\frac{q^2}{c^2}\psi\\
&+q\Phi\psi+\frac{q}{c}\frac{\partial\lambda}{\partial t}\psi-\frac{2\hbar q}{2mic}\left(-\vec{\nabla}\lambda\right)\vec{\nabla}\psi-\frac{2\hbar q}{2mic}\left(-\vec{\nabla}\lambda\right)\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{q}{c}\vec{\nabla}\lambda\right)\psi=0
\end{aligned}\tag{219}$$

Es verbleibt somit die bekannte Schrödinger-Gleichung

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi-\frac{\hbar q}{2mic}\left(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}\right)\psi-\frac{2\hbar q}{2mic}\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\psi+\frac{q^2}{2mc^2}\vec{A}^2\psi+q\Phi\,\psi=0 \quad . \tag{220}$$

Die Schrödinger-Gleichung erweist sich also als invariant gegenüber einer kombinierten Transformation — der Eichtransformation der elektromagnetischen Potentiale und der Phasentransformation der Feldfunktion $\psi$. Eine neu gewählte Eichung kann stets kompensiert werden durch eine spezifische Phasenwahl der Funktion $\psi$. Damit darf aber auch die Phase der Funktion keine observablen Konsequenzen haben, denn sonst hätte hierdurch auch die speziell gewählte Eichung der elektromagnetischen Potentiale observable Konsequenzen.

# Das Doppelspaltexperiment

Ein grundlegender Versuch, um ein Verständnis für die Feldfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$ erlangen zu können, ist durch das Doppelspaltexperiment gegeben.

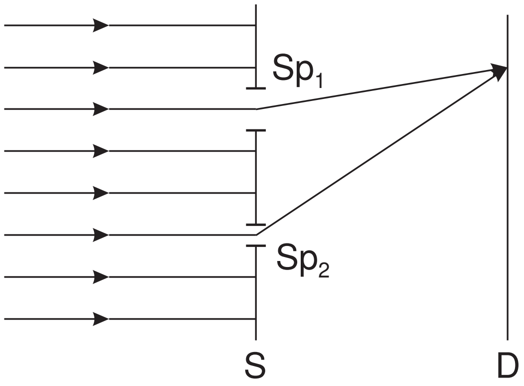


Abbildung 3: Doppelspaltversuch

Bei diesem Doppelspaltexperiment kommt die Dualität zwischen Teilchen und Welle in besonderem Maße zum Ausdruck. Strahlen wir Licht auf einen Schirm mit zwei Spalten Sp1 und Sp2, so können wir im Detektor D, zum Beispiel eine Photoplatte, die Intensitätsverteilung der Strahlung messen. Die Intensität hängt vom Ort $x$ auf dem Detektorsystem D ab. Wir haben gerade eine optische Beugungsanordnung vorliegen. Die Intensitätsverteilung ist in der nachfolgenden Figur schematisch angegeben:

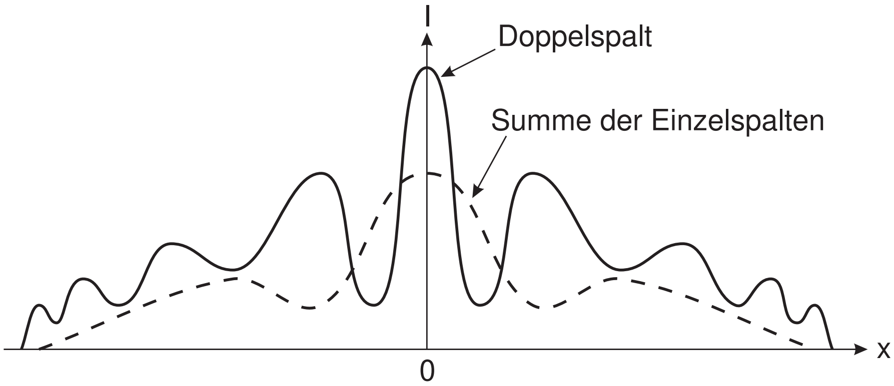


Abbildung 4: Schematische Darstellung der Intensitätsverteilung beim Doppelspaltversuch

Schließen wir einen Spalt, zum Beispiel Sp2, so können wir die Intensitätsverteilung $I_1(x)$ messen. Analog resultiert $I_2(x)$, wenn wir Sp1 schließen. Als Summe dieser beiden Intensitätsverteilungen würden wir naiverweise beim Öffnen beider Spalte zunächst erwarten

$$I_{12}(x) = I_1(x) + I_2(x) \quad . \tag{221}$$

$I_{12}(x)$ ist schematisch durch die gestrichelte Linie in der obigen Darstellung angegeben. $I_{12}$ entspricht in der Tat dem Meßergebnis, wenn wir klassische Teilchen, zum Beispiel klassische Metallkugeln, durch den Doppelspalt schicken. Bei Licht jedoch ist aufgrund des Wellencharakters

$$I(x) \neq I_{12}(x) \tag{222}$$

Vielmehr müssen Interferenzeffekte in Rechnung gestellt werden. Bei Lichtstrahlen ergibt sich die Intensität durch das Absolutbetragsquadrat einer Amplitude $A$,

$$I_1(x) = |A_1(x)|^2 \quad , \tag{223}$$

$$I_2(x) = |A_2(x)|^2 \quad . \tag{224}$$

Für die Gesamtintensität folgt aber

$$I(x) = |A_1 + A_2|^2 \neq |A_1|^2 + |A_2|^2 \quad . \tag{225}$$

Lassen wir jetzt von links einen Elektronenstrahl auf die Doppelspaltanordnung treffen, so stellen wir die gleichen Interferenzerscheinungen wie in der Optik fest. Das Detektorsystem möge jetzt aus einer großen Ansammlung von Einzeldetektoren zum Nachweis einzelner Elektronen bestehen. Wir verringern jetzt die Intensität der einfallenden Elektronen derart, daß nur noch einzelne Elektronen auf den Doppelspalt fallen. In einem der vielen Detektoren im System D spricht dann genau ein Detektor an. Wiederholen wir den Versuch, so spricht möglicherweise — und dies ist sehr wahrscheinlich — ein anderer Detektor an. Nach vielen derartigen Einzelversuchen erhalten wir genau die aus der Optik bekannte Intensitätsverteilung. Die Bahn eines einzelnen Elektrons ist nicht determiniert. Vielmehr kann man nur Wahrscheinlichkeitsaussagen über den Ausgang von Messungen machen. Das einzelne mikroskopische Objekt, zum Beispiel ein Elektron, zeigt ein statistisches Verhalten bezüglich der Observablen. Das Elektron verhält sich nicht wie ein klassisches Partikel. Auch dem einzelnen Elektron können wir nicht zuordnen, daß es entweder durch den Spalt Sp1 oder durch den Spalt Sp2 geht. Vielmehr geht es durch den Spalt Sp1 als auch durch Sp2. Stellen wir jedoch durch zusätzliche Detektoren fest, daß das Elektron definitiv durch den Spalt Sp1 wandert, so repräsentiert die Meßapparatur einen derart gravierenden Eingriff in das physikalische Geschehen, daß wir im Detektorsystem D in der Tat nur die Intensitätsverteilung $I_1(x)$ beobachten. Die Meßapparatur selbst kann nicht als unabhängiger, außen stehender Beobachter verstanden werden sondern ist integraler Bestandteil des gesamten Versuchsaufbaus und bestimmt entscheidend das Versuchsergebnis.

Das statistische Verhalten eines einzelnen Elektrons im Doppelspaltversuch legt es nahe, an Stelle einer determinierten Elektronenbahn, eine Wahrscheinlichkeitsamplitude für jeden Raumpunkt $\vec{r}$ zur Zeit $t$ einzuführen, die es erlaubt, die Wahrscheinlichkeit für das Eintreffen eines Meßwertes — repräsentiert durch eine bestimmte Meßapparatur — zu berechnen. Neben dem Doppelspaltexperiment gibt es eine Vielzahl äquivalenter Versuchsanordnungen, die belegen, daß die Wahrscheinlichkeitsamplitude durch die Schrödingersche Feldfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$ gegeben ist. Die Intensitätsverteilung $I(x)$ auf dem Detektorsystem $D$ ist dann durch die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\varrho(\vec{r}, t) = \Psi^*(\vec{r}, t)\, \Psi(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \tag{226}$$

gegeben. Mittels der Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Psi(\vec{r}, t)$, die die Schrödinger-Gleichung befriedigt, ist die Wahrscheinlichkeit für das Antreffen des Elektrons im Volumenelement $\mathrm{d}^3 r$ am Orte $\vec{r}$ zur Zeit $t$ gegeben durch $|\Psi(\vec{r}, t)|^2\, \mathrm{d}^3 r$. Das Integral über den gesamten Raum muß dieser Interpretation zufolge gerade 1 ergeben.

Die Schrödinger-Theorie ist daher eine Theorie, die inhärent nur statistische Aussagen machen kann.

# Zur Lösung der Schrödinger-Gleichung

Wir starten unsere Betrachtung von der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V(\vec{r})\,\Psi = 0 \quad . \tag{227}$$

Um die Zeitabhängigkeit zu separieren machen wir den Produktansatz

$$\Psi(\vec{r},t) = u(\vec{r})\,T(t) \quad . \tag{228}$$

Nach Division durch $\Psi$ erhalten wir damit aus der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\dot{T}}{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta u}{u} + V(\vec{r}) = \text{const.} \tag{229}$$

Aufgrund der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung $\hat{H}\Psi = E\Psi$ setzen wir diese Separationskonstante gleich $E$. Damit bekommen wir für die Zeitfunktion

$$\dot{T} + \frac{iET}{\hbar} = 0 \tag{230}$$

und somit

$$T(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad . \tag{231}$$

Der ortsabhängige Teil der Wellenfunktion erfüllt die Differentialgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u + Vu = Eu \quad . \tag{232}$$

Die Lösungen $u(\vec{r})$ hängen von der speziellen Gestalt des Potentials $V(\vec{r})$ ab. Da $u(\vec{r})$ als Wahrscheinlichkeitsamplitude normierbar sein muß, schränkt dies die mögliche Lösungsmannigfaltigkeit weiter ein. Im allgemeinen wird es nicht für jeden Wert von $E$ eine Lösung geben. Diejenigen Werte $E$, für die wir eine Lösung von (232) finden, nennen wir Eigenwerte der Energie. Entsprechend sind die zugehörigen Lösungen $u_E(\vec{r})$ Eigenfunktionen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung.

Wird die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung bei fester Energie E durch mehrere Eigenfunktionen $u_E^\mu(\vec{r})$ mit $\mu = 1, \ldots, s_E$ befriedigt, die sich nicht bloß um einen konstanten Faktor unterscheiden, so nennt man den Eigenwert $E$ entartet, und zwar $s_E$-fach, wenn es $s_E$ unabhängige Eigenfunktionen $u_E(\vec{r})$ gibt. Wegen der Linearität der Schrödinger-Gleichung ist dann mit $u_E^\mu(\vec{r})$ auch jede Linearkombination

$$u_E(\vec{r}) = \sum_{\mu=1}^{s_E} c^\mu u_E^\mu(\vec{r}) \tag{233}$$

mit beliebigen Konstanten $c^\mu$ ebenfalls eine Lösung der Schrödinger-Gleichung, d.h. eine Eigenfunktion zum gleichen Eigenwert $E$. Die mit $u_E(\vec{r})$ gebildete Gesamtlösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung nennt man stationär,

$$\Psi(\vec{r},t) = u_E(\vec{r})\,e^{-iEt/\hbar} \quad . \tag{234}$$

Die damit berechneten Observablen des Schrödinger-Feldes sind zeitunabhängig. Beispielsweise folgt für die Dichte $\varrho$

$$\varrho\,(\vec{r},t) = |\Psi\,(\vec{r},t)|^2 = |u_E\,(\vec{r}\,)|^2 = \varrho\,(\vec{r}\,) \quad . \tag{235}$$

Da die Schrödingersche Feldgleichung linear ist, sind auch alle Linearkombinationen von Partikularlösungen mit willkürlichen von $E$ abhängigen Koeffizienten ebenfalls Lösungen der Schrödinger-Gleichung,

$$\Psi\,(\vec{r},t) = \sum_E c_E\, u_E\,(\vec{r}\,)\, e^{-iEt/\hbar} + \int c(E)\, u_E\,(\vec{r}\,)\, e^{-iEt/\hbar}\,\mathrm{d}E \quad . \tag{236}$$

Die Summe läuft dabei über die möglichen diskreten Werte von $E$, das Integral über die kontinuierlichen $E$-Werte. Diese beiden Möglichkeiten schreiben wir zusammenfassend als

$$\Psi\,(\vec{r},t) = \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_E c_E\, u_E\,(\vec{r}\,)\, e^{-iEt/\hbar}\,\mathrm{d}E \quad . \tag{237}$$

Unter Berücksichtigung der Entartung folgt allgemein

$$\Psi\,(\vec{r},t) = \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{E,\mu} c_E^\mu\, u_E^\mu\,(\vec{r}\,)\, e^{-iEt/\hbar}\,\mathrm{d}E\,\mathrm{d}\mu \quad . \tag{238}$$

## Lösung der Schrödinger-Gleichung für den unendlichen Potentialtopf

Als erstes Anwendungsbeispiel betrachten wir einen eindimensionalen unendlichen hohen Potentialtopf mit

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty \qquad \text{für} \qquad x < 0 \quad , \\ V(x) &= 0 \qquad \text{für} \qquad 0 < x < a \quad , \\ V(x) &= \infty \qquad \text{für} \qquad x > a \quad . \end{aligned} \tag{239}$$

Wir wollen die Lösungen der eindimensionalen, zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_E}{dx^2} = [V(x) - E]\; u_E(x) \tag{240}$$

bestimmen. Die unendlichen hohen Wände können beispielsweise den Rand eines Gefäßes symbolisieren, in den ein mikroskopisches Teilchen absolut nicht eindringen kann. Entsprechend der Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Lösungsfunktion hält sich das Teilchen innerhalb des Gebietes $0 < x < a$ auf, und es gilt am Rand

$$u_E(0) = u_E(a) = 0 \quad . \tag{241}$$

Als Lösungsansatz von (240) wählen wir

$$u_E(x) = A\ \sin(kx + \delta) \tag{242}$$

mit

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad . \tag{243}$$

Wir setzen dies in die Differentialgleichung (240) ein und erhalten

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{2mE}{\hbar^2}(-A)\sin(kx+\delta) = -E\,A\sin(kx+\delta) \quad . \tag{244}$$

Offensichtlich rechtfertigt dies unseren Ansatz. Jetzt wollen wir die Randbedingungen ausnutzen und finden

$$\delta = 0 \tag{245}$$

und

$$k = \frac{n\pi}{a} \tag{246}$$

mit $n = 1, 2 \cdots$

Die möglichen Energiewerte sind damit

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2 n^2}{a^2} \quad . \tag{247}$$

Aus der Normierungsbedingung

$$\int_0^a |u_n|^2 \, dx = 1 \tag{248}$$

folgt mit $u_n = A \, \sin(n\pi x/a)$

$$|A| = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad . \tag{249}$$

Somit haben wir

$$u_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \, \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad . \tag{250}$$

Die Energieeigenwerte sind diskret und wachsen quadratisch mit $n$ an.

Die vorgelegte Rechnung läßt sich leicht auf einen undurchlässigen dreidimensionalen Kasten mit den Seiten $a, b$ und $c$ erweitern. Wir wählen für die Differentialgleichung

$$\Delta u + k^2 u = 0 \tag{251}$$

als Partikulärlösungen die Produktfunktionen

$$u(x, y, z) = A \, \sin(k_x x + \delta_x) \, \sin(k_y y + \delta_y) \, \sin(k_z z + \delta_z) \tag{252}$$

mit

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad . \tag{253}$$

Das Verschwinden von $u$ in den sechs Ebenen $x = 0,\ y = 0,\ z = 0,\ x = a,\ y = b,\ z = c$ liefert die Bedingung

$$\delta_x = \delta_y = \delta_z = 0 \tag{254}$$

und

$$k_x = \frac{n_x \pi}{a} \quad , \tag{255}$$
$$k_y = \frac{n_y \pi}{b} \quad , \tag{256}$$
$$k_z = \frac{n_z \pi}{c} \tag{257}$$

mit ganzzahligen $n_x, n_y, n_z > 0$. Zu den möglichen Energiewerten

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left[ \left(\frac{n_x}{a}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{b}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{c}\right)^2 \right] \tag{258}$$

gehören die Eigenfunktionen

$$u_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = A \, \sin\frac{n_x \pi x}{a} \, \sin\frac{n_y \pi y}{b} \, \sin\frac{n_z \pi z}{c} \quad . \tag{259}$$

Wird im Spezialfall aus dem Kasten ein Würfel mit $a = b = c$, so gehören zu einem Energieeigenwert

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \, n^2 \tag{260}$$

mit

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \tag{261}$$

im allgemeinen mehrere Eigenfunktionen

$$u_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = A \, \sin\frac{n_x \pi x}{a} \, \sin\frac{n_y \pi y}{a} \, \sin\frac{n_z \pi z}{a} \quad . \tag{262}$$

Für den allgemeinen Kasten mit den Kantenlängen $a, b$ und $c$ notieren wir noch die Normierungskonstante der Eigenfunktion (259). Sie ergibt sich zu

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}} \sqrt{\frac{2}{b}} \sqrt{\frac{2}{c}} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \quad . \tag{263}$$

Zu betonen bleibt, daß das Energieeigenwertspektrum diskret ist und daß die Energieeigenwerte aus dem Verhalten der Wellenfunktion am Potentialrand resultieren.

# Das Wasserstoffproblem

Mit den ersten gewonnenen Vorkenntnissen zur Schrödinger-Gleichung sowie unseren Kenntnissen aus der Elektrodynamik, die sich auf die Eigenschaften der Kugelfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ beziehen, können wir bereits jetzt vorpreschen und die Lösung der Schrödinger-Gleichung für ein Elektron im Coulomb-Potential eines punktförmigen Atomkerns ableiten. Das Elektron hat die Ladung $q = -e$, d.h. es ist negativ geladen mit

$$e = 1.602\,177\,33 \cdot 10^{-19}\,\mathrm{Cb} \quad . \tag{264}$$

Der Atomkern ist positiv geladen und hat die Ladung $Ze$. $Z$ gibt die Ordnungszahl oder die Zahl der Protonen im Atomkern an. Im einfachsten Fall ist $Z = 1$. Dies gilt für das Wasserstoff-Atom. Die Ladung des Elektrons und des Protons kompensieren sich gerade. Nach außen hin ist das Wasserstoff-Atom neutral. Für das schwerste in der Natur vorkommende Element, dem Uran, gilt $Z = 92$. Ist ein einzelnes Elektron gebunden im Coulomb-Potential eines ansonsten nackten Uran-Kerns, so spricht man von wasserstoffartigem Uran. Dieses hochgeladene Ion hat nach außen hin die Gesamtladung $Q = +91e$. Die innere Struktur eines Atomkerns wird im folgenden vernachlässigt, d.h. wir gehen von einer Punktladung im atomaren Zentrum aus. Da sich Elektronen in einem relativ großen Abstand um einen Atomkern bewegen, ist diese Näherung weitgehend gerechtfertigt. Die potentielle Energie für die Wechselwirkung zwischen den beiden Punktladungen des Atomkerns und des Elektrons ist demnach

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad . \tag{265}$$

Dies ist das Coulomb-Potential. Es hat die gleiche radiale Abhängigkeit wie das Newtonsche Gravitationspotential zwischen zwei Himmelskörpern. Das Coulomb-Potential ist sphärisch symmetrisch, d.h. es weist keinerlei Winkelabhängigkeit auf. Eine spezifische Zeitabhängigkeit liegt ebenfalls nicht vor, d.h. wir können von der stationären Schrödinger-Gleichung ausgehen,

$$\hat{H} u(\vec{r}) = E\, u(\vec{r}) \tag{266}$$

mit

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^{\,2} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{r} \quad . \tag{267}$$

Die Gesamtwellenfunktion ist dann bestimmt durch

$$\Psi(\vec{r}, t) = u(\vec{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad . \tag{268}$$

Aufgrund der sphärischen Symmetrie des Coulomb-Potentials und der rein radialen Abhängigkeit bietet sich die Verwendung von Kugelkoordinaten bei der Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung an. Infolgedessen stellen wir den Laplace-Operator $\Delta$ in Kugelkoordinaten dar

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\nabla^2_{\vartheta,\varphi}}{r^2} \tag{269}$$

mit

$$\nabla^2_{\vartheta,\varphi} = \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\,\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \quad . \tag{270}$$

$\nabla^2_{\vartheta,\varphi}$ ist der Laplacesche Operator für die Kugelfläche. Bereits in der Elektrodynamik hatten wir es bei der Diskussion der Laplace-Gleichung, der Poisson-Gleichung und bei der Multipolentwicklung mit dem Operator $\nabla^2_{\vartheta,\varphi}$ zu tun. Wir hatten gefunden, daß gilt

$$\nabla^2_{\vartheta,\varphi}\,\Theta(\vartheta,\varphi) = \lambda\,\Theta(\vartheta,\varphi) \quad . \tag{271}$$

Für den Eigenwert $\lambda$ gilt dabei

$$\lambda = -l(l+1) \quad , \tag{272}$$

wobei $l$ eine positive ganze Zahl ist. Die Eigenfunktionen $\Theta(\vartheta,\varphi)$ waren die Kugelflächenfunktionen

$$\Theta(\vartheta,\varphi) = Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \tag{273}$$

mit

$$l = 0, 1, 2, \cdots \tag{274}$$
$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm l \quad . \tag{275}$$

$m$ nimmt insgesamt $2l+1$ Werte an. Die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}$ sind definiert durch

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{(l-|m|)!\,(2l+1)}{(l+|m|)!\,4\pi}}\,P_l^{|m|}(\cos\vartheta)\,e^{im\varphi} \quad . \tag{276}$$

Die gesamte $\varphi$-Abhängigkeit steckt im letzten Faktor und ist durch eine einfache Exponentialfunktion gegeben. Die verallgemeinerte Legendre-Polynome $P_l^{|m|}(\cos\vartheta)$ lassen sich aus den Legendre-Polynomen $P_l(\cos\vartheta)$ wie folgt ermitteln

$$P_l^{|m|}(\xi) = (1-\xi^2)^{|m|/2}\,\frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}}P_l(\xi) \tag{277}$$

mit der Abkürzung

$$\xi = \cos\vartheta \quad . \tag{278}$$

Die Legendre-Polynome sind definiert durch

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} \left[ (\xi^2 - 1)^l \right] \quad . \tag{279}$$

Der Vorfaktor, der in der Definition (276) der Kugelflächenfunktionen vor den verallgemeinerten Legendre-Polynomen steht, ist so gewählt, daß die orthogonalen Funktionen $Y_{lm}$ auf der Kugeloberfläche mit dem Kugelradius Eins auch auf Eins normiert sind, d.h.

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} Y^*_{l',m'}(\vartheta,\varphi)\, Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)\ \sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi = \delta_{l'l} \equiv \delta_{m'm} \quad . \tag{280}$$

Die Koordinaten $\vartheta$ und $\varphi$ bezeichnen Punkte auf der Kugeloberfläche. Das Flächenelement der Kugeloberfläche ist gleich $\sin\vartheta\, d\vartheta\, d\varphi$. Die einfachsten Kugelkoordinaten sind

$$\begin{aligned}
Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad , && (281)\\
Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\vartheta \quad , && (282)\\
Y_{1,\pm 1} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\vartheta\, e^{\pm i\varphi} \quad , && (283)\\
Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2\vartheta - 1) \quad , && (284)\\
Y_{2,\pm 1} &= \pm\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin\vartheta \cos\vartheta\, e^{\pm i\varphi} \quad , && (285)\\
Y_{2,\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2\vartheta\, e^{\pm 2i\varphi} \quad . && (286)
\end{aligned}$$

Nach der Diskussion der Winkelabhängigkeit kehren wir jetzt zurück zur stationären Schrödinger-Gleichung (266) mit dem Hamilton-Operator (267) und (269). Für die Wellenfunktion $u(\vec{r})$ machen wir einen Produktansatz

$$u(\vec{r}) = R(r)\, \Theta(\vartheta,\varphi) \quad . \tag{287}$$

Wir setzen jetzt diesen Separationsansatz in die stationäre Schrödinger-Gleichung ein. Es folgt

$$\begin{aligned}
\hat{H}\, u(\vec{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Theta(\vartheta,\varphi) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} R(r) \cdot \nabla_{\vartheta,\varphi}\, \Theta(\vartheta,\varphi) \\
&\quad - \frac{Ze^2}{r} R(r)\, \Theta(\vartheta,\varphi) \\
&= E\, R(r)\, \Theta(\vartheta,\varphi) \quad . && (288)
\end{aligned}$$

Wir dividieren die gesamte Gleichung durch $\frac{\hbar^2}{2m} R(r)\,\Theta(\vartheta,\varphi)$ und erhalten

$$+\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{R(r)}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r)-\frac{Ze^2}{r}-E\right]=\frac{1}{\Theta(\vartheta,\varphi)}\nabla^2_{\vartheta,\varphi}\,\Theta(\vartheta,\varphi) \tag{289}$$

Die linke Seite von (289) hängt nur von der radialen Komponente $r$ ab, die rechte Seite nur von den Winkeln $\vartheta,\varphi$. Damit müssen bei beliebigen Variationen der Koordinaten $r$, $\vartheta$ und $\varphi$ beide Seiten konstant sein. Die Separationskonstante ist $\lambda$, und wir haben

$$\frac{1}{\Theta(\vartheta,\varphi)}\,\nabla^2_{\vartheta,\varphi}\,\Theta(\vartheta,\varphi)=\lambda \tag{290}$$

und somit

$$\nabla^2_{\vartheta,\varphi}\,\Theta(\vartheta,\varphi)=\lambda\,\Theta(\vartheta,\varphi) \quad . \tag{291}$$

Der Vergleich führt mit (271) und (272) führt auf

$$\lambda=-l(l+1) \quad . \tag{292}$$

Die Winkelanteile der Wellenfunktion werden damit auch beschrieben durch

$$\Theta(\vartheta,\varphi)=Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \quad . \tag{293}$$

Als Radialgleichung resultiert somit aus (289)

$$\frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{R(r)}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r)-\frac{Ze^2}{r}-E\right]=-l(l+1) \tag{294}$$

und weiter

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r)+\frac{\hbar^2\,l(l+1)}{2mr^2}R(r)-\frac{Ze^2}{r}R(r)=E\,R(r) \quad . \tag{295}$$

Aus der ursprünglichen Schrödinger-Gleichung als partieller Differentialgleichung ist mit (295) nunmehr eine gewöhnliche Differentialgleichung für die rein radiale Funktion $R(r)$ entstanden. Wir wollen die radiale Differentialgleichung (295) noch weiter in ihrer Struktur vereinfachen. Dazu machen wir den Ansatz

$$R(r)=\frac{v(r)}{r} \quad . \tag{296}$$

Somit folgt

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\frac{v(r)}{r} &= \frac{\partial}{\partial r}\left[r^2\left(-\frac{v(r)}{r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial v(r)}{\partial r}\right)\right] = \frac{\partial}{\partial r}\left[-v(r)+r\,\frac{\partial v(r)}{\partial r}\right] \\
&= -\frac{\partial v(r)}{\partial r}+\frac{\partial v(r)}{\partial r}+r\,\frac{\partial^2 v(r)}{\partial r^2} = r\,\frac{\partial^2 v(r)}{\partial r^2} \quad . \qquad (297)
\end{aligned}
$$

Also haben wir insgesamt

$$
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2\,v(r)}{dr^2} \quad . \qquad (298)
$$

Die radiale Schrödinger-Gleichung lautet somit

$$
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 v(r)}{dr^2}+\frac{\hbar^2\,l(l+1)}{2mr^2}v(r)-\frac{Ze^2}{r}v(r) = E\,v(r) \quad . \qquad (299)
$$

Zunächst wollen wir uns mit dem asymptotischen Verhalten der Lösungsfunktion $v(r)$ für $r \to \infty$ beschäftigen. Für große Werte von $r$ können wir in (299) den Term proportional zu $l(l+1)$ vernachlässigen. Ferner verschwindet auch das Potential für $r \to \infty$, und es verbleibt

$$
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 v}{dr^2} = Ev \quad . \qquad (300)
$$

Wir machen eine Fallunterscheidung und setzen

$$
k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \text{für} \qquad E > 0 \qquad (301)
$$

und

$$
\lambda^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \text{für} \qquad E < 0 \quad . \qquad (302)
$$

Damit erhalten wir für die allgemeine Lösung von (300)

$$
v(r) = C_1\,e^{ikr}+C_2\,e^{-ikr} \qquad \text{für} \qquad E > 0 \qquad (303)
$$

und

$$
v(r) = C_1\,e^{-\lambda r}+C_2\,e^{\lambda r} \qquad \text{für} \qquad E < 0 \quad . \qquad (304)
$$

$C_1$ und $C_2$ sind zunächst beliebige Konstanten. Wir wollen uns im folgenden zunächst mit den gebundenen Zuständen mit negativer Gesamtenergie beschäftigen. Hier ist

$$R = C_1 \frac{e^{-\lambda r}}{r} + C_2 \frac{e^{\lambda r}}{r} \quad . \tag{305}$$

Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron zwischen $r$ und $r + dr$ zu finden, ist proportional zu $|R|^2$ und dem Volumen $4\pi r^2\, dr$ der Kugelschale. Die Gesamtwahrscheinlichkeit ist auf Eins normiert. Damit ist die Wellenfunktion $R(r)$ nur normierbar, wenn gilt

$$C_2 = 0 \quad . \tag{306}$$

Damit haben wir für große $r$

$$R = C_1 \frac{e^{-\lambda r}}{r} \tag{307}$$

und

$$\omega(r)\, dr = 4\pi\, |C_1|^2\, e^{-2\lambda r} \quad . \tag{308}$$

Für große $r$ strebt also die Wahrscheinlichkeit $\omega(r) \to 0$, d.h. das Teilchen hält sich nur in der Nähe des Kraftzentrums auf. Solche Zustände entsprechen den geschlossenen Bahnen der klassischen Mechanik, auf denen sich das Teilchen um das Kraftzentrum bewegt.

Wir wenden uns wieder der Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung (299) zu. Wir stellen uns die Aufgabe, die Energieeigenwerte für den Fall $E < 0$ und die entsprechenden Eigenfunktionen $v(r)$ und damit $R(r)$ zu ermitteln. Zur bequemen Lösung betrachten wir statt $r$ und $E$ die dimensionalen Größen

$$\rho = \frac{r}{a} \tag{309}$$

und

$$\varepsilon = \frac{E}{E_1} \tag{310}$$

mit dem Bohrschen Radius

$$a = \frac{\hbar^2}{me^2} = 52\,917.724\,9 \text{ fm} \tag{311}$$

und der Rydberg-Konstanten

$$E_1 = \frac{me^4}{2\hbar^2} = \frac{e^2}{2a} = 13.605\,698\,1 \text{ eV} \quad . \tag{312}$$

Es ist

$$\frac{dv}{dr} = \frac{dv}{d\rho}\,\frac{d\rho}{dr} = \frac{1}{a}\,\frac{dv}{d\rho} \tag{313}$$

und weiter

$$\frac{d^2v}{dr^2} = \frac{1}{a^2}\,\frac{d^2v}{d\rho^2} \quad . \tag{314}$$

Aus (299) wird damit

$$-\frac{\hbar^2}{2}\,\frac{1}{a^2}\,\frac{d^2v}{d\rho^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{l(l+1)}{a^2\rho^2}v - \frac{Ze^2}{a\rho}v = Ev \tag{315}$$

und nach Multiplikation mit $-2a/e^2$

$$\frac{\hbar^2}{mae^2}\,\frac{d^2v}{d\rho^2} - \frac{\hbar^2}{mae^2}\,\frac{l(l+1)}{\rho^2}v + \frac{2Z}{\rho}v + \frac{2Ea}{e^2}v = 0 \quad , \tag{316}$$

also

$$\frac{d^2v}{d\rho^2} + \left[\varepsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] v = 0 \quad . \tag{317}$$

Diese Differentialgleichung beinhaltet nur dimensionslose Größen.

Entsprechend der Untersuchungen zum asymptotischen Verhalten machen wir nun einen weiteren Ansatz

$$v(\rho) = e^{-\alpha\rho}\,f(\rho) \tag{318}$$

mit

$$\alpha = \sqrt{-\varepsilon} \quad . \tag{319}$$

Jetzt ist $f(\rho)$ die neue gesuchte Funktion. Man beachte, daß $\varepsilon$ negativ ist. Mit dem gewählten Ansatz folgt

$$\frac{dv}{d\rho} = -\alpha\,e^{-\alpha\rho}\,f(\rho) + e^{-\alpha\rho}\,\frac{df}{d\rho} \tag{320}$$

und weiter

$$
\begin{aligned}
\frac{d^2 v}{d\rho^2} &= +\alpha^2\, e^{-\alpha\rho}\, f(\rho) - \alpha\, e^{-\alpha\rho}\, \frac{df}{d\rho} - \alpha\, e^{-\alpha\rho}\, \frac{df}{d\rho} + e^{-\alpha\rho}\, \frac{d^2 f}{d\rho^2} \\
&= \alpha^2\, e^{-\alpha\rho} f(\rho) - 2\alpha\, e^{-\alpha\rho}\, \frac{df}{d\rho} + e^{-\alpha\rho}\, \frac{d^2 f}{d\rho^2} \quad . \qquad (321)
\end{aligned}
$$

Wir setzen dies in (317), berücksichtigen dabei, daß gilt $\alpha^2 = -\varepsilon$ und dividieren durch $e^{-\alpha\rho}$. Es folgt

$$
\frac{d^2 f}{d\rho^2} - 2\alpha\, \frac{df}{d\rho} + \left[ \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] f = 0 \quad . \qquad (322)
$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung setzen wir in Form einer Potenzreihe in $\rho$ an. Dazu studieren wir zunächst die Differentialgleichung für $f$ für sehr kleine Werte von $\rho$. Hier dominiert der erste und letzte Term, und wir können näherungsweise schreiben

$$
\frac{d^2 f}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\, f = 0 \quad . \qquad (323)
$$

Wir erkennen sofort, daß der simple Ansatz

$$
f(\rho) = \rho^{l+1} \qquad (324)
$$

diese Differentialgleichung löst. Also machen wir für die allgemeinere Differentialgleichung (322) den Potenzreihenansatz

$$
f(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu\, \rho^\nu \quad , \qquad (325)
$$

wobei die $a_\nu$ vorläufig unbekannte Entwicklungskoeffizienten darstellen. Die angesetzte Potenzreihe muß die Bedingung erfüllen, daß die vollständige Radialfunktion

$$
R(\rho) = \frac{e^{-\alpha\rho}\, f(\rho)}{\rho} \qquad (326)
$$

für $\rho \to \infty$ beschränkt bleibt.

Um die Entwicklungskoeffizienten $a_\nu$ zu bestimmen, setzen wir den Ansatz (325) in (322) ein. Es resultiert

$$
\sum_\nu \left\{ a_{\nu+1} \left[ (\nu+l+2)(\nu+l+1) - l(l+1) \right] + a_\nu \left[ 2Z - 2\alpha(\nu+l+1) \right] \right\} \rho^{\nu+l} = 0 \quad . \qquad (327)
$$

Damit diese Reihe eine Lösung der Differentialgleichung ist, muß jeder einzelne Koeffizient für $\nu = 0$ bis $\infty$ verschwinden, d.h.

$$a_{\nu+1}\left[(\nu+l+2)(\nu+l+1)-l(l+1)\right]+a_\nu\left[2Z-2\alpha(\nu+l+1)\right]=0 \quad . \tag{328}$$

Somit erhalten wir die Rekursionsbeziehung

$$a_{\nu+1}=\frac{2\alpha(\nu+l+1)-2Z}{(\nu+l+2)(\nu+l+1)-l(l+1)}\,a_\nu \tag{329}$$

für $\nu = 0, 1, 2, \cdots$

Der Koeffizient $a_0$ ist zunächst beliebig und wird später durch die Normierungsbedingung festgelegt. Die angegebene Reihe konvergiert für alle Werte von $\rho$. Jedoch steigt die Funktion $f(\rho)/\rho$ mit $e^{2\alpha\rho}$ stärker exponential an, als es durch den Ansatz $e^{-\alpha\rho}$ vorgegeben ist. Damit ist keine Kompensation gegeben, und die Radialfunktion $R(\rho)$ wäre für $\rho \to \infty$ nicht beschränkt.

Die einzige Möglichkeit für eine normierbare Lösung ist dann gegeben, wenn die Reihe (325) bei einem gewissen Glied mir $\nu = n_r$ abbricht. Dann entartet die unendliche Reihe zu einem Polynom. Aufgrund der Rekursionsbeziehung (329) sind dann auch alle höheren Terme mit $\nu > n_r$ gleich Null. Es ist genau diese Abbruchbedingung, die die Größe $\alpha$ und damit den Energieeigenwert fixiert. Damit der Koeffizient $a_{n_r+1}$ gleich Null wird, muß offensichtlich gelten

$$2\alpha(n_r+l+1)-2Z=0 \tag{330}$$

und somit

$$\alpha=\frac{Z}{n_r+l+1} \quad . \tag{331}$$

$n_r$ und $l$ sind ganze Zahlen mit $n_r \geq 0$ und $l \geq 0$. Wir definieren jetzt die ganze Zahl

$$n=n_r+l+1 \tag{332}$$

mit $n \geq 1$. Mit $\alpha$ aus (319) und (310) bzw. (312) erhalten wir

$$\varepsilon=-\frac{Z^2}{n^2} \tag{333}$$

und schließlich die Energieeigenwerte

$$E_n=-\frac{Z^2e^4m}{2\hbar^2}\,\frac{1}{n^2} \tag{334}$$

mit

$$
\begin{aligned}
n &= 1, 2, 3, \cdots \\
n_r &= 0, 1, 2, \cdots
\end{aligned}
$$

(334) ist die Bohrsche Formel für die Energiezustände in Wasserstoff-artigen Atomen. Die Zahl $n$ bestimmt die Energieeigenwerte, $n$ wird die Hauptquantenzahl genannt. Die diskreten Energieeigenwerte fallen proportional zu $1/n^2$ ab. Ferner nehmen die Energieeigenwerte proportional zum Quadrat der Kernladungszahl $Z$ zu. Für $Z = 1$ und $n = 1$ erhalten wir gerade die niedrigste Energie und damit die Grundzustandsenergie im Wasserstoffatom. Diese Energie ist gerade $-E_1$ aus (312). Auch die Energiedifferenzen im Wasserstoffatom nehmen nur diskrete Werte an. Energie kann also nur in Portionen, in Quanten, abgegeben werden.

Aus (332) erkenne wir ferner, daß bei vorgegebenem $n$ der Maximalwert von $l$ für $n_r = 0$ erreicht wird mit

$$
l_{\max} = n - 1 \quad . \tag{335}
$$

Bevor wir uns weiter ausführlich mit der Diskussion der Energieeigenwerte befassen, wenden wir uns zunächst den Eigenfunktionen zu. In die Rekursionsformel für die Entwicklungskoeffizienten setzen wir jetzt $\alpha = Z/n$ ein. Wir bekommen

$$
a_{\nu+1} = -\frac{2Z}{n} \, \frac{n - (l + \nu + 1)}{(\nu + 1)(2l + \nu + 2)} \, a_\nu \quad . \tag{336}
$$

Zum Vergleich multiplizieren wir die Nenner aus

$$
\begin{aligned}
(\nu + l + 2)(\nu + l + 1) - l(l + 1) &= \nu^2 + \nu l + \nu + \nu l + l^2 + l + 2\nu + 2l + 2 - l^2 - l \\
&= \nu^2 + 2\nu l + 3\nu + 2l + 2 \\
&= (\nu + 1)(2l + \nu + 2) \\
&= 2l\nu + \nu^2 + 2\nu + 2l + \nu + 2 \quad .
\end{aligned} \tag{337}
$$

Wir setzen dies in den Ausdruck für $f(\rho)$ ein

$$
\begin{aligned}
f(\rho) &= a_0 \, \rho^{l+1} \left\{ 1 - \frac{n - l - 1}{1! \, (2l + 2)} \left( \frac{2Z\rho}{n} \right) + \frac{(n - l - 1)(n - l - 2)}{2! \, (2l + 2)(2l + 3)} \left( \frac{2Z\rho}{n} \right)^2 + \cdots \right. \\
&\quad \left. + (-1)^{n_r} \, \frac{(n - l - 1)(n - l - 2) \cdots 1}{n_r! \, (2l + 2)(2l + 3) \cdots (2l + n_r + 1)} \left( \frac{2Z\rho}{n} \right)^{n_r} \right\} \quad .
\end{aligned} \tag{338}
$$

Wir definieren nun die Laguerre-Polynome durch

$$
L_n(x) = e^x \, \frac{d^n}{dx^n} \left( x^n \, e^{-x} \right) \tag{339}
$$

und die assoziierten Laguerre-Polynome durch

$$L_n^p(x) = (-1)^p \frac{d^p}{dx^p} L_{n+p}(x) \quad . \tag{340}$$

In explizierter Darstellung erhalten wir

$$L_n^p(x) = \sum_{s=0}^{n} (-1)^s \frac{[(n+p)!]^2}{(n-s)!\,(p+s)!\,s!} x^s \quad . \tag{341}$$

Für die assoziierten Laguerre-Polynome gilt die Integralrelation

$$\int_0^\infty e^{-x} x^{2l+2} \left[L_{n-l-1}^{2l+1}(x)\right]^2 dx = \frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} \quad . \tag{342}$$

Wir können den Ausdruck in der geschweiften Klammer in (338) gerade mit den assoziierten Laguerre-Polynomen $L_{n-l-1}^{2l+1}(\frac{2Zr}{na})$ identifizieren. Für die Radialfunktion $R_{nl}(r)$ folgt somit

$$R_{nl} = N_{nl}\, e^{-Zr/(na)} \left(\frac{2Zr}{na}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na}\right) \quad . \tag{343}$$

Die Normierungskonstante $N_{nl}$ wird bestimmt aus der Bedingung

$$\int_0^\infty R_{nl}^2\, r^2\, dr = 1 \quad . \tag{344}$$

Unter Verwendung der Integralrelation (342) für die assoziierten Laguerre-Polynome erhalten wir als vollständig normierte Radialfunktion

$$R_{nl}(r) = \left\{ \left(\frac{2Z}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{1/2} e^{-Zr/(na)} \left(\frac{2Zr}{na}\right)^l \cdot L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na}\right) \quad . \tag{345}$$

Wir erinnern daran, daß wir nun die gesamte Ortsraumwellenfunktion schreiben können als

$$u_{nlm}(r,\vartheta,\varphi) = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \tag{346}$$

mit der Normierung

$$\int |u_{nlm}|^2\, d^3x = 1 \quad . \tag{347}$$

Die Gesamtwellenfunktion lautet

$$\Psi(\vec{r},t) = u_{nlm}(\vec{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad . \tag{348}$$

Wir wollen uns jetzt mit dem Grad der Entartung befassen. Zu jedem Wert von $l$ gibt es $2l+1$ unabhängige Wellenfunktionen, die sich durch die verschiedenen Werte von $m$ unterscheiden. Ein Energieeigenwert $E_n$ ist durch die Hauptquantenzahl $n$ charakterisiert. Bei einem festen Wert von $n$ kann die Quantenzahl $l$ die Werte von $0$ bis $n-1$ durchlaufen. Also folgt für den Grad der Entartung

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 2\frac{(n-1)n}{2} + n - 1 + 1 = n^2 - n + n = n^2 \quad . \tag{349}$$

Zu einem Energieniveau $E_n$ gehören somit $n^2$ verschiedene Zustände. Wir haben es mit einer $n^2$-fachen Entartung zu tun.

## Das Spektrum und die Wellenfunktionen des Wasserstoff-Atoms

Die Grundzustandsenergie im Wasserstoff-Atom beträgt

$$E_{n=1} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \simeq -13.6\,\mathrm{eV} \quad . \tag{350}$$

Wir erweitern den Bruch mit $c^2$ und erhalten

$$E_{n=1} = \frac{1}{2}\, mc^2 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \quad . \tag{351}$$

Die Dimension einer Energie ist bereits durch die Ruheenergie des Elektrons $mc^2$ gegeben. Die Konstante in der Klammer ist dimensionslos. Es ist die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.035\,989} \quad . \tag{352}$$

Die dimensionslose Konstante $\alpha$ ist ein Maß für die Stärke der elektromagnetischen Wechselwirkung. Beim Übergang eines Elektrons in einem Wasserstoff-artigen Atom von einem Zustand mit den Quantenzahlen $n,\ l,\ m$ in einen anderen Zustand mit den Quantenzahlen $n',\ l',\ m'$ wird Energie in Form von elektromagnetischer Strahlung abgegeben. Dabei gilt

$$\hbar\omega = E_{nlm} - E_{n'l'm'} \quad , \tag{353}$$

also

$$\omega = \frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^3} \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right) \tag{354}$$

mit $n' < n$.

Alle Übergänge, die mit dem gleichen unteren Niveau enden, bilden eine sogenannte Spektralserie. Die Übergänge zum niedrigsten Niveau mit $n = 1$ bilden die Lyman-Serie. Für die Lyman-Serie gilt

$$\omega = \frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^3} \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad . \tag{355}$$

Im Wasserstoff-Atom ($Z = 1$) entsprechen die Übergänge zum Niveau mit $n = 2$ der Emission sichtbaren Lichts. Die Gesamtheit dieser Spektrallinien mit

$$\omega = \frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \tag{356}$$

und $n = 3, 4, \cdots$ bilden die Balmer-Serie. Gerade diese Serie war ein hervorragender Testfall für die Gültigkeit der Quantentheorie. Die Übergänge zu den Niveaus $n = 3, 4$ und $5$ entsprechen der Ritz-Paschen-, der Brackett- bzw. der Pfund-Serie.

Bezüglich der Energieeigenwerte von Elektronen in Wasserstoff-artigen Atomen halten wir ferner fest, daß gilt

$$\lim_{n\to\infty} E_n = 0 \quad . \tag{357}$$

An der Grenze zu $E = 0$ wird diese Zahl der Zustände pro Energieintervall – die sogenannte Zustandsdichte – immer größer.

Wir notieren abschließend die expliziete Struktur der Wellenfunktion $\Psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)$ für Wasserstoff-artige Atome für die am niedrigsten liegenden Zustände mit $n = 1$ und $n = 2$. Es ist

$$\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-Zr/a} \quad , \tag{358}$$

$$\Psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a}\right) e^{-Zr/(2a)} \quad , \tag{359}$$

$$\Psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a} e^{-Zr/(2a)} \cos\vartheta \quad , \tag{360}$$

$$\Psi_{21\pm1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a} e^{-Zr/(2a)} \sin\vartheta \, e^{\pm i\varphi} \quad . \tag{361}$$

Die nachfolgende Figur zeigt die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit für die Elektronen mit den Hauptquantenzahlen $n = 1$ und $n = 2$ im Wasserstoff-Atom, d.h. $Z = 1$. Aufgetragen ist $r^2 \, R^2(r)$ als Funktion von $r$ in Einheiten des Bohrschen Radius $a$. $1s$ steht für $n = 1$, $l = 0$, $2s$ für $n = 2$, $l = 0$ und $2p$ für $n = 2$, $l = 1$.

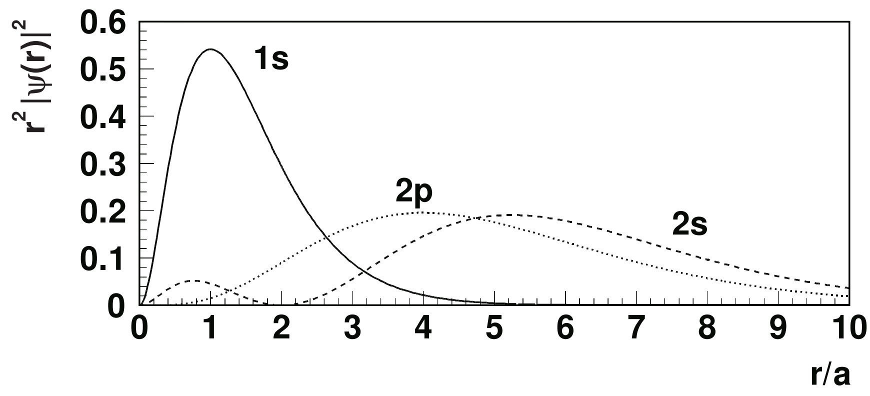


Abbildung 5: Aufenthaltswahrscheinlichkeiten von Elektronen im Wasserstoff-Atom im 1s-, 2p- und 2s-Zustand.

## Ströme in Wasserstoff-artigen Atomen

Wir berechnen nun die Dichte des elektrischen Stromes, der im Atom fließt, wenn sich das Elektron in einem stationären Zustand befindet. Der Ortsanteil der Wellenfunktion in einem solchen Zustand läßt sich schreiben als

$$\Psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi) = N_r \, N_{l,m} \, R_{nl}(r) \, P_l^{|m|}(\cos\vartheta) \, e^{im\varphi} \quad . \tag{362}$$

$N_r$ und $N_{lm}$ sind die jeweiligen Normierungsfaktoren für den Radialanteil bzw. für den Winkelanteil der Wellenfunktionen.

Die Dichte des Stromes ist gegeben durch

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\vec{\nabla}\Psi^* - \Psi^*\vec{\nabla}\Psi\right) \quad . \tag{363}$$

Wir multiplizieren mit der Teilchenladung $-e$ des Elektrons und erhalten so die Dichte des elektrischen Stromes

$$\vec{J} = \frac{ie\hbar}{2m}\left(\Psi_{nlm}\vec{\nabla}\Psi^*_{nlm} - \Psi^*_{nlm}\vec{\nabla}\Psi_{nlm}\right) \quad . \tag{364}$$

Entsprechend der Darstellung der Wellenfunktionen wählen wir auch für die Stromdichte Kugelkoordinaten. Der Vektor $\vec{J}$ läßt sich in Kugelkoordinaten darstellen, indem wir den Nabla-Operator repräsentieren durch

$$\vec{\nabla} = \left\{\frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta}, \frac{1}{r\,\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\} \quad . \tag{365}$$

Entsprechend erhalten wir für die verschiedenen Komponenten des Stromdichtevektors

$$J_r = -\frac{i\hbar e}{2m}\left\{\Psi_{nlm}\frac{\partial\Psi^*_{nlm}}{\partial r} - \Psi^*_{nlm}\frac{\partial\Psi_{nlm}}{\partial r}\right\} \quad , \tag{366}$$

$$J_\vartheta = -\frac{i\hbar e}{2mr}\left\{\Psi_{nlm}\frac{\partial\Psi^*_{nlm}}{\partial\vartheta} - \Psi^*_{nlm}\frac{\partial\Psi_{nlm}}{\partial\vartheta}\right\} \quad , \tag{367}$$

$$J_\varphi = -\frac{i\hbar e}{2mr\,\sin\vartheta}\left\{\Psi_{nlm}\frac{\partial\Psi^*_{nlm}}{\partial\varphi} - \Psi^*_{nlm}\frac{\partial\Psi_{nlm}}{\partial\varphi}\right\} \quad . \tag{368}$$

Da die Radialfunktionen $R_{nl}(r)$ sowie die $\vartheta$-abhängigen Legendre-Polynome $P_l^{|m|}(\cos\vartheta)$ rein reelle Funktionen sind, erkennen wir sofort, daß gilt

$$J_r = 0 \quad , \tag{369}$$

$$J_\vartheta = 0 \quad . \tag{370}$$

Dies impliziert, daß in einem Atom weder in radialer Richtung noch in $\vartheta$-Richtung ein Strom fließt. Zur Berechnung von $J_\varphi$ bedenken wir, daß $\Psi_{nlm}$ direkt proportional dem komplexen Ausdruck $e^{im\varphi}$ ist. Es folgt mit der Masse $\mu$ des Elektrons

$$J_\varphi = -\frac{e\hbar m}{\mu r \, \sin\vartheta} |\Psi_{nlm}|^2 \quad . \tag{371}$$

Dieser Ausdruck dient später zur Berechnung des magnetischen Moments eines Atoms.

## Die Elektron-Elektron Wechselwirkung

Die Eigenschaften von einfachen Atomen lassen sich näherungsweise recht gut durch die folgende Methode beschreiben. Wir schreiben für die Ladungsdichte der im Atom gebundenen Elektronen

$$\rho = -e \sum_{j=1}^{s} |\Psi_j|^2 \quad . \tag{372}$$

Hierbei haben wir angenommen, daß es $s$-Elektronen im Atom gibt. Diese Ladungsdichte fassen wir als klassische Ladungsdichte auf. Entsprechend können wir das zugehörige klassische Potential durch Lösung der Poisson-Gleichung ermitteln,

$$\Delta\phi = -4\pi\rho \quad . \tag{373}$$

Wir erhalten

$$\phi(\vec{r},t) = \int \frac{\rho(\vec{r}\,',t)}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\, d^3r' = -e \int \frac{\sum_{j=1}^{s} \Psi_j^*(\vec{r}\,')\Psi_j(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\, d^3r' \quad . \tag{374}$$

Die Wechselwirkungsenergie des Elektrons $i$ mit der Ladung $-e$ mit diesem Potential lautet dann

$$V(\vec{r}) = -e\phi(\vec{r}) \quad . \tag{375}$$

Das Potential $\phi$ ist stationär, d.h. es gibt keine explizite Zeitabhängigkeit. Ein Elektron in einem Atom wechselwirkt mit dem positiv geladenen Atomkern über das Coulomb-Potential $-Ze^2/r$ und mit der Elektronenladungsdichte mittels $V(\vec{r})$ aus (375). Insgesamt lautet damit die Schrödinger-Gleichung für das Elektron:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{r} + e^2 \sum_{j=1}^{s} \int \frac{\Psi_j^*(\vec{r}\,')\Psi_j(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\, d^3r'\right) \Psi_i(\vec{r}) = E_i\, \Psi_i(\vec{r}) \quad . \tag{376}$$

Ein Spezialfall tritt ein, wenn wir es nur mit einem einzelnen Elektron mit $i = j$ zu tun haben. Faßt man die Größe $\Psi_i(\vec{r})$ als Materiewelle auf, so sollte sich die Schrödinger-Gleichung für ein einzelnes Elektron reduzieren auf

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{r} + e^2 \int \frac{\Psi_i^*(\vec{r}\,')\Psi_i(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\, d^3r'\right) \Psi_i(\vec{r}) = E_i\, \Psi(\vec{r}) \quad . \tag{377}$$

Dies ist eine komplizierte Integrodifferentialgleichung für das Materialfeld $\Psi$. Sie beinhaltet die elektromagnetische Selbstwechselwirkung einer klassischen Ladungsverteilung des Elektrons. Der Einfluß der abstoßenden Coulomb-Wechselwirkung ist an Stellen großer Intensität besonders groß und sollte sich in einem Auseinanderdrängen des Materialfeldes äußern. Diese klassische Form der

Selbstwechselwirkung wird jedoch für das im Atom gebundenen Elektron *nicht* beobachtet. Infolgedessen können wir die Wellenfunktion $\Psi_i(\vec{r})$ nicht als klassisches Materiefeld interpretieren, und wir müssen die klassische Selbstwechselwirkung im folgenden zunächst ausschließen.

Aus (376) erhalten wir somit

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{r} + e^2 \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq 1}}^{s} \int \frac{\Psi_j^*(\vec{r}\,')\Psi_j(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\, d^3r' \right) \Psi_i(\vec{r}) = E_i\, \Psi_i(\vec{r}) \quad . \tag{378}$$

Dies ist ein System von gekoppelten Differentialgleichungen für die zu bestimmenden Wellenfunktionen $\Psi_i$ und die zugehörigen Energieeigenwerten $E_i$. Dieses Gleichungssystem repräsentiert die oben genannte Methode zur Berechnung von Elektroneneigenzuständen. Das Gleichungssystem (378) muß iterativ gelöst werden. Ein erster Ansatz kann es sein, im Integral von (378) Wellenfunktionen für Wasserstoff-artige Atome einzusetzen.

## Ebene Wellen

Nachdem wir die Lösungen der Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen in zwei verschiedenen Potentialen abgeleitet haben, wenden wir uns der Schrödinger-Gleichung ohne Potential zu. Dies ist die freie Theorie, beschrieben durch den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad . \tag{379}$$

Wir diskutieren erst jetzt diesen besonders einfach erscheinenden Fall, da hier gesonderte Betrachtungen bezüglich der Normierung durchgeführt werden müssen. Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\,\Psi(\vec{r},t) = E\,\Psi(\vec{r},t) \tag{380}$$

wird durch den Ansatz einer ebenen Welle

$$\Psi(\vec{r},t) = A\,e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} \tag{381}$$

gelöst, sofern gilt

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad . \tag{382}$$

Als Dispersionsrelation haben wir damit

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \tag{383}$$

vorliegen. Die Größe $A$ ist die Amplitude der ebenen Welle. Besondere Schwierigkeiten macht nun die Normierung der ebenen Welle (381). $\Psi(\vec{r},t)$ ist in diesem Fall nicht quadratintegrabel. Man kann sich hier mit der Vorstellung helfen, daß sich das freie Teilchen irgendwo in dem beliebig großen, aber unendlichenm Volumen $V$ aufhält. Man kann fordern

$$\int\limits_V d^3r\,|\Psi(\vec{r},t)|^2 = 1 \quad . \tag{384}$$

Man beachte, daß hierbei nicht über den ganzen Raum, sondern nur über das endliche Volumen $V$ integriert wird. Damit lautet die Normierungskonstante

$$A = \frac{1}{\sqrt{V}} \quad . \tag{385}$$

Ebene Wellen sind raum-zeitlich periodische Funktionen, deren Phase

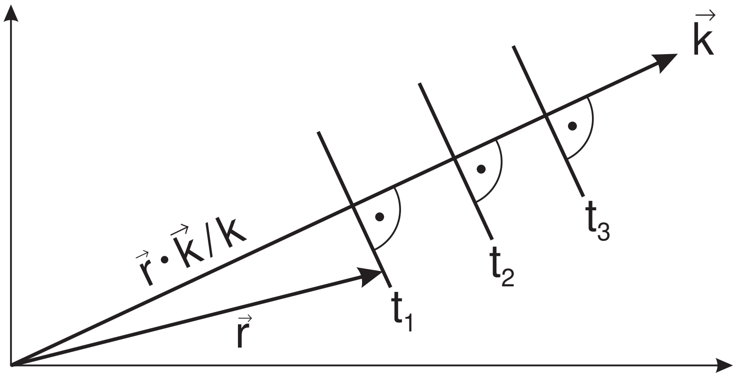


Abbildung 6: Zu den Ebenen Wellen

$$\varphi(\vec{r},t) = \vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t \tag{386}$$

für feste Zeiten $t$ Ebenen definiert.
Diese Ebenen bestehen aus all den Punkten, für die die Projektion des Ortsvektors $\vec{r}$ auf die Richtung von $\vec{k}$ den selben Wert hat. Für eine feste Zeit $t = t_0$ wiederholen sich Ebenen gleicher Wellenamplituden $\Psi(\vec{r}, t_0)$ periodisch im Raum. Die Wellenlänge ist definiert als der senkrechte Abstand zweier solcher Ebenen,

$$\Delta\varphi = \Delta(\vec{r}\cdot\vec{k}) = 2\pi \quad . \tag{387}$$

Hieraus folgt

$$\lambda = \frac{\Delta(\vec{r}\cdot\vec{k})}{k} = \frac{2\pi}{k} \quad . \tag{388}$$

Mit

$$p = \frac{h}{\lambda} \tag{389}$$

haben wir erneut

$$p = \frac{h}{2\pi}k = \hbar k \tag{390}$$

und

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad . \tag{391}$$

Hält man dagegen den Ort fest, so wiederholt sich die Wellenamplitude mit der zeitlichen Periode

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{1}{\nu} \quad . \tag{392}$$

Es folgt

$$\omega = 2\pi\nu \quad . \tag{393}$$

Ebenen konstanter Phase verlagern sich mit der Phasengeschwindigkeit $u$ in Richtung von $\vec{k}$,

$$u = \frac{d}{dt}\left(\vec{r} \cdot \frac{\vec{k}}{k}\right) = \frac{d}{dt}\left[\frac{1}{k}(\omega(k)\,t + \mathrm{const})\right] \quad . \tag{394}$$

Somit resultiert

$$u = \frac{\omega(k)}{k} = \frac{\hbar k^2}{2mk} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2} \quad . \tag{395}$$

Wir definieren neben der physikalisch irrelevanten Phasengeschwindigkeit die Gruppengeschwindigkeit $\vec{v}_g$ durch

$$\vec{v}_g(\vec{k}\,) = \vec{\nabla}_k\,\omega(k) = v_g(k)\,\vec{e}_k \tag{396}$$

mit

$$\vec{e}_k = \frac{\vec{k}}{k} \quad . \tag{397}$$

Es folgt

$$v_g(k) = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v \quad . \tag{398}$$

Die ebene Welle $\Psi(\vec{r}, t)$ ist durch einen festen Wellenvektor $\vec{k}$ charakterisiert, dessen Richtung der Ausbreitungsrichtung der Welle entspricht, während sein Betrag die Wellenlänge $\lambda$ eindeutig festlegt. Haben wir jedoch die Wellenlänge und damit den Impuls genau bestimmt, so können wir über den Ort des Teilchens überhaupt keine Aussage machen. Es folgt

$$\rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \frac{1}{V} \quad . \tag{399}$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist für alle Raumpunkte dieselbe. Durch die streng harmonische Lösung ist kein Raumpunkt ausgezeichnet.
Ist der Impuls beliebig genau bekannt, so haben wir eine vollkommene Unkenntnis über den Ort vorliegen. Nun ist es aber experimentell sicherlich möglich, den Teilchenort zumindest auf einen endlichen Raumbereich festzulegen. Dies erfordert aber offensichtlich eine Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$, die einem endlichen Wellenzug entspricht. Aus der Theorie der Fourier-Transformationen

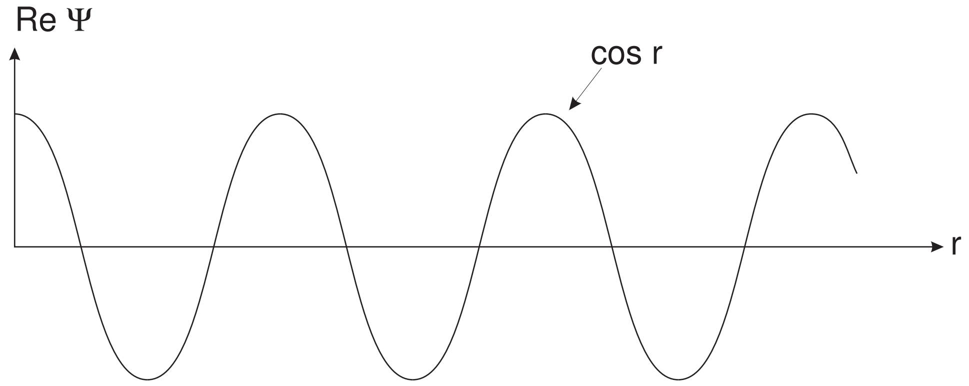


Abbildung 7:

wissen wir, daß wir jede Funktion in Komponenten der ebenen Wellen zerlegen können. Die Entwicklung in Fourier-Komponenten entspricht gerade aufgrund des gemeinsamen exponentiellen Faktors $e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$ einer Entwicklung in Komponenten von Ebenen Wellen. Umgekehrt können wir natürlich durch eine Superposition von Ebenen Wellen jede beliebige Funktion darstellen. Aufgrund der Linearität der Schrödinger-Gleichung können wir als Lösungsansatz auch

$$\Psi(\vec{r},t) = \int d\omega \int d^3k \; a(\vec{k},\omega)\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} \tag{400}$$

verwenden. Wir setzen diesen Ansatz in die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung ein und erhalten

$$\int d\omega \int d^3k \; a(\vec{k},\omega) \left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} = 0 \quad . \tag{401}$$

Aus dieser Gleichung ziehen wir den Schluß, daß gelten muß

$$a(\vec{k},\omega) = a(\vec{k}\,)\,\delta(\omega-\omega(k)) \quad , \tag{402}$$

d.h. $\vec{k}$ und $\omega$ sind in der Amplitude $a(\vec{k},\omega)$ nicht unabhängig voneinander.

Daher untersuchen wir im folgenden das Wellenpaket

$$\Psi(\vec{r},t) = \int d^3k \, a(\vec{k}\,)\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega(k)\,t)} \quad . \tag{403}$$

Die Amplitude $a(\vec{k}\,)$ ist frei verfügbar. Die spezielle Struktur der räumlichen Verteilung des Wellenpaketes wird durch die spezielle Wahl der Funktion $a(\vec{k}\,)$ bestimmt.
Wir können durch eine geeignete Wahl von $a(\vec{k})$ erreichen, daß $|\Psi(\vec{r},t)|^2$ nur in einem kleinen Raumbereich merklich von Null verschieden ist. Damit ist der Ort nicht mehr völlig unbestimmt. Andererseits ist durch die Überlagerung verschiedener Impulskomponenten auch der Impuls nicht mehr exakt bekannt.

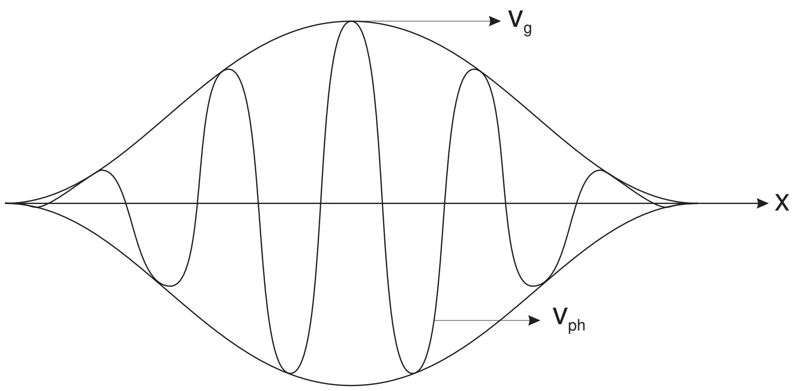


Abbildung 8: Ein Wellenpaket

Wir wollen uns im folgenden noch etwas ausführlicher mit solchen Wellenpaketen befassen, deren Amplitudenfunktion sich im wesentlichen um den festen Vektor $\vec{k}_0$ konzentriert. Dann werden in der $k$-Integration nur solche Wellenzahlen beitragen, die sich nur wenig von $\vec{k}_0$ unterscheiden. Wir werden daher eine Taylor-Entwicklung durchführen,

$$\begin{aligned} \omega(\vec{k}\,) &= \omega(k_0) + (\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{\nabla}_k \, \omega(k)\Big|_{k_0} + \cdots \\ &= \omega(k_0) + (\vec{k} - \vec{k}_0) \cdot \vec{v}_g(k_0) + \cdots \end{aligned} \tag{404}$$

Damit können wir das Wellenpaket schreiben als

$$\Psi(\vec{r}, t) = \underbrace{e^{i(\vec{k}_0 \cdot \vec{r} - \omega(k_0)t)}}_{\text{Trägerwelle}} \; \tilde{\Psi}_{k_0}(\vec{r}, t) \quad . \tag{405}$$

Der exponentielle Faktor beschreibt die Trägerwelle. Dennoch kann trotz des expliziten Heraushebens des Wellenvektors $k_0$ dem Wellenpaket nicht eine bestimmte Wellenlänge zugeordnet werden. Das Wellenpaket repräsentiert nach wie vor eine Superposition von Partialwellen. Die Modulationsfunktion $\tilde{\Psi}_{k_0}$ können wir aufgrund der Taylor-Entwicklung näherungsweise schreiben als

$$\tilde{\Psi}_{k_0}(\vec{r}, t) \approx \int d^3q \; a(\vec{q} + \vec{k}_0) \; \exp\{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{v}_g(k_0)t)\} \tag{406}$$

mit

$$\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_0 \quad . \tag{407}$$

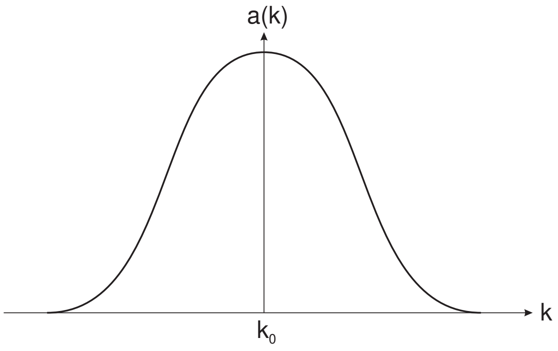


Abbildung 9:

Die Modulationsfunktion definiert für

$$\vec{r} - \vec{v}_g(k_0)t = \text{const} \tag{408}$$

Flächen konstanter Amplituden, die sich mit der Geschwindigkeit

$$\dot{\vec{r}} = \vec{v}_g(k_0) = \vec{\nabla}_k \; \omega(k)|_{k_0} \tag{409}$$

fortpflanzen.

Als erstes einfaches eindimensionales Beispiel eines Wellenpaketes betrachten wir das Rechteckpaket mit

$$\begin{aligned} a(k) &= a(k_0) \qquad \text{für} \qquad k_0 - \Delta k_0 \leq k \leq k_0 + \Delta k_0 \quad , \\ a(k) &= 0 \qquad \text{sonst.} \end{aligned} \tag{410}$$

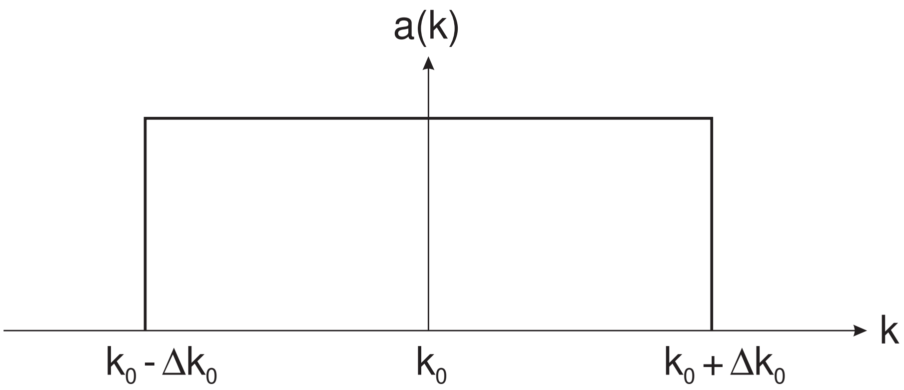


Abbildung 10:

Damit haben wir für die Modulationsfunktion

$$\tilde{\Psi}_{k_0}(z,t) = a(k_0) \int\limits_{-\Delta k_0}^{+\Delta k_0} dq \; \exp\left\{iq(z - v_g(k_0)t)\right\} \quad . \tag{411}$$

Es folgt sofort

$$\tilde{\Psi}_{k_0}(z,t) = 2a(k_0)\,\Delta k_0\,\frac{\sin\{\Delta k_0(z - v_g(k_0)t)\}}{\Delta k_0(z - v_g(k_0)t)} \quad . \tag{412}$$

Es handelt sich also um eine Funktion vom Typ $\sin x/x$ mit einem Maximum des Funktionswertes 1 bei $x = 0$ und Nullstellen bei $x = \pm n\pi$ mit $n = 1, 2, \cdots$

Das Maximum des Wellenpaketes

$$\Psi(z,t) = 2a(k_0)\,\Delta k_0\,\frac{\sin\{\Delta k_0(z - v_g(k_0)t)\}}{\Delta k_0(z - v_g(k_0)t)} * \exp\{i(k_0 t - \omega(k_0)t)\} \tag{413}$$

liegt bei

$$z_m(t) = v_g t \quad . \tag{414}$$

Wir wollen nun studieren, mit welcher Genauigkeit wir den Aufenthaltsort eines Teilchens bestimmen können, das durch dieses Wellenpaket beschrieben wird. Wir fixieren die Zeit zu $t = 0$. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\Psi(z, t = 0)|^2$ ist im wesentlichen auf das Intervall

$$-\pi \leq \Delta k_0\, z \leq +\pi \tag{415}$$

konzentriert. Die effektive Breite des Wellenpakets erfüllt somit die Relation

$$\Delta k_0\, \Delta z = 2\pi \quad . \tag{416}$$

Bevor wir weiter Wellenpakete diskutieren wollen, kehren wir zurück zur Festlegung der Normierung der ebenen Welle.

Ebene Wellen sind nicht quadratintegrabel. Das Integral

$$\int |\Psi_{\vec{k}}|^2\, d^3r = |A|^2 \int d^3r \to \infty \tag{417}$$

divergiert, wenn das Integrationsvolumen gegen unendlich geht. Wir schreiben nun die ebene Welle als

$$\Psi(\vec{r},t) = A\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)} \quad . \tag{418}$$

Jetzt gilt für zwei Partikulärlösungen mit verschiedenen Impulsen $\vec{p}$ und $\vec{p}'$ bei $t = 0$

$$\int \Psi^*_{\vec{p}\,'}\, \Psi_{\vec{p}\,'}(\vec{r}\,)\, d^3r = |A|^2 \int e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}\,')r} d^3r = |A|^2\, (2\pi\hbar)^3\, \delta(\vec{p}-\vec{p}\,') \quad . \tag{419}$$

Für $\vec{p} \neq \vec{p}\,'$ ist das Integral also Null. In Anlehnung an die Vektorrechnung sagt man daher, die Funktionen $\Psi_{\vec{p}}(\vec{r}\,)$ und $\Psi_{\vec{p}\,'}(\vec{r}\,)$ sind orthogonal. Integrieren wir (419) über alle Impulse, wollen wir mit der Wahrscheinlichkeit $1$ das Teilchen vorfinden. Daher legen wir den Normierungsfaktor im Fall von ebenen Wellen fest als

$$A = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \tag{420}$$

und die ebenen Wellen lauten

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)} \quad . \tag{421}$$

# Wellenfunktionen im Impulsraum

Wir haben bereits die statistische Interpretation der Wellenfunktion $\Psi(\vec{r},t)$ im Ortsraum behandelt. Das Betragsquadrat drückt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens aus. Ebenso bedeutsam ist es, die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die konjugierte Variable, den Impuls, zu kennen. Ähnlich wie für die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum sollte es einen analogen Ausdruck im Impulsraum geben,

$$\omega\left(\vec{p},t\right)\mathrm{d}^3p = \left|\tilde{\Psi}(\vec{p},t)\right|^2 \mathrm{d}^3p \quad . \tag{422}$$

Dieser Ausdruck drückt die Wahrscheinlichkeit dafür aus, daß das Teilchen zur Zeit $t$ einen Impuls $\vec{p}$ im Volumenelement $\mathrm{d}^3p$ im Impulsraum hat. Da die funktionale Abhängigkeit der Wellenfunktion $\tilde{\Psi}\left(\vec{p},t\right)$ im Impulsraum sehr verschieden sein kann von der im Ortsraum, haben wir sie auch im Impulsraum durch eine Tilde explizit gekennzeichnet. Es muß sich auch im Impulsraum um eine quadratintegrable Funktion handeln, und es soll gelten

$$\int \mathrm{d}^3p \left|\tilde{\Psi}(\vec{p},t)\right|^2 = 1 \quad . \tag{423}$$

Dahinter steckt die triviale Aussage, daß das Teilchen mit Sicherheit irgendeinen Impuls hat. Insgesamt haben wir die Aussage

$$\int \mathrm{d}^3r \left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 = \int \mathrm{d}^3p \left|\tilde{\psi}(\vec{p},t)\right|^2 \quad . \tag{424}$$

Diese Eigenschaft erinnert sehr an das Parseval-Theorem bei Fourier-Transformationen. Hier haben wir

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} f(t)\ g^*(t)\,\mathrm{d}t = \int\limits_{-\infty}^{\infty} F(\omega)\ G^*(\omega)\,\mathrm{d}\omega \tag{425}$$

mit

$$f(t) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} F(\omega)\,e^{-i\omega t}\,\mathrm{d}\omega \quad , \tag{426}$$

$$g^*(t) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} G^*(\omega)\,e^{-i\omega t}\,\mathrm{d}\omega \quad . \tag{427}$$

(424) sagt aus, daß die Normierung bei Fourier-Transformationen erhalten bleibt. Es liegt nahe $\tilde{\Psi}\left(\vec{p},t\right)$ mit der Fourier-Transformierten der Wellenfunktion $\Psi\left(\vec{r},t\right)$ zu identifizieren. Wir haben damit

$$\Psi(\vec{r},t) = \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3p\,e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}\,\tilde{\Psi}(\vec{p},t) \quad , \tag{428}$$

$$\tilde{\Psi}(\vec{p},t) = \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3r\,e^{\frac{-i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}\,\Psi(\vec{r},t) \quad . \tag{429}$$

Beide Funktionen $\Psi$ und $\tilde{\Psi}$ sind völlig äquivalent und beschreiben das Teilchen gleichermaßen. Für die Normierung der Wellenfunktion im Impulsraum notieren wir jeweils die Fourier-Darstellung der $\delta$-Funktion:

$$\delta\left(\vec{r}-\vec{r}\,'\right) = \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^3}\int \mathrm{d}^3p\,e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}\,')} \quad , \tag{430}$$

$$\delta\left(\vec{p}-\vec{p}\,'\right) = \frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^3}\int \mathrm{d}^3r\,e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}\,')\vec{r}} \quad . \tag{431}$$

# Mittelwerte und Schwankungen

Die Wahrscheinlichkeitsdichten $\varrho(\vec{r},t)$ und $\omega(\vec{p},t)$ stellen die eigentlich meßbaren Aussagen der Quantenmechanik über Ort und Impuls eines Teilchens dar. Mit $\varrho(\vec{r},t)$ können wir den Teilchenort nicht exakt voraussagen. Für jeden erdenklichen Wert von $\vec{r}$ können wir jedoch die Wahrscheinlichkeit angeben, das Teilchen an diesem Ort zu finden. Viele Einzelmessungen nacheinander an vielen durch dieselbe Wellenfunktion beschriebenen äquivalenten Teilchen sollten dann einen Mittelwert $\langle\vec{r}\rangle$ liefern. Dieser Mittelwert ergibt sich als Summe oder Integral über die mit der Wahrscheinlichkeit ihres Auftretens gewichteten Einzelwerte

$$\langle\vec{r}\rangle_t = \int \mathrm{d}^3r\, \varrho(\vec{r},t)\,\vec{r} = \int \mathrm{d}^3r\, \Psi^*(\vec{r},t)\,\vec{r}\,\Psi(\vec{r},t) \quad . \tag{432}$$

Mittelwerte werden in der Quantenmechanik entsprechend dem dahinterstehenden Meßprozeß Erwartungswerte genannt. Generell gilt nicht nur für den Ort $\vec{r}$ sondern für jede eine Teilcheneigenschaft beschreibende Funktion $F(\vec{r})$

$$\langle F(\vec{r})\rangle_t = \int \mathrm{d}^3r\, \Psi^*(\vec{r},t)\, F(\vec{r})\, \Psi(\vec{r},t) \quad . \tag{433}$$

Diese Eigenschaft kann sich mit der Zeit ändern, daher der Index $t$ am Erwartungswert.
Wenn wir eine Wahrscheinlichkeitsverteilung vorliegen haben, so ist nicht nur der Mittelwert sondern auch die Breite der Verteilung von experimenteller Relevanz. Angelehnt an die elementare Fehlerrechnung untersuchen wir das Schwankungsquadrat

$$\begin{aligned}
\int \mathrm{d}^3r\, \varrho(\vec{r},t)\left[F(\vec{r}) - \langle F(\vec{r})\rangle_t\right]^2 &= \left\langle \left[F(\vec{r}) - \langle F(\vec{r})\rangle_t\right]^2 \right\rangle_t \\
&= \left\langle F^2(\vec{r})\right\rangle_t - \\
&\quad 2\left\langle F(\vec{r})\,\langle F(\vec{r})\rangle_t\right\rangle_t + \langle F(\vec{r})\rangle_t^2 \\
&= \left\langle F^2(\vec{r})\right\rangle_t - 2\,\langle F(\vec{r})\rangle_t^2 + \langle F(\vec{r})\rangle_t^2 \\
&= \left\langle F^2(\vec{r})\right\rangle_t - \langle F(\vec{r})\rangle_t^2 \quad .
\end{aligned} \tag{434}$$

Diese Größe ist ein Maß dafür, wie stark im Mittel ein gefundener Meßwert von seinem Mittelwert abweicht. Als mittlere quadratische Schwankung definiert man die positive Wurzel aus dem Schwankungsquadrat

$$\begin{aligned}
\Delta F_t &= \sqrt{\left\langle \left[F(\vec{r}) - \langle F(\vec{r})\rangle_t\right]^2 \right\rangle} \\
&= \sqrt{\langle F^2(\vec{r})\rangle_t - \langle F(\vec{r})\rangle_t^2}
\end{aligned} \tag{435}$$

Ebenso gilt für den Erwartungswert des Impulses

$$\langle\vec{p}\rangle_t = \int \mathrm{d}^3p\, w(\vec{p},t)\vec{p} = \int \mathrm{d}^3p\, \tilde{\Psi}^*(\vec{p},t)\,\vec{p}\,\tilde{\Psi}(\vec{p},t) \quad . \tag{436}$$

In analoger Weise erhalten wir für eine allgemeinere Teilcheneigenschaft beschrieben durch die Funktion $G(\vec{p})$ des Impulses $\vec{p}$

$$\langle G(\vec{p})\rangle_t = \int \mathrm{d}^3p\, \tilde{\Psi}^*(\vec{p},t)\, G(\vec{p})\, \tilde{\Psi}(\vec{p},t) \quad . \tag{437}$$

## Der Impulsoperator

Wir wollen den Impulsoperator im Ortsraum ermitteln. Dazu gehen wir aus von der Definition

$$\langle \vec{p} \rangle_t = \int \mathrm{d}^3 p \, \tilde{\Psi}^*(\vec{p}, t) \, \vec{p} \, \tilde{\Psi}(\vec{p}, t) \tag{438}$$

und transformieren formal die Impulsraumwellenfunktion $\tilde{\Psi}\,(\vec{p}, t)$ mittels Fourier-Transformation in den Ortsraum

$$\langle \vec{p} \rangle_t = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \mathrm{d}^3 p \int \mathrm{d}^3 r' \int \mathrm{d}^3 r \, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}'} \, \Psi^*(\vec{r}, t) \; \vec{p} \, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \, \Psi(\vec{r}, t) \quad . \tag{439}$$

Jetzt ist

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}^3 r \, \vec{p} \, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \, \Psi(\vec{r}, t) &= i\hbar \int \mathrm{d}^3 r \left( \vec{\nabla}_r e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \right) \Psi(\vec{r}, t) \\ &= i\hbar \int \mathrm{d}^3 r \, \vec{\nabla}_r \left( e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \, \Psi(\vec{r}, t) \right) - \\ & \quad\; i\hbar \int \mathrm{d}^3 r \, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \, \vec{\nabla}_r \Psi(\vec{r}, t) \quad . \end{aligned} \tag{440}$$

Mit Hilfe des Gaußschen Satzes verwandeln wir das erste Integral in ein Oberflächenintegral

$$\int_V \mathrm{d}^3 r \, \vec{\nabla}_r \left( e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \, \Psi(\vec{r}, t) \right) = \int_{S(V)} \mathrm{d}\vec{F} \, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \, \Psi(\vec{r}, t) \quad . \tag{441}$$

Das Integral verschwindet, wenn wir über den gesamten Raum integrieren, da die Wellenfunktion nach Voraussetzung auf der Oberfläche im Unendlichen hinreichend rasch verschwindet. Damit haben wir

$$\langle \vec{p} \rangle_t = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \mathrm{d}^3 p \int \mathrm{d}^3 r' \int \mathrm{d}^3 r \, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{r}' - \vec{r})} \, \Psi^*(\vec{r}', t) \left( -i\hbar \vec{\nabla}_r \right) \Psi(\vec{r}, t) \quad . \tag{442}$$

Jetzt verwenden wir noch die Darstellung der $\delta$-Funktion $\delta\,(\vec{r} - \vec{r}')$ und erhalten schließlich

$$\langle \vec{p} \rangle_t = \int \mathrm{d}^3 r \, \Psi^*(\vec{r}, t) \left( -i\hbar \vec{\nabla}_r \right) \Psi(\vec{r}, t) \quad . \tag{443}$$

Wir können also der dynamischen Variablen Impuls im Ortsraum einen Operator zuordnen

$$\hat{\vec{p}} \quad \longrightarrow \quad -i\hbar \vec{\nabla}_r \tag{444}$$

Es ist ein wesentliches Charakteristikum der Quantenmechanik, daß man den beobachtbaren, meßbaren Größen oder Observablen Operatoren zuordnet. Im Ortsraum ist der Ortsoperator $\hat{\vec{r}}$ mit dem Vektor $\vec{r}$ identisch, im Impulsraum ist ebenfalls der Impulsoperator $\hat{\vec{p}}$ mit dem Vektor $\vec{p}$ identisch. Allgemeiner als im oben betrachteten Fall schreiben wir nun für die Teilcheneigenschaft $\hat{\mathcal{G}}\left(\hat{\vec{p}}\right)$, die eine Funktion des Impulses $\hat{\vec{p}}$ ist, den Erwartungswert im Ortsraum auf,

$$\left\langle \hat{\mathcal{G}}\left(\hat{\vec{p}}\right) \right\rangle_t = \int \mathrm{d}^3 r \, \Psi^*(\vec{r}, t) \, \hat{\mathcal{G}}\left( -i\hbar \vec{\nabla}_r \right) \Psi(\vec{r}, t) \quad . \tag{445}$$

Wir haben also die Zuordnung

$$\hat{\mathcal{G}}\left(\hat{\vec{p}}\right) \quad \longrightarrow \quad \hat{\mathcal{G}}\left( -i\hbar \vec{\nabla}_r \right) \quad . \tag{446}$$

Haben wir den Operator $\hat{\mathcal{X}}$ vorliegen, so gilt für den Erwartungswert

$$\left\langle \hat{\mathcal{X}} \right\rangle_t = \int \mathrm{d}^3 r \, \Psi^*(\vec{r},t) \, \hat{\mathcal{X}} \Psi(\vec{r},t) \quad . \tag{447}$$

Dabei gilt die Korrespondenzvorschrift

$$\hat{\mathcal{X}} = \begin{cases} \hat{\mathcal{X}}\left(\hat{\vec{r}}\right) & \longrightarrow \quad \hat{\mathcal{X}}(\vec{r}) \\ \hat{\mathcal{X}}\left(\hat{\vec{p}}\right) & \longrightarrow \quad \hat{\mathcal{X}}\left(-i\hbar\vec{\nabla}_r\right) \end{cases} \quad . \tag{448}$$

Man spricht in diesem Fall von der Ortsdarstellung des Operators $\hat{\mathcal{X}}$.
Wir sind insgesamt zu diesem Ergebnis gekommen, indem wir als Ausgangspunkt versucht haben, den Impulserwartungswert $\langle \vec{p} \rangle_t$ im Ortsraum darzustellen. Als Ausgangspunkt hätten wir auch versuchen können, den Erwartungswert des Ortes $\langle \vec{r} \rangle$ im Impulsraum darzustellen. Mit exakt den gleichen Rechenschritten finden wir für die Impulsraumdarstellung des Ortes

$$\vec{r} \quad \longrightarrow \quad i\hbar\vec{\nabla}_p \tag{449}$$

Wir haben dann die Korrespondenzvorschrift für den Operator $\hat{\mathcal{Y}}$

$$\hat{\mathcal{Y}} = \begin{cases} \hat{\mathcal{Y}}\left(\hat{\vec{r}}\right) & \longrightarrow \quad \hat{\mathcal{Y}}\left(i\hbar\vec{\nabla}_p\right) \\ \hat{\mathcal{Y}}\left(\hat{\vec{p}}\right) & \longrightarrow \quad \hat{\mathcal{Y}}(\vec{p}) \end{cases} \quad . \tag{450}$$

Dies nennen wir die Impulsdarstellung des Operators $\hat{\mathcal{Y}}$. Der Erwartungswert ist dann gegeben durch

$$\left\langle \hat{\mathcal{Y}} \right\rangle_t = \int \mathrm{d}^3 p \, \tilde{\Psi}^*(\vec{p},t) \, \hat{\mathcal{Y}} \, \tilde{\Psi}(\vec{p},t) \quad . \tag{451}$$

Wir erkennen die völlige Äquivalenz von Orts- und Impulsdarstellung. Die bisherigen Erkenntnisse lassen sich zusammenfassen bezüglich eines allgemeinen Operators $\hat{\mathcal{F}}$, der sowohl vom Ort als auch vom Impuls abhängen kann. Es gilt

$$\hat{\mathcal{F}}\left(\hat{\vec{r}},\hat{\vec{p}}\right) \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} \hat{\mathcal{F}}\left(\vec{r},-i\hbar\vec{\nabla}_r\right) & \text{Ortsdarstellung} \\ \hat{\mathcal{F}}\left(i\hbar\vec{\nabla}_p,\vec{p}\right) & \text{Impulsdarstellung} \end{cases} \tag{452}$$

Für den Erwartungswert der Größe $\hat{\mathcal{F}}$ ergeben sich damit zwei äquivalente Formulierungen

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{F} \right\rangle_t &= \int \mathrm{d}^3 r \, \Psi^*(\vec{r},t) \, \hat{F}\left(\vec{r},-i\hbar\vec{\nabla}_r\right) \Psi(\vec{r},t) \\ &= \int \mathrm{d}^3 p \, \hat{\tilde{\Psi}}^*(\vec{p},t) \, \hat{F}\left(i\hbar\vec{\nabla}_p,\vec{p}\right) \tilde{\Psi}(\vec{p},t) \quad . \end{aligned} \tag{453}$$

# Kommutatoren

Bei der Anordnung der Operatoren müssen wir jedoch äußerste Vorsicht walten lassen. Der Grund hierfür liegt in der Nichtvertauschbarkeit vieler Operatoren. Wir definieren den Kommutator der beiden Operatoren $\hat{\mathcal{A}}$ und $\hat{\mathcal{B}}$ durch

$$\left[\hat{\mathcal{A}},\hat{\mathcal{B}}\right]_- = \hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} - \hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}} \quad . \tag{454}$$

Dieser Kommutator, der für $c$-Zahlen $A$ und $B$ trivialerweise verschwindet, ist oftmals von Null verschieden und kann selbst wieder ein Operator sein. Die Reihenfolge der Operatoren ist nicht beliebig. Als ein Beispiel betrachten wir den Kommutator der Operatoren $\hat{z}$ und $\hat{p}_z$ und lassen ihn auf die Wellenfunktion $\Psi\left(\vec{r}, t\right)$ wirken. Es folgt

$$\begin{aligned}
[\hat{z}, \hat{p}_z]_- \, \Psi(\vec{r}, t) &= (\hat{z}\hat{p}_z - \hat{p}_z\hat{z})\, \Psi(\vec{r}, t) \\
&= -i\hbar \left( z\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} z \right) \Psi(\vec{r}, t) \\
&= -i\hbar \left( z\frac{\partial}{\partial z}\Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) - z\frac{\partial}{\partial z}\Psi(\vec{r}, t) \right) \\
&= i\hbar\, \Psi(\vec{r}, t) \quad .
\end{aligned} \tag{455}$$

Da dies für beliebige Wellenfunktionen $\Psi$ gilt, können wir anhand dieser Gleichung die folgende Operatoridentität ablesen

$$[\hat{z}, \hat{p}_z]_- = i\hbar \quad . \tag{456}$$

Dies gilt gleichermaßen auch für die anderen kartesischen Komponenten. Damit haben wir generell

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j]_- = i\hbar\, \delta_{ij} \tag{457}$$

oder auch

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_j]_- = -i\hbar\, \delta_{ij} \quad . \tag{458}$$

Hingegen ist trivialerweise

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j]_- = [\hat{x}_i, \hat{x}_j]_- = 0 \tag{459}$$

für $i, j = 1, 2, 3$. Daß die Korrespondenzregel, klassische Variable durch die entsprechenden Operatoren zu ersetzen, so noch nicht eindeutig ist, wollen wir anhand eines einfachen Beispiels erläutern. Für c-Zahlen gilt offensichtlich

$$p_z^2 = \frac{1}{z^2} p_z^2 z^2 \quad . \tag{460}$$

Ersetzen wir dies durch Operatoren, so finden wir unterschiedliche Resultate.

$$p_z^2 \longrightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad , \tag{461}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{z^2} p_z^2 z^2 \longrightarrow\ & -\hbar^2 \frac{1}{z^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} z^2 = \\
& -\hbar^2 \frac{1}{z^2} \frac{\partial}{\partial z} \left( 2z + z^2 \frac{\partial}{\partial z} \right) = \\
& -\hbar \frac{1}{z^2} \left( 2 + 2z\frac{\partial}{\partial z} + 2z\frac{\partial}{\partial z} + z^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = \\
& -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{4}{z}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{2}{z^2} \right) \quad .
\end{aligned} \tag{462}$$

## Die Korrespondenzregel

Wir wollen nun die allgemeinen Regeln notieren, die es uns erlauben den Übergang von einem klassischen System in ein System, das der quantenmechanischen Beschreibung unterliegt, zu vollziehen. Folgende Schritte können dabei durchgeführt werden:

1. Das Problem wird zunächst im Rahmen der klassischen Hamilton-Mechanik formuliert. Wir konstruieren die klassische Hamilton-Funktion

$$H = H\left(q_1, \ldots, q_s, p_1, \ldots, p_s, t\right) = H\left(\vec{q}, \vec{p}, t\right) \quad . \tag{463}$$

   Hierbei sind die $q_i$ die generalisierten Koordinaten, die $p_i$ die dazu kanonisch konjugierten Impulse und $s$ ist die Zahl der Freiheitsgrade. Für ein konservatives System ist $H$ mit der Gesamtenergie $E$ identisch

$$H\left(q_1, \ldots, p_s, t\right) = E \quad . \tag{464}$$

2. Wir ordnen dem klassischen System ein Quantensystem zu, dessen Zustand durch eine Wellenfunktion $\Psi\left(q_1, \ldots, q_s, t\right)$ beschrieben wird.

3. Observablen werden Operatoren zugeordnet. Klassische Observable sind Funktionen des Phasenraums, also $(\vec{q}, \vec{p})$-abhängig. Die Korrespondenzvorschrift lautet für die kartesischen Komponenten

$$A\left(\vec{q}, \vec{p}, t\right) \quad \longrightarrow \quad \hat{\mathcal{A}}\left(q1, \ldots, q_s, -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_1}, \ldots, -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_s}, t\right) \quad . \tag{465}$$

   Dies gilt insbesondere für die Hamilton-Funktion, die dadurch zum Hamilton-Operator $\hat{\mathcal{H}}$ wird

$$H\left(\vec{q}, \vec{p}, t\right) \quad \longrightarrow \quad \hat{\mathcal{H}}\left(q_1, \ldots, q_s, -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_1}, \ldots, -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_s}, t\right) \quad . \tag{466}$$

4. Die Energiebeziehung (464) wird mit der Wellenfunktion $\Psi$ multipliziert und dann der Übergang (466) vollzogen. Es resultiert die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\hat{\mathcal{H}}\left(q_1, \ldots, q_s, -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_1}, \ldots, -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_s}, t\right)\Psi(q_1, \ldots, q_s, t) = E\,\Psi(q_1, \ldots, q_s, t) \tag{467}$$

5. Durch die bereits diskutierte Transformationsvorschrift

$$E \quad \longrightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{468}$$

   erhalten wir aus (467) die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung.

## Erweitertes Beispiel für die Anwendung des Korrespondenzprinzips

Wir gehen aus vom relativistischen Energie-Impulssatz der klassischen Mechanik

$$E^2 = \vec{p}^{\,2} c^2 + m^2 c^4 \quad . \tag{469}$$

Wir ersetzen $E$ durch $i\hbar\, \partial/\partial t$, und wir ersetzen $\vec{p}$ durch $-i\hbar\vec{\nabla}$. Ferner multiplizieren wir (469) von rechts mit der Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$. Es resultiert

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(\vec{r}, t) = \left(-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4\right) \Psi(\vec{r}, t) \quad . \tag{470}$$

Dies ist die Klein-Gordon-Gleichung. Es ist eine relativistische Gleichung zur Beschreibung von Spin-0-Bosonen. Im Gegensatz zur Schrödinger-Gleichung ist sie auch in der Zeitvariablen eine Differentialgleichung zweiter Ordnung. Die Klein-Gordon-Gleichung wird im Rahmen der relativistischen Quantenmechanik ausführlich diskutiert werden. Aus (470) folgt

$$\begin{aligned} & -\hbar^2 c^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta\right) \Psi(\vec{r}, t) - m^2 c^4 \Psi(\vec{r}, t) = 0 \\ = \quad & -\hbar^2 c^2\, \Box \Psi(\vec{r}, t) - m^2 c^4\, \Psi(\vec{r}, t) \end{aligned} \tag{471}$$

mit dem Operator

$$\Box = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \quad . \tag{472}$$

# Operatorenkalkül

Wir wollen nun einige Eigenschaften von Operatoren in der Quantenmechanik diskutieren sowie den rechentechnischen Umgang mit diesen Operatoren erlernen. Zunächst definieren wir lineare Operatoren. Ein Operator $\hat{\mathcal{L}}$ heißt linear, wenn gilt

$$\hat{\mathcal{L}}(c_1 u_1 + c_2 u_2) = c_1 \cdot \hat{\mathcal{L}}\, u_1 + c_2 \cdot \hat{\mathcal{L}}\, u_2 \quad , \tag{473}$$

wobei $u_1$ und $u_2$ beliebige Funktionen und $c_1$, $c_2$ beliebige Konstanten sind. So ist beispielsweise der Operator $\partial/\partial x$ ein linearer Operator. Hingegen ist der Operator des Wurzelziehens kein linearer Operator. Bezüglich linearer Operatoren gilt das Superpositionsprinzip.
Ein linearer Operator heißt selbstadjungiert, wenn gilt

$$\int u_1^*(x)\, \hat{\mathcal{L}}\, u_2(x)\, \mathrm{d}x = \int u_2(x)\, \hat{\mathcal{L}}^* u_1^*(x)\, \mathrm{d}x \quad . \tag{474}$$

Hierbei wird das Integral über den gesamten Bereich der Variablen $x$ erstreckt. $u_1^*$ und $u_2$ sind beliebige quadratintegrable Funktionen. Ihre Differentialquotienten müssen an den Grenzen des Integrationsgebietes verschwinden.
Als ein eindimensionales Beispiel wollen wir nun den Impulsoperator

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \tag{475}$$

betrachten. Wir haben

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} u_1^*\, \hat{p}_x\, u_2\, \mathrm{d}x &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} u_1^* \frac{\partial u_2}{\partial x}\, \mathrm{d}x \\ &= \left[-i\hbar\, u_1^* u_2\right]_{-\infty}^{\infty} + i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} u_2 \frac{\partial u_1^*}{\partial x}\, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} u_2\, \hat{p}_x^*\, u_1^*\, \mathrm{d}x \quad , \end{aligned} \tag{476}$$

da gilt

$$u_1^*(\pm\infty) = u_2(\pm\infty) = 0 \quad . \tag{477}$$

Somit ist $\hat{p}_x$ ein linearer und selbstadjungierter Operator. Der Operator $\partial/\partial x$ ist linear, aber nicht selbstadjungiert.
Jetzt können wir einfache algebraische Relationen handhaben. Wir haben zwei lineare selbstadjungierte Operatoren $\hat{\mathcal{A}}$ und $\hat{\mathcal{B}}$, und es soll gelten

$$\hat{\mathcal{C}}\Psi = \hat{\mathcal{A}}\Psi + \hat{\mathcal{B}}\Psi \quad , \tag{478}$$

dann können wir für die Summe schreiben

$$\hat{\mathcal{C}} = \hat{\mathcal{A}} + \hat{\mathcal{B}} \quad . \tag{479}$$

Mit $\hat{\mathcal{A}} = i\partial/\partial x$ und $\hat{\mathcal{B}} = x$ folgt beispielsweise

$$\hat{\mathcal{C}} = i\partial/\partial x + x \quad . \tag{480}$$

Unter dem Produkt zweier Operatoren $\hat{\mathcal{A}}$ und $\hat{\mathcal{B}}$ verstehen wir einen Operator $\hat{\mathcal{C}}$, so daß gilt

$$\hat{\mathcal{C}}\Psi = \hat{\mathcal{A}}\left(\hat{\mathcal{B}}\Psi\right) \quad , \tag{481}$$

d.h. zunächst muß auf die Wellenfunktion $\Psi$ der Operator $\hat{\mathcal{B}}$ und dann der Operator $\hat{\mathcal{A}}$ angewandt werden. Wir schreiben symbolisch

$$\hat{\mathcal{C}} = \hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} \tag{482}$$

Als Beispiel betrachten wir $\hat{\mathcal{A}} = i\partial/\partial x$ und $\hat{\mathcal{B}} = x$. Dann ist

$$\hat{\mathcal{C}}\Psi = \hat{\mathcal{A}}\left(\hat{\mathcal{B}}\Psi\right) = i\frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) = i\Psi + ix\frac{\partial\Psi}{\partial x} \quad . \tag{483}$$

Also haben wir

$$\hat{\mathcal{C}} = i\left(1 + x\frac{\partial}{\partial x}\right) \quad . \tag{484}$$

Vertauschen wir die Reihenfolge der Operatoren, so folgt

$$\hat{\mathcal{C}}' = \hat{\mathcal{B}}\left(\hat{\mathcal{A}}\Psi\right) = ix\frac{\partial\Psi}{\partial x} \tag{485}$$

also

$$\hat{\mathcal{C}}' = ix\frac{\partial}{\partial x} \quad . \tag{486}$$

Im allgemeinen darf die Reihenfolge der Faktoren nicht geändert werden. Beispielsweise gilt

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{C}} = \left(\hat{\mathcal{A}} - \hat{\mathcal{B}}\right)\left(\hat{\mathcal{A}} + \hat{\mathcal{B}}\right) &= \hat{\mathcal{A}}^2 - \hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}} + \hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} - \hat{\mathcal{B}}^2 \\ &\neq \hat{\mathcal{A}}^2 - \hat{\mathcal{B}}^2 \quad . \end{aligned} \tag{487}$$

Wir haben es mit einer nichtkommutativen Algebra zu tun.
Wir betrachten nun das Produkt von zwei selbstadjungierten Operatoren $\hat{\mathcal{A}}$ und $\hat{\mathcal{B}}$. Es gilt also beispielsweise

$$\int u_1^*(x)\,\hat{\mathcal{A}}\,u_2(x)\,\mathrm{d}x = \int \left[\hat{\mathcal{A}}^* u_1^*(x)\right] u_2(x)\,\mathrm{d}x \quad . \tag{488}$$

Für das Produkt folgt

$$\begin{aligned} \int u_1^*(x)\,\hat{\mathcal{A}}\left[\hat{\mathcal{B}}\,u_2(x)\right]\mathrm{d}x &= \int \left[\hat{\mathcal{A}}^* u_1^*(x)\right]\left[\hat{\mathcal{B}}\,u_2(x)\right]\mathrm{d}x \\ &= \int \left[\hat{\mathcal{B}}^*\left[\hat{\mathcal{A}}^* u_1^*(x)\right]\right] u_2(x)\,\mathrm{d}x \\ &\neq \int \left[\hat{\mathcal{A}}^*\hat{\mathcal{B}}^* u_1^*(x)\right] u_2(x)\,\mathrm{d}x \quad . \end{aligned} \tag{489}$$

Das Produkt zweier selbstadjungierter Operatoren muß nicht selbst wieder ein selbstadjungierter Operator sein.
Hingegen kann man das Produkt $\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}}$ zerlegen in

$$\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} + \hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}}\right) + \frac{1}{2}\left(\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} - \hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}}\right) \quad . \tag{490}$$

Der Operator

$$\hat{\mathcal{F}} = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} + \hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}}\right) \tag{491}$$

ist aufgrund seiner Symmetrie selbstadjungiert. Der Operator

$$\hat{\mathcal{G}} = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} - \hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}}\right) \tag{492}$$

weist diese Eigenschaft im allgemeinen nicht auf.
Neben dem Kommutator führen wir an dieser Stelle auch den Antikommutator ein, definiert durch

$$\left[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}\right]_+ \equiv \left\{\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}\right\} = \hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} + \hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}} \tag{493}$$

Damit können wir (490) auch ausdrücken durch

$$\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} = \frac{1}{2}\left\{\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}\right\} + \frac{1}{2}\left[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}\right]_- \quad . \tag{494}$$

Wir können auch Potenzfunktionen von Operatoren definieren durch

$$\hat{\mathcal{A}}^n = \underbrace{\hat{\mathcal{A}} \cdot \hat{\mathcal{A}} \cdots \hat{\mathcal{A}}}_{n} \quad . \tag{495}$$

Darauf aufbauend können wir auch Funktionen von Operatoren definieren, indem wir die Funktionen durch ihre Potenzreihe darstellen, also

$$\hat{\mathcal{F}}\left(\hat{\mathcal{A}}\right) = a_0 1 + a_1\hat{\mathcal{A}} + a_2\hat{\mathcal{A}}^2 + \cdots \quad . \tag{496}$$

So gilt beispielsweise für die Exponentialfunktion

$$e^{\hat{\mathcal{A}}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\hat{\mathcal{A}}^n \quad . \tag{497}$$

Funktionen von Operatoren sind nur durch ihre Potenzreihe definiert. So gilt auch mit dem Hamilton-Operator $\hat{\mathcal{H}}$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}t\right)^n \quad . \tag{498}$$

Wir können Operatoren auch differenzieren. Hängt ein Operator $\hat{\mathcal{A}}$ von einem Zahlenparameter $t$ ab, beispielsweise der Zeit, so bedeutet seine Differentiation nach $t$

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathcal{A}}}{\mathrm{d}t} = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{\hat{\mathcal{A}}(t+\varepsilon) - \hat{\mathcal{A}}(t)}{\varepsilon} \quad . \tag{499}$$

Unter der partiellen Ableitung einer Operatorfunktion $\hat{\mathcal{F}}\left(\hat{\mathcal{A}}_1, \hat{\mathcal{A}}_2, \ldots\right)$ nach $\hat{\mathcal{A}}_1$ versteht man den Operator

$$\frac{\partial\hat{\mathcal{F}}}{\partial\hat{\mathcal{A}}_1} = \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{\hat{\mathcal{F}}\left(\hat{\mathcal{A}}_1 + \varepsilon\cdot 1, \hat{\mathcal{A}}_2, \ldots\right) - \hat{\mathcal{F}}\left(\hat{\mathcal{A}}_1, \hat{\mathcal{A}}_2, \ldots\right)}{\varepsilon} \quad , \tag{500}$$

wobei $\varepsilon$ jeweils eine gewöhnliche Zahl ist. Hieraus ergibt sich nach den Methoden der Differentialrechnung für die Summe und das Produkt

$$\frac{\partial}{\partial\hat{\mathcal{A}}}\left(\hat{\mathcal{F}} + \hat{\mathcal{G}}\right) = \frac{\partial\hat{\mathcal{F}}}{\partial\hat{\mathcal{A}}} + \frac{\partial\hat{\mathcal{G}}}{\partial\hat{\mathcal{A}}} \quad , \tag{501}$$

$$\frac{\partial}{\partial\hat{\mathcal{A}}}\left(\hat{\mathcal{F}}\hat{\mathcal{G}}\right) = \frac{\partial\hat{\mathcal{F}}}{\partial\hat{\mathcal{A}}}\hat{\mathcal{G}} + \hat{\mathcal{F}}\frac{\partial\hat{\mathcal{G}}}{\partial\hat{\mathcal{A}}} \quad . \tag{502}$$

Hierbei ist wieder strikt auf die Reihenfolge der Faktoren zu achten. Für die Differentiation der Potenzfunktion folgt

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\hat{\mathcal{A}}}\hat{\mathcal{A}}^n = n\,\hat{\mathcal{A}}^{n-1} \tag{503}$$

und für die Ableitung der Exponentialfunktion folgt

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\hat{\mathcal{A}}}e^{\hat{\mathcal{A}}} = e^{\hat{\mathcal{A}}} \quad . \tag{504}$$

Für einen Operator $\hat{\mathcal{A}}$ definieren wir den inversen Operator $\hat{\mathcal{A}}^{-1}$ durch die Maßgabe

$$\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{A}}^{-1} = \hat{\mathcal{A}}^{-1}\hat{\mathcal{A}} = 1 \quad . \tag{505}$$

# Der Operator des Drehimpulses

Zwischen dem Ortsoperator und dem Impulsoperator haben wir die Vertauschungsrelation abgeleitet

$$\left(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}\right)\Psi = i\hbar\Psi \tag{506}$$

und allgemein

$$\left[\hat{x}_i, \hat{p}_j\right] = i\hbar\,\delta_{ij} \quad . \tag{507}$$

Haben wir statt des Operators eine beliebige Funktion $\hat{\mathcal{F}}\left(x, y, z\right)$ vorliegen, so ergibt sich unmittelbar

$$\hat{\mathcal{F}}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{\mathcal{F}} = i\hbar\frac{\partial\hat{\mathcal{F}}}{\partial x} \tag{508}$$

und allgemeiner

$$\left[\hat{\mathcal{F}}, \hat{p}_i\right] = i\hbar\frac{\partial\hat{\mathcal{F}}}{\partial x_i} \quad . \tag{509}$$

Wir wollen uns jetzt mit korrespondierenden Eigenschaften des Drehimpulsoperators beschäftigen. In der klassischen Mechanik gilt für den Drehimpuls

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad . \tag{510}$$

Für Zentralkraftfelder ist der Drehimpuls eine Erhaltungsgröße. In der Quantenmechanik wir entsprechend dem Korrespondenzprinzip der Drehimpuls durch den Operator

$$\hat{\vec{\mathcal{L}}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \tag{511}$$

repräsentiert. Hierbei ist $\hat{\vec{p}}$ der vektorielle Operator des Impulses. Entsprechend dem Vektorprodukt gilt für die Projektionen des Drehimpulses auf die Koordinatenachsen

$$\hat{\mathcal{L}}_x = \quad y\hat{p}_z - z\hat{p}_y \quad = i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right) \quad , \tag{512}$$

$$\hat{\mathcal{L}}_y = \quad z\hat{p}_x - x\hat{p}_z \quad = i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right) \quad , \tag{513}$$

$$\hat{\mathcal{L}}_z = \quad x\hat{p}_y - y\hat{p}_x \quad = i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) \quad . \tag{514}$$

Für das Quadrat des Drehimpulses folgt explizit

$$\begin{aligned}\hat{\vec{\mathcal{L}}}^2 &= \hat{\mathcal{L}}_x^2 + \hat{\mathcal{L}}_y^2 + \hat{\mathcal{L}}_z^2 \\ &= -\hbar^2 \left[ \left( z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z} \right)^2 + \left( x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \left( y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y} \right)^2 \right] \quad . \end{aligned} \tag{515}$$

Wir wollen nun die Vertauschungsrelation für die Komponenten des Drehimpulses ermitteln. Wir berechnen den Kommutator

$$\hat{\mathcal{G}} = \hat{\mathcal{L}}_y \hat{\mathcal{L}}_z - \hat{\mathcal{L}}_z \hat{\mathcal{L}}_y \quad . \tag{516}$$

Hierzu betrachten wir zunächst den Operator $\hat{\mathcal{L}}_y \hat{\mathcal{L}}_z$,

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{L}}_y \hat{\mathcal{L}}_z &= (\hat{p}_z x - \hat{p}_x z)(\hat{p}_x y - \hat{p}_y x) \\ &= \hat{p}_z x \hat{p}_x y - \hat{p}_x z \hat{p}_x y - \hat{p}_z x \hat{p}_y x + \hat{p}_x z \hat{p}_y x \\ &= y \hat{p}_z x \hat{p}_x - z y \hat{p}_x^2 - x^2 \hat{p}_z \hat{p}_y + z \hat{p}_y \hat{p}_x x \quad . \end{aligned} \tag{517}$$

In ähnlicher Weise erhalten wir durch explizites Ausrechnen

$$\hat{\mathcal{L}}_z \hat{\mathcal{L}}_y = y \hat{p}_z \hat{p}_x x - z y \hat{p}_x^2 - x^2 \hat{p}_z \hat{p}_y + z \hat{p}_y x \hat{p}_x \quad . \tag{518}$$

Wir subtrahieren jetzt (518) von (517) und finden

$$\hat{\mathcal{L}}_y \hat{\mathcal{L}}_z - \hat{\mathcal{L}}_z \hat{\mathcal{L}}_y = y \hat{p}_z (x \hat{p}_x - \hat{p}_x x) + z \hat{p}_y (\hat{p}_x x - x \hat{p}_x) \quad . \tag{519}$$

Unter Verwendung der obigen Vertauschungsrelationen zwischen Ort und Impuls bekommen wir

$$\hat{\mathcal{L}}_y \hat{\mathcal{L}}_z - \hat{\mathcal{L}}_z \hat{\mathcal{L}}_y = i\hbar (y \hat{p}_z - \hat{p}_y z) = i\hbar\, \hat{\mathcal{L}}_x \tag{520}$$

Der Kommutator zwischen den beiden Drehimpulskomponenten $\hat{\mathcal{L}}_x$ und $\hat{\mathcal{L}}_y$ verschwindet also nicht sondern ergibt $i\hbar \hat{\mathcal{L}}_z$. Wir führen die gleiche Rechnung für die anderen Drehimpulskomponenten durch und erhalten zusammenfassend

$$\hat{\mathcal{L}}_y \hat{\mathcal{L}}_z - \hat{\mathcal{L}}_z \hat{\mathcal{L}}_y = i\hbar\, \hat{\mathcal{L}}_x \quad , \tag{521}$$

$$\hat{\mathcal{L}}_z \hat{\mathcal{L}}_x - \hat{\mathcal{L}}_x \hat{\mathcal{L}}_z = i\hbar\, \hat{\mathcal{L}}_y \quad , \tag{522}$$

$$\hat{\mathcal{L}}_x \hat{\mathcal{L}}_y - \hat{\mathcal{L}}_y \hat{\mathcal{L}}_x = i\hbar\, \hat{\mathcal{L}}_z \quad . \tag{523}$$

Die Operatoren der Komponenten des Drehimpulses sind somit nicht vertauschbar. Die Relationen (523) faßt man auch zusammen als

$$\left[ \hat{\mathcal{L}}_i, \hat{\mathcal{L}}_j \right] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk}\, \hat{\mathcal{L}}_k \quad . \tag{524}$$

Hierbei ist $\varepsilon_{ijk}$ das Levi-Cevita Symbol definiert durch

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{für gerade Permutation von} \quad i,j,k = 1,2,3 \\ -1 & \text{für ungerade Permutation von} \quad i,j,k = 1,2,3 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \tag{525}$$

$\varepsilon_{ijk}$ ist ein total antisymmetrischer Tensor. Wir betrachten jetzt die Vertauschungsrelation zwischen dem Quadrat des Drehimpulses und dessen $x$-Komponente,

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}^2 - \hat{\mathcal{L}}^2\hat{\mathcal{L}}_x &= \hat{\mathcal{L}}_x\left(\hat{\mathcal{L}}_x^2 + \hat{\mathcal{L}}_y^2 + \hat{\mathcal{L}}_z^2\right) - \left(\hat{\mathcal{L}}_x^2 + \hat{\mathcal{L}}_y^2 + \hat{\mathcal{L}}_z^2\right)\hat{\mathcal{L}}_x \\
&= \hat{\mathcal{L}}_x\left(\hat{\mathcal{L}}_y^2 + \hat{\mathcal{L}}_z^2\right) - \left(\hat{\mathcal{L}}_y^2 + \hat{\mathcal{L}}_z^2\right)\hat{\mathcal{L}}_x \\
&= \hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}_y^2 + \hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}_z^2 - \hat{\mathcal{L}}_y^2\hat{\mathcal{L}}_x - \hat{\mathcal{L}}_z^2\hat{\mathcal{L}}_x \qquad (526)
\end{aligned}$$

Es ist

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}_y &= i\hbar\,\hat{\mathcal{L}}_z + \hat{\mathcal{L}}_y\hat{\mathcal{L}}_x \quad , \qquad (527) \\
-\hat{\mathcal{L}}_y\hat{\mathcal{L}}_x &= i\hbar\,\hat{\mathcal{L}}_z - \hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}_y \quad . \qquad (528)
\end{aligned}$$

Es folgt

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{A}} &= \hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}_y^2 + \hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}_z^2 - \hat{\mathcal{L}}_y^2\hat{\mathcal{L}}_x - \hat{\mathcal{L}}_z^2\hat{\mathcal{L}}_x \\
&= \left(i\hbar\hat{\mathcal{L}}_z + \hat{\mathcal{L}}_y\hat{\mathcal{L}}_x\right)\hat{\mathcal{L}}_y + \hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}_z^2 + \hat{\mathcal{L}}_y\left(i\hbar\hat{\mathcal{L}}_z - \hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}_y\right) - \hat{\mathcal{L}}_z^2\hat{\mathcal{L}}_x \\
&= i\hbar\left(\hat{\mathcal{L}}_z\hat{\mathcal{L}}_y + \hat{\mathcal{L}}_y\hat{\mathcal{L}}_z\right) + \hat{\mathcal{L}}_y\hat{\mathcal{L}}_z\hat{\mathcal{L}}_y - \hat{\mathcal{L}}_y\hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}_y + \hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}_z^2 - \hat{\mathcal{L}}_z^2\hat{\mathcal{L}}_x \\
&= i\hbar\left(\hat{\mathcal{L}}_z\hat{\mathcal{L}}_y + \hat{\mathcal{L}}_y\hat{\mathcal{L}}_z\right) + \hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}_z\hat{\mathcal{L}}_z - \hat{\mathcal{L}}_z\hat{\mathcal{L}}_z\hat{\mathcal{L}}_x \qquad (529)
\end{aligned}$$

Es ist

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}_z &= -i\hbar\,\hat{\mathcal{L}}_y + \hat{\mathcal{L}}_z\hat{\mathcal{L}}_x \quad , \qquad (530) \\
-\hat{\mathcal{L}}_z\hat{\mathcal{L}}_x &= -i\hbar\,\hat{\mathcal{L}}_y - \hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}_z \quad . \qquad (531)
\end{aligned}$$

Somit resultiert

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{A}} &= i\hbar\,\left(\hat{\mathcal{L}}_z\hat{\mathcal{L}}_y + \hat{\mathcal{L}}_y\hat{\mathcal{L}}_z\right) - i\hbar\,\hat{\mathcal{L}}_y\hat{\mathcal{L}}_z + \hat{\mathcal{L}}_z\hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}_z - i\hbar\hat{\mathcal{L}}_z\hat{\mathcal{L}}_y - \hat{\mathcal{L}}_z\hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}_z \\
&= i\hbar\left(\hat{\mathcal{L}}_z\hat{\mathcal{L}}_y + \hat{\mathcal{L}}_y\hat{\mathcal{L}}_z\right) - i\hbar\left(\hat{\mathcal{L}}_y\hat{\mathcal{L}}_z + \hat{\mathcal{L}}_z\hat{\mathcal{L}}_y\right) = 0 \quad . \qquad (532)
\end{aligned}$$

Zusammenfassend haben wir also

$$\hat{\mathcal{L}}_x\hat{\mathcal{L}}^2 - \hat{\mathcal{L}}^2\hat{\mathcal{L}}_x = 0 \quad . \qquad (533)$$

Durch zyklisches Vertauschen der Indizes finden wir gleichermaßen

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{L}}_y\hat{\mathcal{L}}^2 - \hat{\mathcal{L}}^2\hat{\mathcal{L}}_y &= 0 \quad , \qquad (534) \\
\hat{\mathcal{L}}_z\hat{\mathcal{L}}^2 - \hat{\mathcal{L}}^2\hat{\mathcal{L}}_z &= 0 \quad . \qquad (535)
\end{aligned}$$

Das Quadrat des Drehimpulsoperators vertauscht also mit jeder seiner Komponenten.
Wir schreiben die Drehimpulsalgebra nochmals zusammenfassend auf

$$\begin{aligned}
\left[\hat{\mathcal{L}}_i, \hat{\mathcal{L}}_j\right] &= i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{\mathcal{L}}_k \quad , \qquad (536) \\
\left[\hat{\mathcal{L}}_i, \hat{\mathcal{L}}^2\right] &= 0 \qquad (537)
\end{aligned}$$

mit $i, j, k = 1, 2, 3$. In (536) haben wir die Einsteinsche Summenkonvention verwendet, die besagt, daß über doppelt vorkommende Indizes automatisch summiert wird.

Nachdem wir die kartesischen Komponenten des Drehimpulsoperators behandelt haben, wollen wir auch noch die Darstellung in Kugelkoordinaten

$$\begin{aligned} x &= r\sin\vartheta\cos\varphi \quad , \\ y &= r\sin\vartheta\sin\varphi \quad , \\ z &= r\cos\vartheta \end{aligned} \tag{538}$$

anführen. Mittels (538) transformieren wir von der kartesischen Darstellung des Drehimpulsoperators auf die sphärische Darstellung des Drehimpulsoperators. Es resultiert

$$\hat{\mathcal{L}}_x = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \cot\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \quad , \tag{539}$$

$$\hat{\mathcal{L}}_y = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \cot\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \quad , \tag{540}$$

$$\hat{\mathcal{L}}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \quad . \tag{541}$$

Für das Quadrat des Drehimpulsoperators bekommen wir

$$\hat{\mathcal{L}}^2 = -\hbar^2\,\nabla^2_{\vartheta,\varphi} \tag{542}$$

mit $\nabla^2_{\vartheta,\varphi}$ als Laplaceschen Operator für die Kugelfläche

$$\nabla^2_{\vartheta,\varphi} = \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \quad . \tag{543}$$

Bei der Diskussion des Wasserstoff-Problems hatten wir bereist die Eigenfunktionen und Eigenwerte des Operators $\nabla^2_{\vartheta,\varphi}$ bestimmt. Es gilt

$$\nabla^2_{\vartheta,\varphi}Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) = -\ell\,(\ell+1)\,Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) \quad . \tag{544}$$

Damit sind die Kugelfunktionen auch die Eigenfunktionen des Quadrats des Drehimpulsoperators,

$$\hat{\mathcal{L}}^2\,Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) = \hbar^2\ell\,(\ell+1)\,Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) \quad . \tag{545}$$

Der Eigenwert von $\hat{\mathcal{L}}^2$ ist also $\hbar^2\ell\,(\ell+1)$. Dies rechtfertigt auch die Bezeichnung Bahndrehimpulsquantenzahl für die Quantenzahl $\ell$, die bei der Diskussion des Wasserstoff-Problems auftrat. Die Eigenwerte des Quadrats des Bahndrehimpulsoperators sind also nicht kontinuierlich sondern diskret. Die $\varphi$-Abhängigkeit der Kugelfunktionen $Y_{\ell m}$ ist durch den Faktor $e^{im\varphi}$ gegeben. Betrachten wir nun die Wirkung des $\hat{\mathcal{L}}_z$-Operators auf die Kugelfunktionen, so folgt

$$\hat{\mathcal{L}}_z Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) = -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\,Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) = m\hbar\,Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) \quad . \tag{546}$$

Damit sind die Kugelfunktionen auch die Eigenfunktionen der $z$-Komponente des Bahndrehimpulsoperators. Der zugehörige Eigenwert lautet $m\hbar$. Man beachte, daß der Bahndrehimpuls dieselbe Dimension wie die Wirkung hat. Auch das Eigenwertspektrum der $z$-Komponente des Bahndrehimpulsoperators ist diskret und ist durch die Quantenzahl $m$ bestimmt. Man nennt $m$ die magnetische Quantenzahl. Zeigt der Bahndrehimpuls ausschließlich in $z$-Richtung, so gilt $m = \pm\ell$.

Wir betrachten nochmals den Hamilton-Operator wie er zum Beispiel bei der Diskussion des Wasserstoff-Problems auftrat. Es ist

$$\hat{\mathcal{H}}\left(\vec{r},\hat{\vec{p}}\right) = \hat{\mathcal{T}}\left(\hat{\vec{p}}\right) + V(\vec{r}) \tag{547}$$

mit

$$\hat{\mathcal{T}} = \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}}_x^{\,2} + \hat{\vec{p}}_y^{\,2} + \hat{\vec{p}}_z^{\,2}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 \quad . \tag{548}$$

Wir stellen den Laplace-Operator $\Delta = \vec{\nabla}^2$ in Kugelkoordinaten dar Es ist

$$\vec{\nabla}^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\nabla^2_{\vartheta,\varphi}}{r^2} \tag{549}$$

Mit

$$\hat{\mathcal{T}}_r = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{550}$$

und dem Quadrat des Bahndrehimpulsoperators können wir den Operator der kinetischen Energie schreiben als

$$\hat{\mathcal{T}} = \hat{\mathcal{T}}_r + \frac{\hat{\mathcal{L}}^2}{2m\,r^2} \quad . \tag{551}$$

Den Bahndrehimpulsanteil faßt man auch wie beim klassischen Kepler-Problem mit dem Potential $V(\vec{r})$ zum effektiven Potential zusammen, das in der Quantenmechanik ein Operator ist

$$\hat{\mathcal{V}}_{\text{eff}} = \frac{\hat{\mathcal{L}}^2}{2m\,r^2} + V(\vec{r}) \quad . \tag{552}$$

# Eigenschaften selbstadjungierter Operatoren

Wir hatten die Selbstadjungiertheit eines Operators $\hat{\mathcal{L}}$ mittels des folgenden Matrixelementes nachgewiesen

$$\int u_1^*(x)\cdot\hat{\mathcal{L}}\,u_2(x)\;\mathrm{d}x = \int\left[\hat{\mathcal{L}}^*\,u_1^*(x)\right]\cdot u_2(x)\;\mathrm{d}x \tag{553}$$

Jetzt nehmen wir an, $\Psi_m(x)$ und $\Psi_n(x)$ seien Eigenfunktionen des Operators $\hat{\mathcal{L}}$. Per Definition bezeichnen wir zwei Eigenfunktionen als orthogonal, wenn gilt

$$\int \Psi_m^*(x)\;\Psi_n(x)\;\mathrm{d}x = 0 \quad . \tag{554}$$

Aufgrund der Voraussetzung bezüglich der Eigenfunktionen gilt

$$\hat{\mathcal{L}}\,\Psi_m = L_m\Psi_m \quad , \tag{555}$$
$$\hat{\mathcal{L}}\,\Psi_n = L_n\Psi_n \quad , \tag{556}$$

mit den Eigenwerten $L_m$ und $L_n$. Wir bilden das komplex Konjugierte von (555)

$$\hat{\mathcal{L}}^*\,\Psi_m^* = L_m^*\Psi_m^* \quad . \tag{557}$$

Aufgrund der Selbstadjungiertheit des Operators $\hat{\mathcal{L}}$ folgt aus (553)

$$\int \Psi_m^* \, \hat{\mathcal{L}} \, \Psi_m \, \mathrm{d}x = \int \left[ \hat{\mathcal{L}}^* \, \Psi_m^* \right] \cdot \Psi_m \, \mathrm{d}x \tag{558}$$

bezüglich der Eigenwerte

$$\begin{aligned} \int \Psi_m^* \, L_m \, \Psi_m \, \mathrm{d}x &= \int L_m^* \, \Psi_m^* \, \Psi_m \, \mathrm{d}x \\ = L_m \int \Psi_m^* \, \Psi_m \, \mathrm{d}x &= L_m^* \int \Psi_m^* \, \Psi_m \, \mathrm{d}x \quad , \end{aligned} \tag{559}$$

also

$$L_m = L_m^* \quad . \tag{560}$$

Die Eigenwerte selbstadjungierter Operatoren sind reell. Jetzt betrachten wir Zustände $\Psi_m$ und $\Psi_n$ und die dazugehörigen Eigenwerte $L_m$ und $L_n$ mit $L_m \neq L_n$. Ferner betrachten wir den folgenden Ausdruck

$$\int \Psi_m^* \cdot \hat{\mathcal{L}} \, \Psi_n \, \mathrm{d}x - \int \hat{\mathcal{L}}^* \, \Psi_m^* \cdot \Psi_n \, \mathrm{d}x = (L_n - L_m) \int \Psi_m * \Psi_n \, \mathrm{d}x \quad . \tag{561}$$

Wir haben die Tatsache ausgenutzt, daß die Eigenwerte selbstadjungierter Operatoren reell sind. Die linke Seite von (561) ist gleich Null aufgrund der Definition der Selbstadjungiertheit. Folglich haben wir

$$(L_n - L_m) \int \Psi_m^* \, \Psi_n \, \mathrm{d}x = 0 \quad . \tag{562}$$

Damit folgt mit $L_n \neq L_m$ die Orthogonalität der Eigenfunktionen

$$\int \Psi_m^* \, \Psi_n \, \mathrm{d}x = 0 \qquad \text{für} \quad m \neq n \quad . \tag{563}$$

Zusammen mit der Normierungsbedingung

$$\int \Psi_n^* \, \Psi_n \, \mathrm{d}x = 1 \tag{564}$$

können wir schreiben

$$\int \Psi_m^* \, \Psi_n \, \mathrm{d}x = \delta_{mn} \quad . \tag{565}$$

Selbstadjungierte Operatoren haben orthogonale Eigenfunktionen.

## Die Dirac-Schreibweise

Wir wollen jetzt einige mathematische Prinzipien der Quantenmechanik in knapper Form zusammenfassen und dabei die äußerst prägnante

$$\langle \text{bra} | \cdots c \cdots | \text{ket} \rangle \text{ -Schreibweise} \tag{566}$$

einführen. Dieses Kalkül ist zur abstrakten Formulierung besonders geeignet, weil es sehr ökonomisch, eindeutig und inhaltlich äquivalent zur „Integralschreibweise“ ist. Den heuristischen Standpunkt einnehmend, werden wir hier auf die Ausbreitung tiefergehender mathematischer Aspekte verzichten und auf entsprechende Literatur verweisen[1,2], in der der notwendige Apparat zur Funktionalanalysis dargelegt wird. Ausgangspunkt der abstrakten Quantenmechanik ist das Postulat: Ein Quantensystem werde durch einen Hilbertraum $\mathcal{H}$ charakterisiert. Jeder mögliche, reine Zustand $\psi$ in dem sich das Quantensystem befinden kann, werde durch ein Element (Zustandsvektor oder kurz Vektor) des Hilbertraums beschrieben. Dirac folgend notieren wir für die Elemente des Hilbertraums:

$$\psi \longrightarrow |\psi\rangle \quad \text{„ket"-Vektor.} \tag{567}$$

Wir definieren den Hilberraum $\mathcal{H}$ im folgenden durch Auflisten der Axiomatik. Anschließend sollen dann erste Konsequenzen gezogen werden.

**A1:** $\mathcal{H}$ ist ein linearer Vektorraum über dem Körper **C** der komplexen Zahlen.

Für Elemente des Hilbertraumes notieren wir

$$|\phi\rangle\,, |\chi\rangle\,, |\psi\rangle\,, \ldots, |\varphi\rangle \in \mathcal{H} \tag{568}$$

Es sind zwei Verknüpfungen, eine Addition und eine Multiplikation, erklärt, bezüglich derer $\mathcal{H}$ abgeschlossen ist, d.h. die Resultate dieser Verknüpfungen sind ebenfalls Elemente von $\mathcal{H}$. Die Addition „+" erfüllt die folgenden Eigenschaften:

$$|\phi\rangle + |\chi\rangle = |\chi\rangle + |\phi\rangle \equiv |\chi + \phi\rangle \quad \text{(Kommutativ-Gesetz)} \tag{569}$$
$$(|\phi\rangle + |\chi\rangle) + |\psi\rangle = |\phi\rangle + (|\chi\rangle + |\psi\rangle) \quad \text{(Assoziativ-Gesetz)} \tag{570}$$
$$|\phi\rangle + |0\rangle = |\phi\rangle \quad \text{(Existenz eines Nullelements)} \tag{571}$$
$$|\phi\rangle + |-\phi\rangle = |0\rangle \quad \text{(Inverses)} \tag{572}$$

Die Existenz eines zu $|\phi\rangle$ inversen Elements $|-\phi\rangle$ erlaubt die Einführung einer Subtraktion in dem Sinne, das gelten soll:

$$|\phi\rangle + |-\phi\rangle \equiv |\phi\rangle - |\phi\rangle = 0 \quad , \tag{573}$$
$$|\phi\rangle + |-\chi\rangle \equiv |\phi\rangle - |\chi\rangle = |\phi - \chi\rangle \quad . \tag{574}$$

Die Multiplikation von Elementen des Hilbertraums mit Elementen $c_1, c_2, \ldots, c, \ldots$ aus dem Körper der komplexen Zahlen ist durch die Eigenschaften charakterisiert:

$$c\,(|\phi\rangle + |\chi\rangle) = c\,|\phi\rangle + c\,|\chi\rangle = |c\phi\rangle + |c\chi\rangle \quad , \tag{575}$$
$$(c_1 + c_2)\,|\phi\rangle = c_1\,|\phi\rangle + c_2\,|\phi\rangle = |c_1\phi\rangle + |c_2\phi\rangle \quad , \tag{576}$$
$$(c_1 c_2)\,|\phi\rangle = c_1\,(c_2\,|\phi\rangle) \quad , \tag{577}$$
$$1\,|\phi\rangle = |\phi\rangle \quad . \tag{578}$$

Letztere Gleichung definiert ein neutrales Element bezüglich der Multiplikation. Obige Axiomatik (569 — 578) ist uns sehr wohl geläufig vom üblichen linearen Vektorraum, z.B. dem $\mathbf{R}^n$.

[1] S. Großmann, „Funktionalanalysis", (AULA-Verlag, 1988)
[2] J. Weidmann, „Lineare Operatoren in Hilberträumen", (Teubner-Verlag 1976)

Der Hauptunterschied ist, daß die Definition von $\mathcal{H}$ über den Körper der komplexen Zahlen geschieht. Ebenso überträgt sich der Begriff der linearen Unabhängigkeit. Eine Menge $\{|\varphi_n\rangle\,,\ n = 1, 2, \ldots, N \in \mathbf{N}\}$ von Zustandsvektoren heißt linear unabhängig falls gilt:

$$\sum_{n=1}^{N} c_n\,|\varphi_n\rangle = |0\rangle \quad \Longrightarrow \quad c_n = 0 \quad \forall \quad n = 1\cdots N \quad . \tag{579}$$

Hierüber definiert sich die Dimension von $\mathcal{H}$ als die Maximalzahl linear unabhängiger Vektoren aus $\mathcal{H}$. Falls $N < \infty$, so ist $\mathcal{H}$ endlich-dimensional, d.h. die Dimension ist abzählbar. Existieren aber unendlich viele linear unabhängige Elemente $|\varphi_n\rangle \in \mathcal{H}$, so ist $\mathcal{H}$ unendlich-abzählbarer Dimension. Dies bedeutet auch, daß jede endliche Untermenge $\{|\varphi_n\rangle\,,\ n = 1, 2, \ldots, M < \infty\}$ von Zustandsvektoren linear unabhängig ist.
Wir erinnern uns, daß zur Beschreibung der klassischen Physik, z.B. im Konfigurationsraum, der Abstandsbegriff unerläßlich war. Dazu war der Übergang vom linearen Vektorraum zu einem affinen Raum mittels der Definition eines geeigneten Skalarproduktes notwendig. Dies begegnet uns im Rahmen der Quantenmechanik in Gestalt des Axioms

**A2:** $\mathcal{H}$ ist ein unitärer Raum.

Wir definieren ein Skalarprodukt als eine Abbildung, die jedem Paar $|\phi\rangle\,, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ eine komplexe Zahl $c \in \mathbf{C}$ zuordnet:

$$(\phi, \psi) := \langle\phi\,|\psi\rangle = c \in \mathbf{C} \quad . \tag{580}$$

Dabei haben wir die Notation

$$\phi \longrightarrow \langle\phi| \quad , \quad \text{„}\langle\text{bra}|\text{“-Vektor} \tag{581}$$

den sogenannten $\langle$bra$|$-Vektor eingeführt. Das Skalarprodukt (580) erfüllt die Eigenschaften:

$$\langle\phi\,|\psi\rangle = \langle\psi|\,\phi\rangle^* \quad , \tag{582}$$
$$\langle\phi\,|\psi + \chi\rangle = \langle\phi\,|\psi\rangle + \langle\phi\,|\chi\rangle \quad , \tag{583}$$
$$\langle\phi\,|c\psi\rangle = c\,\langle\phi\,|\psi\rangle = \langle\,c^*\phi|\,\psi\rangle \quad , \tag{584}$$
$$\langle\psi\,|\psi\rangle \geq 0 \quad \forall \quad |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad , \tag{585}$$
$$\langle\psi\,|\psi\rangle = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad |\psi\rangle = |0\rangle \quad . \tag{586}$$

Mit Hilfe des definierten Skalarprodukts lassen sich einige wichtige Begriffe einführen.
Orthogonalität: Zwei Zustandsvektoren $|\phi\rangle$ und $|\psi\rangle$ aus $\mathcal{H}$ heißen orthogonal, falls gilt:

$$\langle\phi\,|\psi\rangle = 0 \quad . \tag{587}$$

Ferner läßt sich der Begriff der Norm oder Länge $\|\psi\|$ des Vektors $|\psi\rangle$ definieren:

$$\|\psi\| := \sqrt{\langle\psi\,|\psi\rangle} \equiv \sqrt{c} \quad . \tag{588}$$

Jeder Vektor $|\phi\rangle \neq |0\rangle$ läßt sich auf Eins normieren:

$$|\phi\rangle \longrightarrow |\varphi\rangle := \frac{|\phi\rangle}{\|\phi\|} = \frac{|\phi\rangle}{\sqrt{\langle\phi\,|\phi\rangle}} \quad , \quad \langle\varphi\,|\varphi\rangle = 1 \quad . \tag{589}$$

Die oben eingeführte Norm impliziert auch einen Abstandsbegriff. Sie erfüllt zusätzlich die Schwarzsche Ungleichung

$$\|\psi\| \, \|\phi\| \geq |\langle\, \psi | \, \phi \rangle| \quad , \tag{590}$$

sowie die Dreiecksrelation

$$\|\psi\| + \|\phi\| \geq \|\psi + \phi\| \geq |\|\psi\| - \|\phi\|| \quad . \tag{591}$$

Ganz im Sinne der durch (574) eingeführten Subtraktion versteht sich der Abstand zwischen zwei Vektoren $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ als

$$\|\psi - \phi\| = \sqrt{(\langle\psi| - \langle\phi|)\,(|\psi\rangle - |\phi\rangle)} = \sqrt{\langle\, \psi - \phi |\, \psi - \phi \rangle} \quad . \tag{592}$$

Gegeben ein Zustandsvektor $|\psi\rangle$ zusammen mit einer Folge $\{|\psi_n\rangle\}$ von Vektoren aus $\mathcal{H}$, so ermöglicht obiger Abstandsbegriff die Definition des Begriffs der Konvergenz. Die Folge $\{|\psi_n\rangle\}$ konvergiert stark gegen $|\psi\rangle$, falls gilt:

$$\lim_{n\to\infty} \|\psi - \psi_n\| = 0 \quad . \tag{593}$$

Der Begriff der Cauchy-Folge überträgt sich in bekannter Weise: Die Folge $\{|\psi_n\rangle\}$ heißt Cauchy-Folge, falls zu jedem reellen $\varepsilon > 0$ ein $N(\varepsilon) \in \mathbf{N}$ existiert, so daß für alle $n, m > N(\varepsilon)$ gilt:

$$\|\psi_n - \psi_m\| < \varepsilon \quad . \tag{594}$$

Es ist anschaulich klar, daß die bisherige Axiomatik im Falle endlich-dimensionaler Hilberträume völlig ausreicht. Mit Hilfe des oben eingeführten Skalarprodukts läßt sich nun eine Orthonormalbasis $\{|\varphi_n\rangle\,, n = 1, \ldots, N\}$ des $N$-dimensionalen Hilbertraums konstruieren. Wir sprechen von einem vollständigen Orthonormalsystem, falls sich jeder Zustandsvektor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ als Linearkombination

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{N} c_n \, |\varphi_n\rangle \quad , \quad c_n \in \mathbf{C} \quad , \quad \langle \varphi_n \, | \varphi_m \, \rangle = \delta_{mn} \tag{595}$$

darstellen läßt. Die Entwicklungskoeffizienten $c_n$ ($c$-Zahlen) lassen sich gemäß

$$\langle\, \varphi_n | \, \psi\rangle = \sum_{m=1}^{N} c_m \, \langle \varphi_n \, | \varphi_m \, \rangle = \sum_{m=1}^{N} c_m \, \delta_{nm} = c_n \tag{596}$$

als Komponenten des Vektors $|\psi\rangle$ bezüglich der Basis $\{|\varphi_n\rangle\}$ deuten. Um den Übergang von endlich-dimensionalen Hilberträumen zu abzählbar-unendlich-dimensionalen Hilberträumen zu gewährleisten, mit solchen haben wir es in der Quantenmechanik meistens zu tun, müssen wir zwei weitere Axiome fordern.

**A3:** $\mathcal{H}$ ist separabel

Dieses Axiom besagt, daß es eine abzählbare Menge $\mathcal{M}$ von Elementen aus $\mathcal{H}$ gibt, die überall in $\mathcal{H}$ dicht ist. Dabei bedeutet die Begriffsbildung „dicht“, daß zu jedem $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ und zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $|\psi_m\rangle \in \mathcal{M}$ gefunden werden kann, welches die Bedingung $\|\psi - \psi_m\| < \varepsilon$ erfüllt, also beliebig nahe an $|\psi\rangle$ liegt. Ergänzend zur Separabilität fordern wir als letztes Axiom:

**A4:** $\mathcal{H}$ ist vollständig.

Es besagt, daß jede Cauchy-Folge $\{|\psi_n\rangle\} \subset \mathcal{M}$ gegen ein $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ konvergiert. Damit haben wir alle Axiome des Hilbertraumes zusammengestellt. Die für alle weiteren Entwicklungen essentielle Konsequenz der Axiome **A1** bis **A4** ist die Sicherstellung der Existenz eines vollständigen Orthonormalsystems $\{|\varphi_n\rangle\}$, welches den gesamten Hilbertraum $\mathcal{H}$ aufspannt. Jeder abstrakte Zustandsvektor $|\psi\rangle$ läßt sich in der Form darstellen:

$$|\psi\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_n c_n \, |\varphi_n\rangle \quad , \tag{597}$$

wobei die Notation $\sum\!\!\!\!\!\!\int$ sowohl den Fall der Entwicklung nach abzählbar-unendlichen (eigentlichen) Zuständen $|\varphi_n\rangle$ als auch den Fall kontinuierlicher (uneigentlicher) Zustände abdecken soll. Konkret schreiben wir:

$$\sum\!\!\!\!\!\!\int_n = \begin{cases} \sum\limits_n \quad : \ |\varphi_n\rangle \ \longrightarrow \ \text{eigentliche Zustände; } n \text{ diskret} \\ \qquad\qquad\qquad\qquad \text{und } \dim(\mathcal{H}) \text{ unendlich-abzählbar.} \\ \\ \int \mathrm{d}n \ : \ |\varphi_n\rangle \ \longrightarrow \ \text{uneigentliche Zustände, } n \text{ kontinuierlich} \end{cases} \tag{598}$$

Die Orthonormalitätsrelation verstehen wir entsprechend:

$$\langle\, \varphi_m |\, \varphi_n \rangle = \delta\,(m|\,n) = \begin{cases} \delta_{mn} & : \ \text{eigentliche Zustände} \\ \delta\,(m-n) & : \ \text{uneigentliche Zustände} \end{cases} \tag{599}$$

Aus der Gleichung (597) erhalten wir nach Projektion mit $\langle\varphi_m|$ die Vektorkomponente:

$$\langle\, \varphi_m |\, \psi \rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_n c_n \, \langle\, \varphi_m |\, \varphi_n \rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_n c_m \, \delta\,(m|\,n) = c_m \ . \tag{600}$$

Setzen wir diese Beziehung für die Koeffizienten $c_n$ in die Entwicklung (597) ein, so erhalten wir formal:

$$|\psi\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_n \langle\, \varphi_n |\, \psi \rangle \, |\varphi_n\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_n |\varphi_n\rangle \, \langle\, \varphi_n |\, \psi \rangle \quad . \tag{601}$$

Hieraus läßt sich die folgende Darstellung des Einheitsoperators identifizieren:

$$\hat{1} = \sum\!\!\!\!\!\!\int_n \, |\varphi_n\rangle \, \langle\varphi_n| \quad , \tag{602}$$

wobei die Schreibweise das dyadische Produkt aus den Basiszuständen $|\varphi_n\rangle$ bedeutet. Die Gleichungen (599) und (602) fassen den Begriff des vollständigen Orthonormalsystems noch einmal in der abstrakten Dirac-Schreibweise zusammen. Jeder einzelne Summand in (602) hat eine anschauliche Bedeutung. Angewendet auf einen Zustand $|\psi\rangle$ projeziert er gerade die Vektorkomponente $\langle\, \varphi_n |\, \psi \rangle$ in Richtung des Basisvektors $|\varphi_n\rangle$ heraus. Dies führt uns auf den Begriff des Projektionsoperators oder kurz Projektors $\hat{\mathcal{P}}_n$:

$$\hat{\mathcal{P}}_n := |\varphi_n\rangle \, \langle\varphi_n| \quad , \quad \hat{\mathcal{P}}_n \, |\psi\rangle = |\varphi_n\rangle \, \langle\varphi_n |\, \psi \rangle \quad . \tag{603}$$

Er besitzt offensichtlich die folgenden Eigenschaften:

$$\hat{\mathcal{P}}_n^2 = \hat{\mathcal{P}}_n \hat{\mathcal{P}}_n \ = \ |\varphi_n\rangle \, \underbrace{\langle\, \varphi_n |\, \varphi_n \rangle}_{=1} \, \langle\varphi_n| = |\varphi_n\rangle \, \langle\varphi_n| = \hat{\mathcal{P}}_n \quad , \tag{604}$$

$$\left[\hat{\mathcal{P}}_n, \hat{\mathcal{P}}_m\right] = 0 \quad . \tag{605}$$

Die Beziehung (604) bezeichnet man als die Idempotenz. Sie ist für beliebige Projektoren charakteristisch.
Mit Hilfe der Vollständigkeitsrelation (602) lassen sich Skalarprodukte zwischen abstrakten Zuständen $|\phi\rangle$ und $|\psi\rangle$ auswerten. Es läßt sich gemäß

$$\langle \phi \,|\psi \rangle = \left\langle \phi \left| \hat{1} \right| \psi \right\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_n \langle \varphi_n |\, \phi \rangle^* \langle \varphi_n |\, \psi \rangle \quad , \tag{606}$$

über die Vektorkomponenten $\langle \varphi_n |\, \phi \rangle$ und $\langle \varphi_n |\, \psi \rangle$ bezüglich der Basis $|\varphi_n\rangle$ berechnen, indem wir zwischen dem bra-Vektor $\langle \phi|$ und dem ket-Vektor $|\psi\rangle$ die „vollständige $\hat{1}$ einschieben“.
Wir wollen jetzt die Wirkung linearer Operatoren im Hilbertraum im Rahmen der Dirac-Notation darlegen. Ein Operator $\hat{\mathcal{A}}$ vermittelt eine eindeutige Abbildung des Hilbertraumzustandes $|\psi\rangle$ auf den Zustand $|\psi'\rangle$, d.h.

$$|\psi'\rangle = \hat{\mathcal{A}} \,|\psi\rangle = \left| \hat{\mathcal{A}} \psi \right\rangle \quad . \tag{607}$$

Lassen wir einen Operator $\hat{\mathcal{A}}$ auf einen ket-Vektor wirken, so sagen wir: „$\hat{\mathcal{A}}$ wirkt nach rechts“. Lineare Operatoren sind charakterisiert durch die Eigenschaft

$$\hat{\mathcal{A}} \left( c_1 \,|\psi\rangle + c_2 \,|\phi\rangle \right) = c_1 \hat{\mathcal{A}} \,|\psi\rangle + c_2 \hat{\mathcal{A}} \,|\phi\rangle = c_1 \left| \hat{\mathcal{A}} \psi \right\rangle + c_2 \left| \hat{\mathcal{A}} \phi \right\rangle \quad . \tag{608}$$

Nachdem wir die Wirkung linearer Operatoren auf Vektoren des Hilbertraums erklärt haben, können wir ebenfalls mit Hilfe des Begriffs der Norm die Beschränktheit von $\hat{\mathcal{A}}$ definieren. Ein Operator $\hat{\mathcal{A}}$ heißt beschränkt, falls gilt:

$$\|\psi'\| = \left\| \left( \hat{\mathcal{A}} \,|\psi\rangle \right) \right\| \leq C \,\|\psi\| \quad . \tag{609}$$

Dabei ist $C$ für alle Vektoren $|\psi\rangle$ aus dem Definitionsbereich $\mathcal{D}_{\hat{\mathcal{A}}}$ von $\hat{\mathcal{A}}$ eine feste Zahl. Die Beschränktheit eines Operators hat die unmittelbare Konsequenz, daß für eine gegebene Cauchy-Folge $\{|\psi_n\rangle\}$, die gegen den Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{D}_{\hat{\mathcal{A}}}$ konvergiert, auch die Cauchy-Folge $\left\{ |\psi'_n\rangle = \left| \hat{\mathcal{A}} \psi_n \right\rangle \right\}$ gegen das Bild $|\psi'\rangle = \left| \hat{\mathcal{A}} \psi \right\rangle$ konvergiert. Der zu $\hat{\mathcal{A}}$ adjungierte Operator $\hat{\mathcal{A}}^\dagger$ vermittelt eine eindeutige Abbildung zwischen bra-Vektoren. In der Dirac-Schreibweise drücken wir das folgendermaßen aus:

$$\langle \psi' | = \left( \langle \psi | \, \hat{\mathcal{A}}^\dagger \right) = \left\langle \hat{\mathcal{A}} \psi \right| \quad . \tag{610}$$

Anwenden des adjungierten Operators auf einen bra-Vektor bedeutet: „$\hat{\mathcal{A}}$ wirkt nach links“.

## Unitäre Operatoren

Ein Operator $\hat{\mathcal{U}}$ heißt unitär, wenn sein inverser Operator gleich dem adjungierten Operator ist

$$\hat{\mathcal{U}}^{-1} = \hat{\mathcal{U}}^{\dagger} \tag{611}$$

oder, da gilt $\hat{\mathcal{U}}\hat{\mathcal{U}}^{-1} = \hat{\mathcal{U}}^{-1}\hat{\mathcal{U}} = 1$,

$$\hat{\mathcal{U}}\hat{\mathcal{U}}^{\dagger} = \hat{\mathcal{U}}^{\dagger}\hat{\mathcal{U}} = 1 \quad . \tag{612}$$

Es gilt dann für beliebige Vektoren $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$

$$\left\langle \alpha \middle| \hat{\mathcal{U}}\, \beta \right\rangle = \left\langle \hat{\mathcal{U}}^{\dagger}\, \alpha \middle| \beta \right\rangle = \left\langle \hat{\mathcal{U}}^{-1} \alpha \middle| \beta \right\rangle \tag{613}$$

und ebenso

$$\left\langle \hat{\mathcal{U}}\, \alpha \middle| \beta \right\rangle = \left\langle \alpha \middle| \hat{\mathcal{U}}^{-1} \beta \right\rangle \quad . \tag{614}$$

Desweiteren erhalten wir die wichtige Relation

$$\left\langle \hat{\mathcal{U}}\, \alpha \middle| \hat{\mathcal{U}}\, \beta \right\rangle = \left\langle \alpha \middle| \hat{\mathcal{U}}^{-1} \hat{\mathcal{U}} \;\beta \right\rangle = \langle \alpha | \beta \rangle \quad . \tag{615}$$

Das Skalarprodukt bleibt bei unitären Transformationen invariant. Insbesondere bleiben orthogonale Vektoren bei unitären Transformationen orthogonal. Ist der Operator $\hat{\mathcal{U}}$ unitär, so gilt dies auch für $a\hat{\mathcal{U}}$ falls $aa^* = 1$. Ebenso ist der Operator $\hat{\mathcal{U}}^n$ unitär.
Bevor wir das Produkt von zwei unitären Operatoren betrachten, wollen wir zunächst nochmals das Produkt zweier adjungierter Operatoren $\hat{\mathcal{A}}$ und $\hat{\mathcal{B}}$ diskutieren. Für einen adjungierten Operator $\hat{\mathcal{A}}$ haben wir

$$\left\langle \beta \middle| \hat{\mathcal{A}} \middle| \alpha \right\rangle = \left\langle \alpha \middle| \hat{\mathcal{A}}^{\dagger} \middle| \beta \right\rangle^* \quad . \tag{616}$$

Also folgt für das Produkt $\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}}$

$$\left\langle \beta \middle| \left(\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}}\right) \middle| \alpha \right\rangle = \left\langle \alpha \middle| \left(\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}}\right)^{\dagger} \middle| \beta \right\rangle^* \quad . \tag{617}$$

Ferner gilt für adjungierte Operatoren

$$\begin{aligned} \left\langle \beta \middle| \left(\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}}\right) \middle| \alpha \right\rangle &= \left\langle \hat{\mathcal{A}}^{\dagger}\, \beta \middle| \hat{\mathcal{B}} \middle| \alpha \right\rangle = \left\langle \hat{\mathcal{B}}^{\dagger}\, \hat{\mathcal{A}}^{\dagger}\, \beta \middle| \alpha \right\rangle = \left\langle \alpha \middle| \hat{\mathcal{B}}^{\dagger}\, \hat{\mathcal{A}}^{\dagger}\;\beta \right\rangle^* \\ &= \left\langle \alpha \middle| \hat{\mathcal{B}}^{\dagger}\, \hat{\mathcal{A}}^{\dagger} \middle| \beta \right\rangle^* \quad . \end{aligned} \tag{618}$$

Der Vergleich von (617) mit (618) ergibt

$$\left(\hat{\mathcal{A}}\,\hat{\mathcal{B}}\right)^{\dagger} = \hat{\mathcal{B}}^{\dagger}\,\hat{\mathcal{A}}^{\dagger} \quad . \tag{619}$$

Jetzt betrachten wir das Produkt zweier unitärer Operatoren $\hat{\mathcal{U}}$ und $\hat{\mathcal{V}}$. Es ist

$$\left(\hat{\mathcal{U}}\,\hat{\mathcal{V}}\right)^{\dagger} = \hat{\mathcal{V}}^{\dagger}\hat{\mathcal{U}}^{\dagger} = \hat{\mathcal{V}}^{-1}\hat{\mathcal{U}}^{-1} = \left(\hat{\mathcal{U}}\,\hat{\mathcal{V}}\right)^{-1} \quad , \tag{620}$$

denn

$$\hat{\mathcal{V}}^{-1}\hat{\mathcal{U}}^{-1}\hat{\mathcal{U}}\,\hat{\mathcal{V}} = \hat{\mathcal{V}}^{-1}\,\hat{\mathcal{V}} = 1 \quad . \tag{621}$$

Damit ist das Produkt $\hat{\mathcal{U}}\hat{\mathcal{V}}$ ebenfalls unitär. Schließlich untersuchen wir noch den Operator $e^{i\hat{\mathcal{H}}}$, wobei $\hat{\mathcal{H}}$ ein hermitescher Operator sein soll. Es ist

$$\begin{aligned} \left(e^{i\hat{\mathcal{H}}}\right)^\dagger &= \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(i\hat{\mathcal{H}}\right)^n\right)^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(-i\hat{\mathcal{H}}^\dagger\right)^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(-i\hat{\mathcal{H}}\right)^n = e^{-i\hat{\mathcal{H}}} = \left(e^{i\hat{\mathcal{H}}}\right)^{-1} \quad . \end{aligned} \tag{622}$$

Damit ist auch der Operator $e^{i\hat{\mathcal{H}}}$ unitär. Ausgehend von einem unitären Operator $\hat{\mathcal{U}}$ sprechen von einer unitären Transformation bezüglich der Zustände, wenn wir schreiben können

$$\left|\tilde{\Psi}\right\rangle = \hat{\mathcal{U}}\ |\Psi\rangle \quad . \tag{623}$$

Bezüglich der Operatoren sprechen wir von einer unitären Transformation, wenn gilt

$$\hat{\tilde{\mathcal{A}}} = \hat{\mathcal{U}}\,\hat{\mathcal{A}}\,\hat{\mathcal{U}}^\dagger \quad . \tag{624}$$

Hierbei gilt für den Erwartungswert

$$\begin{aligned} \left\langle \tilde{\Psi} \left| \hat{\tilde{\mathcal{A}}} \right| \tilde{\Psi} \right\rangle &= \left\langle \hat{\mathcal{U}}\,\Psi \left| \hat{\mathcal{U}}\,\hat{\mathcal{A}}\,\hat{\mathcal{U}}^\dagger \right| \hat{\mathcal{U}}\,\Psi \right\rangle \\ &= \left\langle \Psi \left| \hat{\mathcal{U}}^\dagger\hat{\mathcal{U}}\,\hat{\mathcal{A}}\,\hat{\mathcal{U}}^\dagger\hat{\mathcal{U}} \right| \Psi \right\rangle = \left\langle \Psi \left| \hat{\mathcal{A}} \right| \Psi \right\rangle \quad . \end{aligned} \tag{625}$$

Der Erwartungswert bleibt invariant bei unitären Transformationen.
Schließlich untersuchen wir noch die Änderung von Eigenwerten bei unitären Transformationen. Es gelte

$$\hat{\mathcal{A}}\,|\alpha_i\rangle = a_i\,|\alpha_i\rangle \quad , \tag{626}$$

$$\hat{\tilde{\mathcal{A}}}\,|\tilde{\alpha}_i\rangle = \tilde{a}_i\,|\tilde{\alpha}_i\rangle \quad . \tag{627}$$

Dann haben wir

$$\begin{aligned} \hat{\tilde{\mathcal{A}}}\,|\tilde{\alpha}_i\rangle &= \hat{\mathcal{U}}\,\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{U}}^\dagger\,|\tilde{\alpha}_i\rangle = \hat{\mathcal{U}}\,\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{U}}^\dagger\hat{\mathcal{U}}\,|\alpha_i\rangle \\ &= \hat{\mathcal{U}}\,\hat{\mathcal{A}}\,|\alpha_i\rangle = a_i\hat{\mathcal{U}}\,|\alpha_i\rangle = a_i\,|\tilde{\alpha}_i\rangle \quad . \end{aligned} \tag{628}$$

Der Vergleich von (627) und (628) zeigt

$$\tilde{a}_i = a_i \quad . \tag{629}$$

Bei unitären Transformationen bleiben die Eigenwerte erhalten. Eine unitäre Transformation ändert die Physik nicht.

# Matrixdarstellung von Operatoren

Der Hilbert-Raum ist ein unendlich dimensionaler, unitärer Vektorraum. Der Hilbert-Raum ist abzählbar unendlich, was bedeutet, daß die unabhängigen Vektoren des Hilbert-Raums durch die natürlichen Zahlen numeriert werden können. Wir können einen beliebigen Zustandsvektor $|\varphi\rangle$ nach linear unabhängigen Basisvektoren $|v_k\rangle$ zerlegen. In einem endlich-dimensionalen unitären Vektorraum $U_n$ führt dies auf eine endliche Summe, im Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ auf eine unendliche Summe

$$|\varphi\rangle = \sum_k |v_k\rangle\, \varphi_k \quad . \tag{630}$$

Im Unterschied zu der elementaren Vektorrechnung in der klassischen Mechanik sind hier die Komponenten $\varphi_k$ des Vektors $|\varphi\rangle$ bezüglich der Basis $|v_k\rangle$ komplexe Zahlen, die durch den Index $k$ numeriert werden.

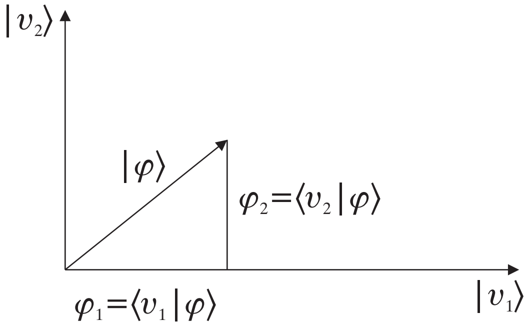


Abbildung 11: Ein Vektor $|\varphi\rangle$ und seine Komponenten $\varphi_k = \langle\, v_k|\, \varphi\rangle$.

Wie in der gewöhnlichen Vektorrechnung wird das Rechnen besonders einfach, wenn wir es mit orthonormierten Basisvektoren zu tun haben,

$$\langle v_k, v_{k'}\rangle = \delta_{kk'} \quad . \tag{631}$$

Wir multiplizieren jetzt (630) skalar mit einem Basisvektor $|v_{k'}\rangle$ und bekommen so

$$\langle\, v_{k'}|\, \varphi\rangle = \sum_k \langle\, v_{k'}|\, v_k\rangle\, \varphi_k \quad . \tag{632}$$

Aufgrund der Orthonormalität der Basisvektoren, also (631), erhalten wir für die Komponenten

$$\varphi_k = \langle\, v_k|\, \varphi\rangle \quad . \tag{633}$$

Dies führt auf die Identität

$$|\varphi\rangle = \sum_k |v_k\rangle\, \langle\, v_k|\, \varphi\rangle \quad . \tag{634}$$

Man bezeichnet ein System von Basisvektoren $|v_k\rangle$ als ein vollständiges, normiertes Orthogonalsystem, wenn sich jeder Vektor $|\varphi\rangle$ des betrachteten unitären Raums durch (634) darstellen läßt.

Bezüglich der vollständigen Orthonormalbasis $|v_k\rangle$ können wir den Zustandsvektor $|\varphi\rangle$ auch darstellen durch den Spaltenvektor

$$|\varphi\rangle \longrightarrow \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_m \\ \vdots \end{pmatrix} \quad , \tag{635}$$

dessen Elemente gerade die Projektionen von $|\varphi\rangle$ auf die Basiszustände $|v_k\rangle$ darstellen

$$\varphi_k = \langle v_k | \varphi\rangle \quad . \tag{636}$$

Wir wollen uns jetzt der Matrixdarstellung von Operatoren zuwenden. Hierzu betrachten wir zunächst das aus den beiden Vektoren $|u\rangle$ und $|v\rangle$ gebildete dyadische Produkt

$$|u\rangle \langle v| \quad . \tag{637}$$

Diese Größe ist im Gegensatz zum Skalarprodukt $\langle u| v\rangle$ ein Operator. Wir wenden das dyadische Produkt auf den Vektor $|\varphi\rangle$ an; dabei entsteht der Vektor $|\mathcal{X}\rangle$

$$|\varphi\rangle \stackrel{|u\rangle\langle v|}{\longrightarrow} |\mathcal{X}\rangle = |u\rangle \langle v| \varphi\rangle \quad . \tag{638}$$

Der neue Vektor $|\mathcal{X}\rangle$ ist also parallel zu $|u\rangle$ und unterscheidet sich von diesem durch den Zahlenfaktor $\langle v| \varphi\rangle$. Die Reihenfolge der Vektoren im dyadischen Produkt ist von wesentlicher Bedeutung, weil das dyadische Produkt $|v\rangle \langle u|$ im allgemeinen einen anderen Vektor

$$|\mathcal{X}'\rangle = |v\rangle \langle u| \varphi\rangle \tag{639}$$

ergibt. Betrachten wir nochmals die Zerlegung des Vektors $|\varphi\rangle$ nach dem Orthonormalsystem $|v_k\rangle$, also

$$|\varphi\rangle = \sum_k |v_k\rangle \langle v_k| \varphi\rangle = \left(\sum_k |v_k\rangle \langle v_k|\right) |\varphi\rangle \quad . \tag{640}$$

Wir erkennen, daß der Ausdruck in der Klammer wie der Einheitsoperator wirkt. Damit haben wir

$$1 = \sum_k |v_k\rangle \langle v_k| \quad . \tag{641}$$

Mit Hilfe dieses Einheitsoperators schreiben wir nun einen Operator $\hat{\mathcal{A}}$ als

$$\hat{\mathcal{A}} = 1\,\hat{\mathcal{A}}\,1 = \sum_{k,l} |v_k\rangle \left\langle v_k \left|\hat{\mathcal{A}}\right| v_l\right\rangle \langle v_l| \quad . \tag{642}$$

Dies ist die Matrixdarstellung des Operators $\hat{\mathcal{A}}$. Die Matrixelemente sind

$$A_{kl} = \left\langle v_k \left|\hat{\mathcal{A}}\right| v_l\right\rangle \quad . \tag{643}$$

In die Ortsdarstellung übersetzt haben wir

$$A_{kl} = \int v_k^*(x)\ \hat{\mathcal{A}}\, v_l(x)\ \mathrm{d}x \quad . \tag{644}$$

Für die Matrix $A$ des Operators $\hat{\mathcal{A}}$ haben wir

$$A = (A_{kl}) = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1l} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2l} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ A_{k1} & A_{k2} & \cdots & A_{kl} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \tag{645}$$

In diesem Zusammenhang definiert man unter der Spur des Operators $\hat{\mathcal{A}}$ die Summe der Diagonalelemente der zugehörigen Matrix $A$

$$\mathrm{Sp}\,\hat{\mathcal{A}} = \sum_k A_{kk} \quad . \tag{646}$$

Wir bilden durch den Operator $\hat{\mathcal{A}}$ den Zustand $|\varphi\rangle$ auf den Zustand $|\mathcal{X}\rangle$ ab,

$$\begin{aligned} |\mathcal{X}\rangle &= \hat{\mathcal{A}}\,|\varphi\rangle = \sum_k \hat{\mathcal{A}}\,|v_k\rangle\,\langle v_k|\,\varphi\rangle \\ &= \sum_k \hat{\mathcal{A}}\,|v_k\rangle\,\varphi_k \quad . \end{aligned} \tag{647}$$

entsprechend können wir für den Zustand $|\mathcal{X}\rangle$ schreiben

$$|\mathcal{X}\rangle = \sum_k |v_k\rangle\,\mathcal{X}_k \quad . \tag{648}$$

Wir projezieren mit $\langle v_l|$ und erhalten

$$\mathcal{X}_l = \sum_k \left\langle v_l \left|\hat{\mathcal{A}}\right| v_k \right\rangle \varphi_k = \sum_k A_{lk}\,\varphi_k \quad . \tag{649}$$

In Matrixschreibweise können wir dies darstellen als

$$\begin{pmatrix} \mathcal{X}_1 \\ \mathcal{X}_2 \\ \vdots \\ \mathcal{X}_l \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & & \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ & & \cdots & A_{lk} & \cdots \\ & & & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_k \\ \vdots \end{pmatrix} \quad . \tag{650}$$

Wir betrachten jetzt die Eigenwertgleichung

$$\hat{\mathcal{A}}\,|a\rangle = a\,|a\rangle \quad , \tag{651}$$

wobei $a$ der Eigenwert des Operators $\hat{\mathcal{A}}$ ist. $|a\rangle$ ist der Eigenzustand. Damit gilt auch

$$\sum_{k'} \left(\left\langle v_k \left|\hat{\mathcal{A}}\right| v_{k'} \right\rangle - a\,\delta_{kk'}\right) \langle v_k|\,a\rangle = 0 \quad \forall k \quad . \tag{652}$$

Mit

$$a_k = \langle v_k|\,a\rangle \tag{653}$$

können wir die Eigenwertgleichung in Matrixnotation darstellen.

$$\begin{pmatrix} (A_{11}-a) & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & (A_{22}-a) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad . \tag{654}$$

Wir hatten gezeigt, daß wir den ket-Zustand $|\varphi\rangle$ als Spaltenvektor auffassen können. Den bra-Zustand $\langle\varphi|$ müssen wir mit konjugiert-komplexen Komponenten schreiben

$$\langle\varphi| = \sum_k \langle\varphi\,|v_k\rangle\,\langle v_k| = \sum_k \langle\, v_k|\,\varphi\rangle^*\ \langle v_k| \tag{655}$$

Dies impliziert die Zuordnung

$$\langle\varphi| = (\varphi_1^*, \varphi_2^*, \ldots, \varphi_k^*, \ldots) \quad . \tag{656}$$

Für das Skalarprodukt zweier Hilbert-Vektoren gilt demnach

$$\langle\,\mathcal{X}|\,\varphi\rangle = \sum_k \langle\,\mathcal{X}|\,v_k\rangle\,\langle v_k|\,\varphi\rangle = \sum_k \mathcal{X}_k^*\varphi_k \tag{657}$$

oder

$$\langle\,\mathcal{X}|\,\varphi\rangle \longrightarrow (\mathcal{X}_1^*, \mathcal{X}_2^*, \ldots, \mathcal{X}_k^*, \ldots) \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_k \\ \vdots \end{pmatrix} \quad . \tag{658}$$

Für den adjungierten Operator galt die Bedingung

$$\left\langle\beta\left|\hat{\mathcal{A}}\right|\alpha\right\rangle = \left\langle\alpha\left|\hat{\mathcal{A}}^\dagger\right|\beta\right\rangle^* \quad . \tag{659}$$

Übersetzt in die Matrixschreibweise lautet dies

$$\left(A^\dagger\right)_{kl} = A_{lk}^* \quad . \tag{660}$$

Speziell für hermitesche Operatoren gilt also

$$A_{kl} = A_{lk}^* \tag{661}$$

Bei hermiteschen Matrizen entspricht die komplex-konjugierte und transponierte Matrix der Originalmatrix.
Das Produkt zweier Operatoren $\hat{\mathcal{A}}$ und $\hat{\mathcal{B}}$ entspricht der bekannten Matrixmultiplikation. Wir haben

$$\begin{aligned} (A\,B)_{ij} = \left\langle v_i\left|\hat{\mathcal{A}}\,\hat{\mathcal{B}}\right|v_j\right\rangle &= \\ \sum_k \left\langle v_i\left|\hat{\mathcal{A}}\right|v_k\right\rangle\left\langle v_k\left|\hat{\mathcal{B}}\right|v_j\right\rangle &= \sum_k A_{ik}B_{kj} \quad . \end{aligned} \tag{662}$$

Hierbei haben wir einen vollständigen Satz von Eigenzuständen eingeschoben.
Einen Spezialfall stellen die Matrizen unitärer Operatoren $\hat{\mathcal{U}}$ dar. Aufgrund von $\hat{\mathcal{U}}^\dagger = \hat{\mathcal{U}}^{-1}$ gilt für die Matrizen

$$\left(U^{-1}\right)_{lk} = U_{kl}^* \quad . \tag{663}$$

Wir können uns leicht klar machen, daß die Zeilen und Spalten einer unitären Matrix orthonormiert sind. In der klassischen Mechanik hatten wir orthogonale Transformationen behandelt

$$\vec{X}' = \hat{A}\vec{X} \quad , \tag{664}$$

wobei für die Matrixelemente $a_{ij}$ von $\hat{A}$ galt

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{3} a_{ik}\, a_{il} &= \delta_{kl} \quad , & (665) \\ \sum_{i=1}^{3} a_{ki}\, a_{li} &= \delta_{kl} \quad . & (666) \end{aligned}$$

Wir verallgemeinern jetzt diese Relation auf den unitären Vektorraum. Aus

$$\hat{\mathcal{U}}^\dagger \hat{\mathcal{U}} = 1 \tag{667}$$

bekommen wir

$$\sum_k \left(U^\dagger\right)_{ik} U_{kj} = \delta_{ij} \tag{668}$$

und weiter

$$\sum_k U^*_{ki}\, U_{kj} = \delta_{ij} \quad . \tag{669}$$

Ebenso können wir mit $\hat{\mathcal{U}}\,\hat{\mathcal{U}}^\dagger = 1$ verfahren.
Wählt man als Basis des Hilbert-Raums gerade den vollständigen Satz $|\alpha_n\rangle$ von Eigenzuständen des hermiteschen Operators $\hat{\mathcal{A}}$, dann hat die zugehörige Matrix $A$ Diagonalform, wobei in der Diagonalen gerade die Eigenwerte $a_n$ von $\hat{\mathcal{A}}$ stehen.

$$\hat{\mathcal{A}}\,|\alpha_n\rangle = a_n\,|\alpha_n\rangle \quad ; \tag{670}$$

hieraus folgt

$$\left\langle \alpha_m \left| \hat{\mathcal{A}} \right| \alpha_n \right\rangle = A_{mn} = a_n\,\delta_{nm} \quad , \tag{671}$$

d.h.

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & & & & \\ & a_2 & & 0 & \\ & & \ddots & & \\ & 0 & & a_n & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{672}$$

Es gibt stets eine unitäre Transformation, die eine Matrix $A$ auf die Diagonalgestalt (672) bringt. Dies erkennt man folgendermaßen:

$$\begin{aligned} a_i\,\delta_{ij} &= \left\langle \alpha_i \left| \hat{\mathcal{A}} \right| \alpha_j \right\rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle \alpha_i \,|\varphi_n \rangle \left\langle \varphi_n \left| \hat{\mathcal{A}} \right| \varphi_m \right\rangle \langle \varphi_m |\, \alpha_j \rangle \quad . \end{aligned} \tag{673}$$

$\left\langle \varphi_n \left| \hat{\mathcal{A}} \right| \varphi_m \right\rangle = A_{nm}$ ist das $(n, m)$-Matrixelement von $\hat{\mathcal{A}}$ in der $\varphi$-Basis. Wir definieren

$$U_{in} = \langle \alpha_i \left| \varphi_n \right\rangle \tag{674}$$

als das $(i, n)$-Element der Matrix $U$. Dann ist das $(m, j)$-Element der adjungierten Matrix $U^\dagger$

$$\langle \varphi_m | \, \alpha_j \rangle = \langle \alpha_j \left| \varphi_m \right\rangle^* = U^*_{jm} = \left( U^\dagger \right)_{mj} \quad . \tag{675}$$

Damit wird aus (674)

$$a_i \, \delta_{ij} = \sum_{n,m} U_{in} A_{nm} \left( U^\dagger \right)_{mj} = \bar{A}_{ij} \quad . \tag{676}$$

$A$ in der $\varphi$-Darstellung ist nichtdiagonal. Die unitäre Matrix $U$, die $A$ diagonalisiert, ist aus den Eigenfunktionen von $\hat{\mathcal{A}}$ aufgebaut. Nach (674) stehen in der $i$-ten Zeile die konjugiert-komplexen Komponenten des $i$-ten Eigenzustandes $|\alpha_i\rangle$ in der $\varphi$-Basis.
Als eine wichtige Operatoridentität wollen wir noch die Spektraldarstellung eines Operators angeben. Wir hatten den Operator $\hat{\mathcal{A}}$ mittels des dyadischen Produkts $|v_k\rangle \langle v_l|$ geschrieben als

$$\hat{\mathcal{A}} = \sum_{k,l} A_{kl} \, |v_k\rangle \langle v_l| \tag{677}$$

mit den Matrixelementen

$$A_{kl} = \left\langle v_k \left| \hat{\mathcal{A}} \right| v_l \right\rangle \quad . \tag{678}$$

Als spezielle Basis des Hilbert-Raums betrachten wir jetzt die Eigenzustände des Operators $\hat{\mathcal{A}}$ mit

$$\hat{\mathcal{A}} \, |\alpha_i\rangle = a_i \, |\alpha_i\rangle \quad . \tag{679}$$

Dann wird aus den Matrixelementen

$$A_{kl} = \left\langle \alpha_k \left| \hat{\mathcal{A}} \right| \alpha_l \right\rangle = a_l \, \delta_{kl} \quad , \tag{680}$$

und es resultiert für den Operator $\hat{\mathcal{A}}$ in (677)

$$\hat{\mathcal{A}} = \sum_{l} a_l \, |\alpha_l\rangle \langle \alpha_l| \quad . \tag{681}$$

Dies ist die Spektraldarstellung des Operators $\hat{\mathcal{A}}$.

## Vertauschbarkeit von Operatoren

Wir wollen nun zeigen, daß zwei Operatoren $\hat{\mathcal{L}}$ und $\hat{\mathcal{M}}$ vertauschbar sind, sofern sie ein gemeinsames System von Eigenfunktionen besitzen. Diese gemeinsamen Eigenfunktionen seien $\Psi_n\left(x\right)$. Wir haben dann

$$\hat{\mathcal{L}}\Psi_n = L_n\Psi_n \quad , \tag{682}$$

$$\hat{\mathcal{M}}\Psi_n = M_n\Psi_n \quad . \tag{683}$$

Wir multiplizieren (682) von links mit $\hat{\mathcal{M}}$ und (683) mit $\hat{\mathcal{L}}$,

$$\hat{\mathcal{M}}\hat{\mathcal{L}}\Psi_n = L_nM_n\Psi_n \quad , \tag{684}$$

$$\hat{\mathcal{L}}\hat{\mathcal{M}}\Psi_n = L_nM_n\Psi_n \quad . \tag{685}$$

Wir subtrahieren beide Gleichungen voneinander und erhalten

$$\left(\hat{\mathcal{M}}\hat{\mathcal{L}} - \hat{\mathcal{L}}\hat{\mathcal{M}}\right)\Psi_n = 0 \quad . \tag{686}$$

Wir haben gelernt, daß wir jede Funktion $\varphi$ nach den Basisfunktionen $\Psi_n\left(x\right)$ entwickeln können. Somit bekommen wir

$$\left(\hat{\mathcal{M}}\hat{\mathcal{L}} - \hat{\mathcal{L}}\hat{\mathcal{M}}\right)\varphi = \sum_n c_n\left(\hat{\mathcal{M}}\hat{\mathcal{L}} - \hat{\mathcal{L}}\hat{\mathcal{M}}\right)\Psi_n = 0 \quad . \tag{687}$$

Somit folgt auch allgemein

$$\hat{\mathcal{M}}\hat{\mathcal{L}} - \hat{\mathcal{L}}\hat{\mathcal{M}} = 0 \quad . \tag{688}$$

Wir wollen jetzt umgekehrt zeigen, daß die vertauschbaren Operatoren $\hat{\mathcal{L}}$ und $\hat{\mathcal{M}}$ auch gemeinsame Eigenfunktionen besitzen. Aus Einfachheitsgründen beschränken wir uns in der Beweisführung auf nichtentartete Systeme. Für entartete Systeme gilt die Schlußfolgerung jedoch gleichermaßen. Die Gleichung für die Eigenfunktionen des Operators $\hat{\mathcal{L}}$ lautet

$$\hat{\mathcal{L}}\Psi = L\Psi \quad . \tag{689}$$

Wir lassen auf diese Gleichung von links den Operator $\hat{\mathcal{M}}$ wirken und ändern die Reihenfolge $\hat{\mathcal{M}}\hat{\mathcal{L}}$ in $\hat{\mathcal{L}}\hat{\mathcal{M}}$ ab. Damit erhalten wir

$$\hat{\mathcal{L}}\left(\hat{\mathcal{M}}\Psi\right) = L\left(\hat{\mathcal{M}}\Psi\right) \quad . \tag{690}$$

Somit ist die Funktion

$$\Psi' = \hat{\mathcal{M}}\Psi \tag{691}$$

ebenfalls Eigenfunktion des Operators $\hat{\mathcal{L}}$, die zu dem gleichen Eigenwert $L$ gehört. Damit kann sich $\Psi'$ von $\Psi$ nur durch einen konstanten Faktor unterscheiden, d.h.

$$\Psi' = M\Psi \quad . \tag{692}$$

Wir haben daher

$$\hat{\mathcal{M}}\Psi = M\Psi \quad , \tag{693}$$

woraus folgt, daß $\Psi$ ebenfalls eine Eigenfunktion des Operators $\hat{\mathcal{M}}$ ist.

Damit in der Quantenmechanik nun Zustände bestehen, in denen zwei physikalische Meßgrößen $L$ und $M$ gleichzeitig eindeutig bestimmte Werte besitzen und somit gilt $\overline{\Delta L^2} = 0$ und $\overline{\Delta M^2} = 0$, ist es zwingend erforderlich, daß die Wellenfunktion eines solchen Zustandes eine gemeinsame Eigenfunktion der Operatoren $\hat{\mathcal{L}}$ und $\hat{\mathcal{M}}$ ist. Aber die Gleichungen

$$\hat{\mathcal{L}}\Psi_L = L\Psi_L \quad , \tag{694}$$

$$\hat{\mathcal{M}}\Psi_M = M\Psi_M \tag{695}$$

für die Eigenfunktionen der Operatoren $\hat{\mathcal{L}}$ und $\hat{\mathcal{M}}$ besitzen im allgemeinen verschiedene Lösungen, d.h. $\Psi_L \neq \Psi_M$. Daher wird in den Zuständen $\Psi_L$ mit einem bestimmten Wert von $L$ und damit $\overline{\Delta L^2} = 0$ die Größe $M$ keinen eindeutig fixierten Wert haben, d.h. $\overline{\Delta M^2} > 0$, und umgekehrt im Zustand $\Psi_M$ mit einem bestimmten Wert von $M$ die Größe $L$ keinen fixierten Wert haben. Nur in besonderen Fällen haben zwei Größen $L$ und $M$ gleichzeitig einen bestimmten Wert. Dazu muß $\Psi_M = \Psi_L$ sein. Das gemeinsame Eigenfunktionssystem bedingt aber die Vertauschbarkeit der assoziierten Operatoren $\hat{\mathcal{L}}$ und $\hat{\mathcal{M}}$. Es muß also für die gleichzeitige eindeutige Meßbarkeit der Größen $L$ und $M$ gelten

$$\hat{\mathcal{L}}\hat{\mathcal{M}} = \hat{\mathcal{M}}\hat{\mathcal{L}} \quad . \tag{696}$$

## Uneigentliche Vektoren

Die Theorie des Hilbert-Raums setzt voraus, daß die Zahl der Zustände höchstens abzählbar unendlich ist. Es muß Separabilität der Zustände gewährleistet sein. Dies gilt aber zum Beispiel für die kontinuierlichen Eigenzustände des Orts- und Impulsoperators sicherlich nicht. Schon bei der Diskussion der Ebenen Wellen hatten wir es mit nichtabzählbar unendlich vielen Zuständen zu tun, die auch nicht im üblichen Sinn auf 1 normiert wurden. Wir müssen hier eine Erweiterung des Hilbert-Raums suchen. Wenn die physikalische Größe $\alpha$ einen kontinuierlichen Wertevorrat durchläuft, macht die Indizierung mit $\alpha_j$ natürlich keinen Sinn.
Neben den eigentlichen Hilbert-Vektoren führt man uneigentliche Vektoren ein, die man auch als Dirac-Vektoren bezeichnet. Man führt hierbei Grenzwertprozesse durch. Die Herleitung des Fourier-Integrals aus der Fourier-Reihe ist ein Beispiel für den Grenzübergang von einer Zahlenfolge $\varphi_k$ zu einer kontinuierlichen Folge $\varphi(k)$. Wir gehen zunächst aus von einem diskreten Satz orthonormierter Hilbert-Raum-Vektoren $|\upsilon_{k,\Delta k}\rangle$, wobei $\Delta k$ den Abstand benachbarter $k$-Werte angibt. Den Übergang zu kontinuierlichem $k$ bilden wir im Skalarprodukt mit einem beliebigen, festen Hilbert-Raum-Vektor $|\varphi\rangle$ den Grenzwert

$$\lim_{\Delta k \to 0} \frac{\langle \upsilon_{k,\Delta k} | \, \varphi \rangle}{\sqrt{\Delta k}} = \varphi(k) \quad . \tag{697}$$

Den sich so ergebenden, komplexen Zahlenwert $\varphi(k)$ wollen wir als Skalarprodukt zwischen $|\varphi\rangle$ und einem formalen Vektor $\left|\upsilon_k^D\right\rangle$ auffassen, den wir einen Diracschen Vektor nennen

$$\varphi(k) = \left\langle \upsilon_k^D \middle| \, \varphi \right\rangle \tag{698}$$

mit

$$\left|\upsilon_k^D\right\rangle = \lim_{\Delta k \to 0} \frac{\left|\upsilon_{k,\Delta k}\right\rangle}{\sqrt{\Delta k}} \quad . \tag{699}$$

Damit erhalten wir für die Zerlegung von $|\varphi\rangle$

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= \lim_{\Delta k \to 0} \sum_k \left|\upsilon_{k,\Delta k}\right\rangle \left\langle \upsilon_{k,\Delta k}\right| \varphi\rangle \qquad (700) \\ &= \lim_{\Delta_k \to 0} \sum_k \left|\upsilon_k^D\right\rangle \left\langle \upsilon_k^D\right| \varphi\Big\rangle\, \Delta k \quad . \qquad (701) \end{aligned}$$

Hierfür kann man auch ein Integral über $k$ schreiben

$$|\varphi\rangle = \int \left|\upsilon_k^D\right\rangle \left\langle \upsilon_k^D\right| \varphi\Big\rangle\, \mathrm{d}k = \int \left|\upsilon_k^D\right\rangle \varphi\left(k\right) \mathrm{d}k \quad . \tag{702}$$

Wir multiplizieren diese Gleichung skalar mit $\left|\upsilon_{k'}^D\right\rangle$

$$\left\langle \upsilon_{k'}^D\right| \varphi\Big\rangle = \int \left\langle \upsilon_{k'}^D\right| \upsilon_k^D\Big\rangle \left\langle \upsilon_k^D\right| \varphi\Big\rangle\, \mathrm{d}k \quad . \tag{703}$$

Für die Diracschen Basisvektoren erhalten wir somit die Orthonormierungsbedingung

$$\left\langle \upsilon_k^D \middle| \upsilon_{k'}^D \right\rangle = \delta\left(k - k'\right) \quad . \tag{704}$$

Im folgenden fassen wir die Schreibweisen

$$|\varphi\rangle = \sum_k \left|\upsilon_k\right\rangle \varphi_k \tag{705}$$

und

$$|\varphi\rangle = \int \left|\upsilon_k^D\right\rangle \varphi\left(k\right) \mathrm{d}k \tag{706}$$

einheitlich zusammen in

$$|\varphi\rangle = \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_k \left|\upsilon_k\right\rangle \varphi\left(k\right) \mathrm{d}k \quad . \tag{707}$$

Entsprechend gilt für das Skalarprodukt

$$\langle\varphi\,|\chi\rangle \;=\; \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_k \varphi^*\left(k\right)\, \chi\left(k\right)\, \mathrm{d}k \;=\; \mathop{\sum\!\!\!\!\!\!\int}_k \langle\varphi\,|\upsilon_k\rangle \left\langle \upsilon_k\right| \chi\rangle\, \mathrm{d}k \tag{708}$$

# Die Unschärferelation

Wir hatten die mittlere quadratische Schwankung als Maß für die Streuung der Meßresultate um den Erwartungswert definiert

$$\Delta L = \left( \left\langle \Psi \left| \hat{\mathcal{L}}^2 \right| \Psi \right\rangle - \left\langle \Psi \left| \hat{\mathcal{L}} \right| \Psi \right\rangle^2 \right)^{1/2} \quad . \tag{709}$$

$\Delta L$ ist genau dann Null, wenn $\Psi$ Eigenzustand von $\hat{\mathcal{L}}$ ist, d.h.

$$\hat{\mathcal{L}}\Psi = L\Psi \quad . \tag{710}$$

Auf der rechten Seite von (709) steht dann

$$\left( L^2 - L^2 \right)^{1/2} = 0 \quad . \tag{711}$$

Für die weiteren Berechnungen benötigen wir die Schwarzsche Ungleichung für Vektoren $|\varphi\rangle$ und $|\chi\rangle$. Es gilt

$$\|\varphi\| \cdot \|\chi\| \geq |\langle \varphi \, | \chi \rangle| \tag{712}$$

mit der Norm eines Vektors

$$\|\varphi\| = \sqrt{\langle \varphi | \, \varphi \rangle} \quad . \tag{713}$$

Für das Skalarprodukt gilt stets

$$\langle \varphi \, | \varphi \rangle \geq 0 \quad . \tag{714}$$

In der reellen Vektorrechnung ist die Schwarzsche Ungleichung stets erfüllt, da für zwei Vektoren gilt

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = A \cdot B \cos \Theta \quad , \tag{715}$$

wobei $\Theta$ der Zwischenwinkel zwischen den Vektoren $\vec{A}$ und $\vec{B}$ ist. Mit $\left\|\vec{A}\right\| = A$ und $\left\|\vec{B}\right\| = B$ haben wir

$$\left\|\vec{A}\right\| \left\|\vec{B}\right\| \geq \left|\vec{A} \cdot \vec{B}\right| = |A \cdot B \cos \Theta| \quad . \tag{716}$$

Da $|\cos \Theta| \leq 1$ ist (716) stets erfüllt. Die Schwarzsche Ungleichung läßt sich aber auch im unitären Vektorraum leicht verifizieren. Wir gehen aus von den beiden Vektoren $|\varphi\rangle$ und $|\chi\rangle$. Den Vektor $|\chi\rangle$ zerlegen wir in eine Komponente parallel zu $|\varphi\rangle$ und in eine Komponente $|\sigma\rangle$ senkrecht zu $|\varphi\rangle$ mit

$$\langle \varphi | \, \sigma \rangle = 0. \tag{717}$$

Projizieren wir in der reellen Vektorrechnung den Vektor $\vec{k}$ auf den Ortsvektor $\vec{r}$, so können wir für die Komponente von $\vec{k}$ parallel zu $\vec{r}$ schreiben

$$\vec{k}_{\|} = \frac{\left(\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \vec{r}}{r^2} = \frac{\left(\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \vec{r}}{\|\vec{r}\,\|^2} \quad . \tag{718}$$

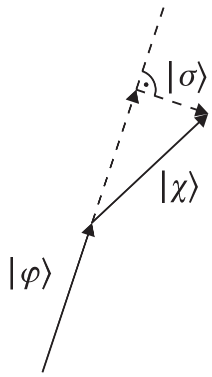


Abbildung 12:

Genauso haben wir im unitären Vektorraum für die zu $|\varphi\rangle$ parallele Komponente von $|\chi\rangle$

$$|\chi\rangle_{\|} = \frac{\|\varphi\rangle \langle \varphi | \chi\rangle}{\|\varphi\|^2} \quad , \tag{719}$$

also insgesamt

$$|\chi\rangle = \frac{\|\varphi\rangle \langle \varphi | \chi\rangle}{\|\varphi\|^2} + |\sigma\rangle \quad . \tag{720}$$

Jetzt betrachten wir $\langle \chi | \chi\rangle$, und es ergibt sich

$$\langle \chi | \chi\rangle = \|\chi\|^2 = \frac{|\langle \varphi | \chi\rangle|^2}{\|\varphi\|^2} + \|\sigma\|^2 \quad . \tag{721}$$

Daraus folgt durch Multiplikation mit $\|\varphi\|^2$ sofort die Schwarzsche Ungleichung (712). Das Gleichheitszeichen gilt nur dann falls $|\sigma\rangle = 0$, falls also $|\chi\rangle$ und $|\varphi\rangle$ parallel sind, $|\chi\rangle = \alpha |\varphi\rangle$. Die Schwarzsche Ungleichung werden wir bei der Ableitung der Heisenbergschen Unschärferelation benötigen.
Wir betrachten zunächst nochmals die Streuung einer Observablen $L$ bei mehrfacher Durchführung einer Messung um den Mittelwert $\left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle$. Die Streuung von $L$ definieren wir als Erwartungswert der quadratischen Abweichung von $\left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle$, also als Erwartungswert des Operators $\left(\hat{\mathcal{L}} - \left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle\right)^2$ im Zustand $|\Psi\rangle$. Damit haben wir

$$(\Delta L)^2 = \left\langle \Psi \left| \left(\hat{\mathcal{L}} - \left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle\right)^2 \right| \Psi \right\rangle \quad . \tag{722}$$

Es resultiert

$$(\Delta L)^2 = \left\langle \Psi \left| \hat{\mathcal{L}}^2 \right| \Psi \right\rangle - \left\langle \Psi \left| \hat{\mathcal{L}} \right| \Psi \right\rangle^2 \quad . \tag{723}$$

Wenn $\hat{\mathcal{L}}$ hermitesch ist, ist auch $\hat{\mathcal{L}} - \left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle$ hermitesch. Damit können wir ausgehend von (722) schreiben

$$\left\langle \Psi \left| \left(\hat{\mathcal{L}} - \left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle\right)^2 \right| \Psi \right\rangle = \left\langle \left(\hat{\mathcal{L}} - \left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle\right) \Psi \right| \left(\hat{\mathcal{L}} - \left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle\right) \psi \right\rangle \tag{724}$$

und daher

$$(\Delta L)^2 = \left\| \left(\hat{\mathcal{L}} - \left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle\right) \Psi \right\|^2 \geq 0 \quad . \tag{725}$$

Die Unschärfe

$$\Delta L = \sqrt{(\Delta L)^2} \tag{726}$$

ist also gerade die Länge des Vektors $\left|\left(\hat{\mathcal{L}} - \left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle\right) \Psi\right\rangle$,

$$\Delta L = \left\| \left(\hat{\mathcal{L}} - \left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle\right) \Psi \right\| \geq 0 \quad . \tag{727}$$

In dieser Operatornotation müssen wir hinter dem Erwartunswert $\left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle$ stets den Einheitsoperator **1** verstehen. Der Einheitsoperator wird nicht explizit aufgeführt.
Wir wenden uns jetzt der Ableitung der Unschärferelation zu. Sind zwei Observable nicht miteinander verträglich, d.h. ihre Operatoren $\hat{\mathcal{F}}$ und $\hat{\mathcal{G}}$ sind nicht vertauschbar, so existiert im allgemeinen kein Zustand, für den die Streuung $(\Delta F)^2$ und $(\Delta G)^2$ gleichzeitig Null ist. Es muß also eine Beziehung zwischen den Unschärfen $\Delta F$ und $\Delta G$ bestehen, die das gleichzeitige Verschwinden von $\Delta F \; \Delta G$ ausschließt. Dies ist die Heisenbergsche Unschärferelation.
Wir betrachten die Streuung der Operatoren $\hat{\mathcal{F}}$ und $\hat{\mathcal{G}}$, die durch die hermiteschen Operatoren

$$\hat{f} = \hat{\mathcal{F}} - \left\langle \hat{\mathcal{F}} \right\rangle \quad , \tag{728}$$

$$\hat{g} = \hat{\mathcal{G}} - \left\langle \hat{\mathcal{G}} \right\rangle \tag{729}$$

gegeben ist durch

$$(\Delta F)^2 = \left\| \hat{f}\Psi \right\|^2 \quad , \tag{730}$$

$$(\Delta G)^2 = \left\| \hat{g}\Psi \right\|^2 \quad . \tag{731}$$

Wir wenden nun die Schwarzsche Ungleichung auf (731) an

$$\begin{aligned}
(\Delta F) \cdot (\Delta G) &= \left\| \hat{f}\Psi \right\|^2 \cdot \left\| \hat{g}\Psi \right\|^2 \geq \left| \left\langle \hat{f}\Psi \left| \hat{g}\Psi \right. \right\rangle \right|^2 \\
&= \left\langle \hat{f}\Psi \middle| \hat{g}\Psi \right\rangle \left\langle \hat{g}\Psi \middle| \hat{f}\Psi \right\rangle = \left\langle \Psi \middle| \hat{f}\hat{g}\Psi \right\rangle \left\langle \Psi \middle| \hat{g}\hat{f}\Psi \right\rangle \\
&\equiv \left\langle \hat{f}\hat{g} \right\rangle \left\langle \hat{g}\hat{f} \right\rangle \quad .
\end{aligned} \tag{732}$$

Wir zerlegen nun das Produkt der hermiteschen Operatoren in einen Antikommutator- und in einen Kommutatoranteil in der folgenden Form

$$\hat{f}\hat{g} = \frac{\hat{f}\hat{g} + \hat{g}\hat{f}}{2} + i\frac{\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}}{2i} \quad , \tag{733}$$

$$\hat{g}\hat{f} = \frac{\hat{f}\hat{g} + \hat{g}\hat{f}}{2} - i\frac{\hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f}}{2i} \quad . \tag{734}$$

Damit bekommen wir aus der Ungleichung (732)

$$(\Delta F)^2 \cdot (\Delta G)^2 \geq \left( \frac{\left\langle \hat{f}\hat{g} + \hat{g}\hat{f} \right\rangle}{2} \right)^2 + \left( \frac{\left\langle \hat{f}\hat{g} - \hat{g}\hat{f} \right\rangle}{2i} \right)^2 \quad . \tag{735}$$

Wir setzen jetzt die Definition von $\hat{f}$ und $\hat{g}$ ein. Es folgt

$$\begin{aligned}
\left\langle \hat{f}\hat{g} \right\rangle &= \left\langle \left(\hat{\mathcal{F}} - \left\langle \hat{\mathcal{F}} \right\rangle\right) \left(\hat{\mathcal{G}} - \left\langle \hat{\mathcal{G}} \right\rangle\right) \right\rangle \\
&= \left\langle \hat{\mathcal{F}}\hat{\mathcal{G}} \right\rangle - \left\langle \hat{\mathcal{F}} \right\rangle \left\langle \hat{\mathcal{G}} \right\rangle \quad .
\end{aligned} \tag{736}$$

Damit wird aus (735)

$$(\Delta F)^2 \cdot (\Delta G)^2 \geq \left( \frac{\left\langle \hat{\mathcal{F}}\hat{\mathcal{G}} + \hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{F}} \right\rangle}{2} - \left\langle \hat{\mathcal{F}} \right\rangle \left\langle \hat{\mathcal{G}} \right\rangle \right)^2 + \left( \frac{\left\langle \hat{\mathcal{F}}\hat{\mathcal{G}} - \hat{\mathcal{G}}\hat{\mathcal{F}} \right\rangle}{2i} \right)^2 \quad . \tag{737}$$

Der erste Term auf der rechten Seite ist quadratisch und damit positiv definit. Wir lassen diesen Term weg und erhalten damit als untere Schranke für das Produkt $\Delta F \cdot \Delta G$

$$\Delta F \cdot \Delta G \geq \left| \frac{1}{2i} \left\langle \left[ \hat{\mathcal{F}}, \hat{\mathcal{G}} \right] \right\rangle \right| \quad . \tag{738}$$

Dies ist die Unschärferelation. Auf der rechten Seite steht der Erwartungswert des Kommutators zwischen $\hat{\mathcal{F}}$ und $\hat{\mathcal{G}}$.
Als Beispiel betrachten wir jetzt $\hat{\mathcal{F}} = \hat{p}_i$ und $\hat{\mathcal{G}} = \hat{x}_k$. Mit

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_k] = -i\hbar\, \delta_{ik} \tag{739}$$

folgt für die Unschärferelation

$$\Delta p_i \cdot \Delta x_k \geq \frac{\hbar}{2}\, \delta_{ik} \quad . \tag{740}$$

Mit $\hat{\mathcal{F}} = \hat{\mathcal{F}}\left(\hat{x}_1, \ldots, \hat{p}_1, \ldots\right)$ und den Kommutatoren

$$\left[ \hat{\mathcal{F}}, \hat{x}_k \right] = -i\hbar\, \frac{\partial \hat{\mathcal{F}}}{\partial \hat{p}_k} \quad , \tag{741}$$

$$\left[ \hat{\mathcal{F}}, \hat{p}_k \right] = +i\hbar\, \frac{\partial \hat{\mathcal{F}}}{\partial \hat{x}_k} \tag{742}$$

folgen die erweiterten Unschärferelationen

$$\Delta F \cdot \Delta x_i \geq \frac{\hbar}{2} \left| \left\langle \frac{\partial \hat{\mathcal{F}}}{\partial \hat{p}_i} \right\rangle \right| \quad , \tag{743}$$

$$\Delta F \cdot \Delta p_i \geq \frac{\hbar}{2} \left| \left\langle \frac{\partial \hat{\mathcal{F}}}{\partial \hat{x}_i} \right\rangle \right| \quad . \tag{744}$$

Aus der Drehimpulsvertauschungsrelation

$$\left[ \hat{\mathcal{L}}_1, \hat{\mathcal{L}}_2 \right] = i\hbar \hat{\mathcal{L}}_3 \tag{745}$$

resultiert als Unschärferelation

$$\Delta L_1 \cdot \Delta L_2 \geq \frac{\hbar}{2} \left| \left\langle \hat{\mathcal{L}}_3 \right\rangle \right| \quad . \tag{746}$$

Ist $\Psi$ Eigenzustand von $\hat{\mathcal{L}}_3$ mit dem Eigenwert $L_3 = \hbar m$, so folgt speziell

$$\Delta L_1 \cdot \Delta L_2 \geq \frac{1}{2}\hbar^2 m \quad . \tag{747}$$

Das Produkt der Unschärfe einer Energiemessung und einer Zeitmessung, also $\Delta E \cdot \Delta t$, bedarf einer gesonderten Betrachtung und wird später nachgeholt.

# Vorbemerkungen zum Meßprozeß in der Quantenmechanik

Die Quantenmechanik verstehen zu wollen, bedeutet für den Studenten sich zunächst vertraut zu machen mit der Mathematik des Operatorkalküls und den Lösungen der Schrödinger-Differentialgleichung. Ferner gibt es drei Grundphänomene, die angesichts unseres, nach klassischen Gesichtspunkten geprägten Vorstellungsvermögens gewöhnungsbedürftig erscheinen und einer ausführlichen Diskussion bedürfen.
Wir hatten bereits die Interferenzfähigkeit quantenmechanischer Prozesse behandelt. Beim Doppelspaltexperiment hatten wir erkannt, daß die Intensitätsverteilung der Elektronen auf dem Schirm im Fall von zwei Öffnungen nicht mit der Summe der Intensitätsverteilungen übereinstimmt, die wir messen können, wenn wir jeweils eine der beiden Öffnungen schließen. Die Intensitätsverteilung resultiert als Absolutbetragsquadrat einer komplexwertigen Amplitude, die aber selbst nicht beobachtbar ist. Wir haben hier

$$I_{12} = |\Psi_1 + \Psi_2|^2 \neq I_1 + I_2 = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 \quad . \tag{748}$$

Beim Doppelspaltexperiment gab es zusätzliche Strukturen bei der Intensitätsverteilung $I_{12}$, die aus den Interferenzen der beiden Möglichkeiten für die Elektronen beim Durchgang durch die beiden Spalten folgen. Dies ist ein typisches Phänomen für eine wellenmechanische Erscheinung.
Die zweite ungewohnte Denkvorstellung ist in der Unverträglichkeit der gleichzeitigen Messung zweier Größen begründet, sofern die assoziierten Operatoren nicht miteinander kommutieren. Entsprechend der Unschärferelation können beispielsweise Ort und Impuls nicht gleichzeitig mit beliebiger Genauigkeit gemessen werden. Für das Produkt der Unschärfen gibt es eine Untergrenze, die prinzipiell nicht unterschritten werden kann. Im Rahmen der klassischen Physik können wir die Position und die Geschwindigkeit eines Planeten auf seiner Umlaufbahn im Prinzip beliebig genau messen, indem wir beispielsweise das vom Planeten emittierte Licht vermessen. Aber auch hierbei müßten wir streng genommen die Strahlungsrückwirkung des Lichtes auf den Planeten in Rechnung stellen, die in der klassischen Physik vernachlässigt wird. Wollen wir den Ort und den Impuls eines Elektrons präzise bestimmen, müssen wir im Rahmen des Meßprozesses beispielsweise das Elektron mit Photonen bestrahlen. Dadurch ändert sich aber automatisch Ort bzw. Impuls des betrachteten Teilchens. In der Quantenmechanik kann der Meßprozeß nicht mehr unabhängig von den Teilcheneigenschaften betrachtet werden. Das quantenmechanische Teilchen und der Meßprozeß bilden vielmehr eine Einheit, die Separierbarkeit kann nicht mehr gewährleistet werden.
Ein drittes neuartiges Phänomen liegt im Tunnelprozeß begründet, der später noch ausführlich behandelt werden muß. Betrachten wir beispielsweise einen doppelten Potentialtopf und setzen zum Zeitpunkt $t = 0$ in die linke Potentialmulde.
Die Energie $E_1$ des Elektrons sei kleiner als die Potentialhöhe $V_m$ des Potentialberges in der Mitte. Zum Zeitpunkt t=0 soll sich das Elektron mit der Wahrscheinlichkeit $w\,(t = 0) = 1$ im linken Potentialtopf befinden. Im Rahmen der klassischen Physik wird sich, da $V_m > E_1$ gilt, das Elektron mit $w = 1$ im linken Potentialtopf befinden, da der Potentialberg nicht überwunden werden kann. Im Rahmen der Quantenmechanik werden wir aber feststellen, daß für $t > 0$ folgt, daß auch für den rechten Potentialtopf gilt $w\,(t > 0) \neq 0$. Das Elektron kann den Potentialberg durchtunneln.
Es gibt weitere essentielle Phänomene, die die Quantenphysik grundlegend von der klassischen Physik unterscheiden. Gerade diese gravierenden Unterschiede zu klassischen Vorstellungsweisen

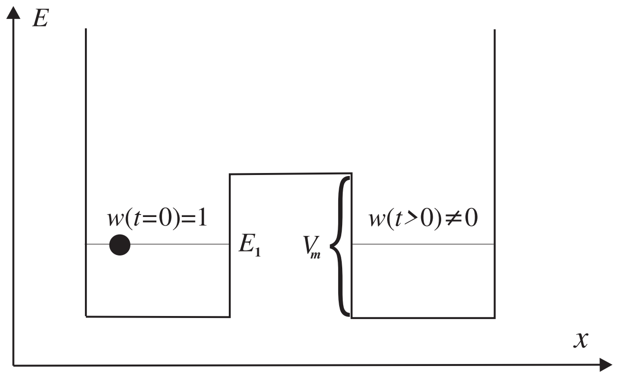


Abbildung 13: Doppelter Potentialtopf

bedürfen einer ausführlichen Diskussion.

# Projektionsoperatoren

Projiziert man einen beliebigen Vektor $|\varphi\rangle$ auf einen vorgegebenen Einheitsvektor $|u\rangle$ mit $\|u\| = 1$, so entsteht in Richtung von $|u\rangle$ der Vektor $|u\rangle\langle u|\varphi\rangle$. Diese Zuordnung von Vektoren wird durch den Projektionsoperator $\hat{\mathcal{P}}_u$ bewirkt. Es ist

$$\hat{\mathcal{P}}_u |\varphi\rangle = |u\rangle \langle u |\varphi\rangle \quad , \tag{749}$$

also

$$\hat{\mathcal{P}}_u = |u\rangle \langle u| \quad . \tag{750}$$

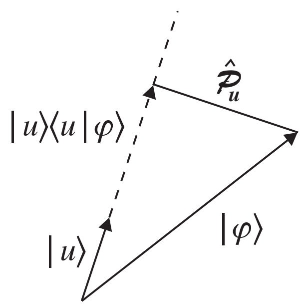


Abbildung 14: Zweidimensionale Veranschaulichung der Wirkung des Projektionsoperators $\hat{\mathcal{P}}_u$

Dieser lineare Operator ist idempotent, d.h. er hat die Eigenschaft

$$\hat{\mathcal{P}}_u^2 = \hat{\mathcal{P}}_u \quad . \tag{751}$$

Wir erkennen dies folgendermaßen

$$\hat{\mathcal{P}}_u^2 \;=\; \hat{\mathcal{P}}_u |u\rangle \langle u| = |u\rangle \langle u |u\rangle \langle u| = |u\rangle \langle u| \;=\; \hat{\mathcal{P}}_u \quad . \tag{752}$$

Für orthogonale Vektoren $|u_1\rangle$ und $|u_2\rangle$ ist sofort einsichtig, daß folgt

$$\hat{\mathcal{P}}_{u_1}\hat{\mathcal{P}}_{u_2} = 0 \quad . \tag{753}$$

Zusammenfassend haben wir damit

$$\hat{\mathcal{P}}_{u_i}\hat{\mathcal{P}}_{u_k} = \delta_{ik}\hat{\mathcal{P}}_{u_i} \quad . \tag{754}$$

Der Projektionsoperator $\hat{\mathcal{P}}_u$ ist ferner hermitesch, denn es gilt

$$\left\langle \chi \middle| \hat{\mathcal{P}}_u \varphi \right\rangle \;=\; \langle \chi | u\rangle \langle u |\varphi\rangle = \langle \varphi | u\rangle^* \langle u |\chi\rangle^* \tag{755}$$

$$\;=\; \left\langle \varphi \middle| \hat{\mathcal{P}}_u \chi \right\rangle^* = \left\langle \hat{\mathcal{P}}_u \chi \middle| \varphi \right\rangle \quad . \tag{756}$$

Die Matrixelemente von $\hat{\mathcal{P}}_u$ in einer Basis $|\upsilon_k\rangle$ lauten

$$\left\langle \upsilon_{k'} \middle| \hat{\mathcal{P}}_u \upsilon_k \right\rangle = \langle \upsilon_{k'} | u\rangle \langle u |\upsilon_k\rangle = u(k')\, u^*(k) \quad . \tag{757}$$

Die Normierung $\|u\| = 1$ impliziert, daß ferner gilt

$$\mathrm{Sp}\hat{\mathcal{P}}_u = 1 \quad . \tag{758}$$

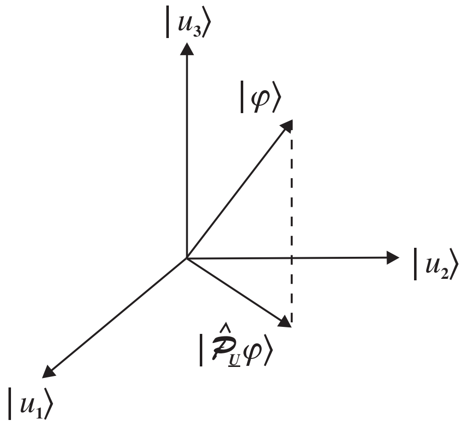


Abbildung 15: Projektion des Vektors $|\varphi\rangle$ auf den aus $|u_1\rangle$ und $|u_2\rangle$ aufgespannten Unterraum $\underline{U}$.

Wir können nicht nur auf den Vektor $|u\rangle$ als eine spezielle Untermenge des betrachteten unitären Raums projizieren, sondern auch auf einen Unterraum $\underline{U}$, der durch die orthonormierten Vektoren $|u_\alpha\rangle$ aufgespannt wird.
In diesem Fall lautet der Projektionsoperator

$$\hat{\mathcal{P}}_{\underline{U}} = \sum\!\!\!\!\!\!\int_{\alpha} |u_\alpha\rangle \langle u_\alpha| \, \mathrm{d}\alpha \quad . \tag{759}$$

Dieser Projektionsoperator $\hat{\mathcal{P}}_{\underline{U}}$ ist wieder hermitesch und idempotent.
Die Eigenwertgleichung eines Projektionsoperators $\hat{\mathcal{P}}_u$, der auf den Einheitsvektor $|u\rangle$ projiziert, hat die einfache Gestalt

$$\hat{\mathcal{P}}_u \, |u_L\rangle \equiv |u\rangle \langle u \, |u_L\rangle = L \, |u_L\rangle \quad . \tag{760}$$

Hieraus folgt, daß ein Eigenvektor die Richtung von $|u\rangle$ hat, und der zugehörige Eigenwert ist 1,

$$L = 1 \tag{761}$$

für

$$|u_L\rangle = |u\rangle \quad . \tag{762}$$

Die anderen Eigenvektoren stehen alle senkrecht auf $|u\rangle$ und gehören zum entarteten Eigenwert 0,

$$L = 0 \tag{763}$$

für

$$\langle u \, |u_L\rangle = 0 \quad . \tag{764}$$

# Der Produktraum

Bei vielen physikalischen Problemen besteht das betrachtete System aus Teilsystemen, zwischen denen eine Wechselwirkung herrscht. Hier ist es oftmals zweckmäßig von den unitären Räumen $U_1$, $U_2$,... der unabhängigen Teilsysteme auszugehen und aus diesen den unitären Raum $U$ des zusammengesetzten Systems aufzubauen.
Wir betrachten die Vektoren $|\varphi_1\rangle$ und $|\varphi_2\rangle$ aus dem unitären Raum $U_1$ bzw. $U_2$. Wir bilden formal das Produkt, das kommutativ sein soll,

$$|\varphi_1\varphi_2\rangle \equiv |\varphi_1\rangle\,|\varphi_2\rangle = |\varphi_2\rangle\,|\varphi_1\rangle \quad . \tag{765}$$

Dieses direkte Produkt ist wieder ein Vektor. Dieser Vektor $|\varphi_1\varphi_2\rangle$ liegt aber weder in $U_1$ noch in $U_2$, sondern im Produktraum

$$U = U_1 \times U_2 \quad . \tag{766}$$

Aus der Distributivität

$$|\varphi_1\rangle = a\,|u_1\rangle + b\,|v_1\rangle \tag{767}$$

in $U_1$ soll folgen

$$|\varphi_1\varphi_2\rangle = a\,|u_1\varphi_2\rangle + b\,|v_1\varphi_2\rangle \quad . \tag{768}$$

Unter dem Skalarprodukt zwischen zwei Vektoren $|\varphi_1\varphi_2\rangle$ und $|\chi_1\chi_2\rangle$ verstehen wir den Ausdruck

$$\langle\varphi_1\varphi_2\,|\chi_1\chi_2\,\rangle = \langle\varphi_1\,|\chi_1\,\rangle\,\langle\varphi_2\,|\chi_2\,\rangle \quad . \tag{769}$$

Dies ist das Produkt der Skalarprodukte in den Räumen $U_1$ und $U_2$. Mit der Vollständigkeit der Basisvektoren $|\upsilon_{k,1}\rangle$ und $|\upsilon_{l,2}\rangle$ von $U_1$ und $U_2$ sind auch die $|\upsilon_{k,1}\upsilon_{l,2}\rangle$ vollständig in $U$, d.h.

$$\sum\!\!\!\!\!\!\int_k \sum\!\!\!\!\!\!\int_l |\upsilon_{k,1}\upsilon_{l,2}\rangle\,\langle\upsilon_{k,1}\upsilon_{l,2}|\,\mathrm{d}k\,\mathrm{d}l = 1 \quad . \tag{770}$$

Ein beliebiger Vektor $|\varphi\rangle$ aus $U$ hat demnach die Zerlegung

$$|\varphi\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k \sum\!\!\!\!\!\!\int_l |\upsilon_{k,1}\upsilon_{l,2}\rangle\,\varphi\,(k,l)\,\mathrm{d}k\,\mathrm{d}l \tag{771}$$

mit

$$\varphi\,(k,l) = \langle\,\upsilon_{k,1}\upsilon_{l,2}|\,\varphi\rangle \quad . \tag{772}$$

Schließlich sei noch darauf hingewiesen, daß die Konstruktion eines allgemeinen Produktraums

$$U = U_1 \times U_1 \times U_3 \times \cdots U_N \tag{773}$$

aus mehreren unitären Räumen $U_1$, $U_2$,. . . ,$U_N$ in völlig analoger Weise mittels der Vektoren

$$|\varphi_1\varphi_2\ldots\varphi_N\rangle \equiv |\varphi_1\rangle\,|\varphi_2\rangle\cdots|\varphi_N\rangle \tag{774}$$

möglich ist.

Das bisher erarbeitete Operatorkalkül läßt sich natürlich gleichermaßen in den Produktraum übertragen. Ist der Operator $\hat{\mathcal{L}}_1$ nur im Raum $U_1$ definiert mittels

$$\hat{\mathcal{L}}_1 \left|\varphi_1\right\rangle = \left|\chi_1\right\rangle \quad , \tag{775}$$

so haben wir im Produktraum

$$\hat{\mathcal{L}}_1 \left|\varphi_1\varphi_2\right\rangle = \left|\chi_1\varphi_2\right\rangle \quad . \tag{776}$$

Das Produkt zweier Operatoren $\hat{\mathcal{L}}_1$ und $\hat{\mathcal{M}}_2$, die jeweils unabhängig voneinander in $U_1$ für $\hat{\mathcal{L}}_1$ bzw. $U_2$ für $\hat{\mathcal{M}}_2$ wirken, ist unabhängig von der Reihenfolge der Operatoren, d.h.

$$\left[\hat{\mathcal{L}}_1, \hat{\mathcal{M}}_2\right] = 0 \quad . \tag{777}$$

# Zum Meßprozeß

Die ursprüngliche Fragestellung in der Anfangsphase der Quantenmechanik, ob das Elektron ein klassisches Korpuskel oder eine Welle sei, konnte nicht eindeutig beantwortet werden. Vielmehr entscheidet erst der Meßprozeß, ob sich ein Elektron unter gegebenen physikalischen Randbedingungen mehr wie ein Korpuskel oder wie eine Welle verhält. Die Frage nach der eigentlichen Natur des Elektrons ist physikalisch nicht angebracht. Aufgabe der theoretischen Physik ist es hingegen, bei einem vorliegenden Meßprozeß Vorhersagen für die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten eines gewissen Meßergebnisses zu machen. Elektronen und Photonen sind weder klassische Teilchen noch Wellen, sondern sie verhalten sich bei bestimmten Experimenten so, als ob sie makroskopische Teilchen wären, während sie sich in anderen Versuchsanordnungen wie makroskopische Wellen äußern. Dabei wirkt die Meßapparatur jeweils als Projektor von der Quantenwelt in die klassische Physik. Fragen über die Natur des Elektrons an sich, d.h. unabhängig von der Meßapparatur, sind experimentell prinzipiell nicht entscheidbar und daher physikalisch sinnlos. Stets müssen wir im Meßprozeß die Wechselwirkung zwischen dem Meßobjekt und der Meßapparatur in Rechnung stellen. Bei der Messung an mikroskopischen Objekten ist es also prinzipiell nicht möglich, vom Einfluß der Meßapparatur zu abstrahieren. Eine beobachtete Größe resultiert aus einer Beziehung zwischen Objekt und Meßapparatur. Mit dem Begriff einer physikalischen Observablen ist also letztlich stets eine diese Größe messende Apparatur verknüpft.
Wir haben gelernt: Die Observablen $L$ eines physikalischen Systems werden beschrieben durch hermitesche Operatoren $\hat{\mathcal{L}} = \hat{\mathcal{L}}^\dagger$ in einem unitären Raum $U$.
Man kann durch eine Messung $P_L$ entscheiden, ob von einer Observablen $\mathcal{L}$ ein vorgegebner Wert $L$ eingenommen wird. Die Messung der Observablen $P_L$ liefert nur Ja-Nein-Aussagen, denen wir die Meßwerte 1 oder 0 zuordnen. Diese Observable wird quantentheoretisch durch den Projektionsoperator $\hat{\mathcal{P}}_L = \left|u_L\right\rangle \left\langle u_L\right|$ auf den zum Eigenwert $L$ gehörenden Eigenvektor $\left|u_L\right\rangle$ des Operators $\hat{\mathcal{L}}$ beschrieben. Es gilt

$$\hat{\mathcal{P}}_L \left|u_{L'}\right\rangle = \delta_{LL'} \left|u_{L'}\right\rangle \tag{778}$$

Die Zuordnung einer Observablen zu einem quantenmechanischen Operator ist nicht eindeutig. Führt man nämlich an hermiteschen Operatoren $\hat{\mathcal{L}}$ eine unitäre Transformation $\hat{\mathcal{U}}$ mit

$$\hat{\mathcal{U}}^\dagger = \hat{\mathcal{U}}^{-1} \tag{779}$$

aus,

$$\hat{\mathcal{L}} \quad \longrightarrow \quad \hat{\mathcal{L}}' = \hat{\mathcal{U}}\,\hat{\mathcal{L}}\hat{\mathcal{U}}^\dagger \quad , \tag{780}$$

so erhält man einen neuen Satz von Operatoren $\hat{\mathcal{L}}'$, die wieder hermitesch sind, dieselben Eigenwerte wie $\hat{\mathcal{L}}$ besitzen und die gleichen Kommutatoreigenschaften besitzen. Die Gesamtheit der die quantentheoretischen Observablen beschreibenden hermiteschen Operatoren ist also nur bis auf eine Unitär-Äquivalenz festgelegt.
Aus der Diskussion der Unschärferelation wissen wir, daß für die gleichzeitige Bestimmung gewisser Größen eine endliche Genauigkeitsgrenze existiert, die prinzipiell nicht unterschritten werden kann. So kann beispielsweise die Genauigkeit der Impulsmessung nicht gesteigert werden, sofern man nicht gleichzeitig eine Verringerung der Ortskenntnis in Kauf nehmen will.
Auch der Meßprozeß an sich kann als Projektion verstanden werden. Den Zustand eines quantenmechanischen Systems beschreiben wir durch den Hilbert-Vektor $|\psi\rangle$, den Zustandsvektor, in einem unitären Raum. $|\psi\rangle$ enthält alle Informationen über das betrachtete System. Wir können im folgenden von einem normierten Zustandsvektor ausgehen,

$$\|\psi\| = 1 \quad . \tag{781}$$

Der Zustand eines quantenmechanischen Systems wird durch diesen Einheitsvektor $|\psi\rangle$ im unitären Raum völlig beschrieben.
Eine Observable ist eine physikalische Größe, für die wir zumindest im Prinzip eine Meßapparatur realisieren können. Diesem Meßprozeß ordnen wir von der theoretischen Beschreibung her einen linearen, hermiteschen Operator, $\hat{\mathcal{L}} = \hat{\mathcal{L}}^\dagger$, zu. Führt man an dem System die Messung einer Observablen $\mathcal{L}$ sehr oft aus, und ist vor jeder Messung das System immer im gleichen Zustand $|\psi\rangle$, so ist der Mittelwert der Meßergebnisse, der Erwartungswert, gegeben durch

$$\left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle = \left\langle \psi \left| \hat{\mathcal{L}}\psi \right.\right\rangle \quad . \tag{782}$$

Mit dem Projektionsoperator oder auch dem statistischen Operator

$$\hat{\mathcal{P}}_\psi \equiv |\psi\rangle\,\langle\psi| \tag{783}$$

können wir auch schreiben

$$\left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle = \mathrm{Sp}\left(\hat{\mathcal{P}}_\psi \hat{\mathcal{L}}\right) \quad . \tag{784}$$

Mit einem vollständigen Basissystem können wir die Zerlegung vornehmen

$$|\psi\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k |v_k\rangle\,\psi\,(k)\,\mathrm{d}k \tag{785}$$

mit

$$\psi\,(k) = \langle\, v_k |\, \psi\rangle \tag{786}$$

und

$$\sum\!\!\!\!\!\!\int_k \psi^*\,(k)\,\psi\,(k)\,\mathrm{d}k = 1 \quad . \tag{787}$$

Damit läßt sich auch der Erwartungswert schreiben als

$$\left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_k \left\langle \upsilon_k \left| \hat{\mathcal{P}}_\psi \hat{\mathcal{L}} \upsilon_k \right. \right\rangle \mathrm{d}k \quad . \tag{788}$$

Die Erwartungswerte kommen also durch das Zusammenwirken zweier hermitescher Operatoren zustande, des statistischen Operators $\hat{\mathcal{P}}_\psi$ des Zustands des Systems und des Operators $\hat{\mathcal{L}}$ der zu messenden Observablen.
Wir betrachten nun jene spezielle Richtungen $|\psi_{\mathcal{L}}\rangle$ des Zustandsvektors, für die die Messung von $\mathcal{L}$ streuungsfrei ist, d.h. die mittlere quadratische Abweichung vom Mittelwert verschwindet. Dazu ist es notwendig und hinreichend, daß

$$\left| \left( \hat{\mathcal{L}} - \left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle \right) \psi_L \right\rangle = 0 \tag{789}$$

oder

$$\hat{\mathcal{L}} \, |\psi_{\mathcal{L}}\rangle = \left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle |\psi_{\mathcal{L}}\rangle \quad . \tag{790}$$

$|\psi_{\mathcal{L}}\rangle$ muß also Eigenvektor von $\hat{\mathcal{L}}$ und $\left\langle \hat{\mathcal{L}} \right\rangle$ der zugehörige Eigenwert sein. Ergibt sich bei einer Messung von $\mathcal{L}$ ein Meßwert mit Sicherheit, so ist der Meßwert ein Eigenwert $L$ von $\hat{\mathcal{L}}$, und der Zustandsvektor muß vor der Messung die Richtung des dazugehörigen Eigenvektors $|u_L\rangle$ gehabt haben,

$$|\psi_{\mathcal{L}}\rangle \sim |u_L\rangle \quad . \tag{791}$$

Auch bei einem beliebigen Anfangszustand $|\psi\rangle$ vor der Messung sind die überhaupt möglichen Meßwerte einer Observablen die reellen Eigenwerte $L$ des hermiteschen Operators $\hat{\mathcal{L}}$. Der Zustandsvektor geht aufgrund der Einwirkung der Meßapparatur in die Richtung des Eigenvektors $|u_L\rangle$ von $\hat{\mathcal{L}}$ über, der zu dem gemessenen Eigenwert $L$ gehört.
Die Messung des Eigenwertes $L$ entspricht dem Übergang

$$|\psi\rangle \quad \longrightarrow \quad |\psi'\rangle = |u_L\rangle \quad . \tag{792}$$

Man spricht hierbei von einer Reduktion des Zustandsvektors durch die Messung.

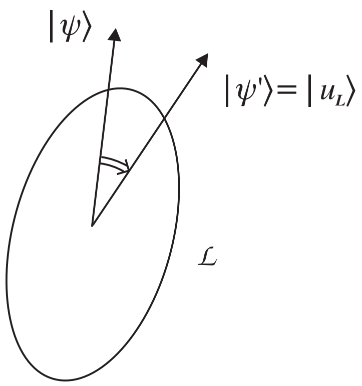


Abbildung 16: Reduktion des Zustandsvektors $|\psi\rangle \to |\psi'\rangle$ durch eine Messung.

Durch den Ausgang der Messung wird die Richtung des Zustandsvektors im unitären Vektorraum festgelegt. Bei nichtvorhandener Entartung drückt man diesen Übergang aus durch

$$|\psi\rangle \quad \xrightarrow{\mathcal{L}} \quad \frac{|u_L\rangle \langle u_L|\,\psi\rangle}{\sqrt{|\langle u_L|\,\psi\rangle|^2}} = \frac{\left|\hat{\mathcal{P}}_{u_L}\psi\right\rangle}{\left\|\hat{\mathcal{P}}_{u_L}\psi\right\|} \quad . \tag{793}$$

Die Meßapparatur filtert also gerade jene Komponenten von $|\psi\rangle$ heraus, die senkrecht auf dem Eigenraum $U_L$ des Operators $\hat{\mathcal{L}}$ stehen.

# Der harmonische Oszillator

Die Diskussion des harmonischen Oszillators repräsentiert eines der wichtigsten Konsequenzen der Quantenmechanik. Es gibt eine Vielzahl von Anwendungen in der Molekülphysik, bei Kristallschwingungen und der Kernphysik. Auch für das Verständnis der Quantenfeldtheorie ist die Studie des harmonischen Oszillators von besonderer Bedeutung. Wir verbleiben zunächst bei der Diskussion des eindimensionalen harmonischen Oszillators.

Die rücktreibende Kraft $K = -k\,x$ des harmonischen Oszillators führt zu der potentiellen Energie

$$V(x) = \frac{1}{2}\,k\,x^2 = \frac{1}{2}\,m\,\omega^2\,x^2 \tag{794}$$

mit der Schwingungsfrequenz $\omega = \sqrt{k/m}$. Wir wollen nun die Eigenwerte und Eigenvektoren des Hamilton–Operators

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}\,m\,\omega^2\,\hat{x}^2 \tag{795}$$

ermitteln, das heißt, wir wollen die Schrödinger–Gleichung

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}\,m\,\omega^2\,\hat{x}^2\right)\,\Psi = E\,\Psi \tag{796}$$

lösen. Wir definieren dazu den nichthermiteschen Operator

$$\hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\,\hat{p}\right) \quad . \tag{797}$$

Aufgrund der Hermitezität von $\hat{x}$ und $\hat{p}$ lautet der adjungierte Operator

$$\hat{b}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\,\hat{p}\right) \quad . \tag{798}$$

Durch Addition bzw. Subtraktion erhalten wir die Auflösung nach $\hat{x}$ und $\hat{p}$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\hat{b} + \hat{b}^\dagger) \quad , \tag{799}$$

$$\hat{p} = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\,(\hat{b} - \hat{b}^\dagger) \quad . \tag{800}$$

Aus den Vertauschungsrelationen zwischen $\hat{x}$ und $\hat{p}$ können wir die Vertauschungsrelationen zwischen $\hat{b}$ und $\hat{b}^\dagger$ ableiten. Wir notieren

$$\hat{p}\,\hat{x} - \hat{x}\,\hat{p} = \frac{\hbar}{2i}\left\{(\hat{b} - \hat{b}^\dagger)(\hat{b} + \hat{b}^\dagger) - (\hat{b} + \hat{b}^\dagger)(\hat{b} - \hat{b}^\dagger)\right\} = -i\,\hbar\,. \tag{801}$$

Damit erhalten wir

$$-i\,\hbar\,\frac{1}{2}\,(\hat{b}\,\hat{b}^\dagger - \hat{b}^\dagger\,\hat{b} + \hat{b}\,\hat{b}^\dagger - \hat{b}^\dagger\,\hat{b}) = -i\,\hbar\,(\hat{b}\,\hat{b}^\dagger - \hat{b}^\dagger\,\hat{b}) = -i\,\hbar \tag{802}$$

und weiter

$$\left[\hat{b}, \hat{b}^\dagger\right] = 1 \quad \text{sowie} \quad \left[\hat{b}^\dagger, \hat{b}^\dagger\right] = \left[\hat{b}, \hat{b}\right] = 0 \quad . \tag{803}$$

Wir können nun den Hamiltonoperator $\hat{\mathcal{H}}$ für den harmonischen Oszillator ausdrücken durch die Operatoren $\hat{b}$ und $\hat{b}^\dagger$. Es ist

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \frac{\hbar\omega}{4} \left\{-(\hat{b} - \hat{b}^\dagger)^2 + (\hat{b} + \hat{b}^\dagger)^2\right\} && (804) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left\{\hat{b}\,\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\,\hat{b} + \hat{b}\,\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\,\hat{b}\right\} && (805) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left\{\hat{b}\,\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\,\hat{b}\right\} \quad . && (806) \end{aligned}$$

Die Terme proportional zu $\hat{b}^2$ bzw. $(\hat{b}^\dagger)^2$ haben sich weggehoben. Wir nutzen nun die Vertauschungsrelationen (803) aus und schreiben den Hamilton–Operator damit um

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2}\,\hbar\,\omega\,(\hat{b}^\dagger\,\hat{b} + 1 + \hat{b}^\dagger\,\hat{b}) = \frac{1}{2}\,\hbar\,\omega\,(2\,\hat{b}^\dagger\,\hat{b} + 1) = \hbar\,\omega\left(\hat{b}^\dagger\,\hat{b} + \frac{1}{2}\right) \quad . \tag{807}$$

Wir definieren nun den Operator

$$\hat{n} = \hat{b}^\dagger\,\hat{b} \quad . \tag{808}$$

Damit lautet der Hamilton–Operator

$$\hat{\mathcal{H}} = \hbar\,\omega\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right) \quad . \tag{809}$$

Der Operator $\hat{n}$ ist hermitesch, denn

$$\hat{n}^\dagger = \left(\hat{b}^\dagger\,\hat{b}\right)^\dagger = \hat{b}^\dagger\,\hat{b} = \hat{n} \quad . \tag{810}$$

Wenn es nun gelingt, den Operator $\hat{n}$ zu diagonalisieren, dann ist auch das Eigenwertproblem gelöst. Zu diesem Zweck untersuchen wir die Vertauschungsrelationen zwischen $\hat{n}$ und $\hat{b}$ bzw. $\hat{b}^\dagger$. So gilt beispielsweise

$$\hat{b}\,\hat{n} = \hat{b}\,\hat{b}^\dagger\,\hat{b} = (\hat{b}^\dagger\,\hat{b} + 1)\,\hat{b} = \hat{n}\,\hat{b} + \hat{b} \quad . \tag{811}$$

Ebenso ist

$$\hat{b}^\dagger\,\hat{n} = \hat{b}^\dagger\,\hat{b}^\dagger\,\hat{b} = \hat{b}^\dagger\,(\hat{b}\,\hat{b}^\dagger - 1) = \hat{n}\,\hat{b}^\dagger - \hat{b}^\dagger \quad . \tag{812}$$

Zusammengefaßt können wir damit schreiben

$$\left[\hat{b}, \hat{n}\right] = \hat{b} \tag{813}$$

und

$$\left[\hat{b}^\dagger, \hat{n}\right] = -\hat{b}^\dagger \quad . \tag{814}$$

Wir betrachten nun die Vertauschungsrelation von $\hat{b}^2$ bzw. $(\hat{b}^\dagger)^2$ mit $\hat{n}$. Es folgt

$$\hat{b}^2\,\hat{n} = \hat{b}\,\hat{b}\,\hat{n} = \hat{b}\,(\hat{n}+1)\,\hat{b} = (\hat{b}+\hat{n}\,\hat{b}+\hat{b})\,\hat{b} = \hat{n}\,\hat{b}^2 + 2\,\hat{b}^2 \quad . \tag{815}$$

Ebenso resultiert

$$\begin{aligned}(\hat{b}^\dagger)^2\,\hat{n} &= \hat{b}^\dagger\,\hat{b}^\dagger\,\hat{n} = \hat{b}^\dagger\,(-\hat{b}^\dagger + \hat{n}\,\hat{b}^\dagger) \\ &= -\hat{b}^\dagger\,\hat{b}^\dagger + \hat{n}\,\hat{b}^\dagger\,\hat{b}^\dagger - \hat{b}^\dagger\,\hat{b}^\dagger = \hat{n}\,(\hat{b}^\dagger)^2 - 2\,(\hat{b}^\dagger)^2 \quad .\end{aligned} \tag{816}$$

Zusammenfassend schreiben wir

$$\left[\hat{b}^2, \hat{n}\right] = 2\,\hat{b}^2 \quad , \tag{817}$$

$$\left[(\hat{b}^\dagger)^2, \hat{n}\right] = -2\,(\hat{b}^\dagger)^2 \quad . \tag{818}$$

Per vollständige Induktion kommen wir nun allgemeiner auf das generelle Resultat

$$\left[\hat{b}^q, \hat{n}\right] = q\,\hat{b}^q \quad , \tag{819}$$

$$\left[(\hat{b}^\dagger)^q, \hat{n}\right] = -q\,(\hat{b}^\dagger)^q \quad . \tag{820}$$

Wir wenden uns jetzt dem Eigenwertproblem von $\hat{\mathcal{H}}$ zu. Es seien $n$ die Eigenwerte des Operators $\hat{n}$, wobei in diesem Stadium der Rechnung $n$ eine beliebige Zahl sein kann. $|u_n\rangle$ sei der zugehörige Eigenvektor; die Eigenwertgleichung lautet somit

$$\hat{n}\,|u_n\rangle = n\,|u_n\rangle \quad . \tag{821}$$

Wir wenden nun die Operatorrelation (819) auf den Eigenvektor $|u_n\rangle$ an,

$$\hat{n}\,|\hat{b}^q\,u_n\rangle = (\hat{b}^q\,\hat{n} - q\,\hat{b}^q)\,|u_n\rangle = (n-q)\,|\hat{b}^q\,u_n\rangle \quad . \tag{822}$$

Dies impliziert, daß $b^q\,|u_n\rangle$ ebenfalls Eigenvektor von $\hat{n}$ ist, aber mit dem Eigenwert $n-q$. Daraus schließen wir

$$|\hat{b}^q\,u_n\rangle = C(n,q)\,|u_{n-q}\rangle \quad . \tag{823}$$

Hierbei ist $C(n,q)$ ein aus der Normierungsbedingung zu bestimmender Faktor. Wenden wir jetzt (820) auf den Eigenvektor $|u_n\rangle$ an, so resultiert

$$\hat{n}\,|(\hat{b}^\dagger)^q\,u_n\rangle = ((\hat{b}^\dagger)^q\,\hat{n} + q\,(\hat{b}^\dagger)^q)\,|u_n\rangle = (n+q)\,|(\hat{b}^\dagger)^q\,u_n\rangle \quad . \tag{824}$$

Dies bedeutet, $|(\hat{b}^\dagger)\,u_n\rangle$ ist ein Eigenvektor von $\hat{n}$ mit dem Eigenwert $n+q$. Ferner muß gelten

$$|(\hat{b}^\dagger)^q\,u_n\rangle = C'(n,q)\,|u_{n+q}\rangle \quad . \tag{825}$$

Wiederum bestimmt sich $C'(n,q)$ aus der Normierungsbedingung. Wir erhalten damit für den Operator $\hat{n}$ die Reihe von Eigenwerten mit den zugehörigen, noch nicht normierten Eigenvektoren:

Eigenwerte:

$$\ldots, n+q, \ldots, n+1, n, n-1, \ldots, n-q, \ldots \tag{826}$$

Eigenvektoren:

$$\ldots, |(\hat{b}^\dagger)^q\, u_n\rangle, \ldots, |\hat{b}^\dagger\, u_n\rangle, |u_n\rangle, |\hat{b}\, u_n\rangle, \ldots, |\hat{b}^q\, u_n\rangle, \ldots \quad . \tag{827}$$

Der Operator $\hat{b}^\dagger$ erzeugt also einen Eigenvektor mit einem um eins größeren Eigenwert. Wir nennen $\hat{b}^\dagger$ einen *Erzeugungsoperator*. Der Operator $\hat{b}$ erzeugt einen Eigenvektor mit einem um eins kleineren Eigenwert. Wir nennen $\hat{b}$ einen *Vernichtungsoperator*. Wir betrachten nun die Länge der Eigenvektoren. Insbesondere studieren wir den Eigenvektor $|\hat{b}^{q+1}\, u_n\rangle$. Wir stellen jetzt die folgende Behauptung auf: $n$ ist nicht–negativ ganzzahlig, das heißt $n = 0, 1, 2, \ldots$. Zunächst zeigen wir: die Eigenwerte $n$ sind nicht–negativ. Wir gehen aus von

$$n = \langle u_n|\hat{n}\,|u_n\rangle = \langle u_n|\hat{b}^\dagger\,\hat{b}\,|u_n\rangle = \langle \hat{b}\,u_n|\hat{b}\,u_n\rangle = ||\hat{b}\,u_n||^2 \geq 0 \quad . \tag{828}$$

Als Spezialfall von (819) und (820) können wir schreiben

$$\hat{n}\,|\hat{b}\,u_n\rangle = (n-1)\,|\hat{b}\,u_n\rangle \tag{829}$$

$$\hat{n}\,|\hat{b}^\dagger\,u_n\rangle = (n+1)\,|\hat{b}^\dagger\,u_n\rangle \tag{830}$$

Für den Fall $q = 1$ berechnen wir jetzt die Normierungskonstanten $C'(n,1)$ und $C(n,1)$. Wir verwenden dabei

$$\hat{b}\,\hat{b}^\dagger - \hat{b}^\dagger\,\hat{b} = 1 \tag{831}$$

und somit

$$\hat{b}\,\hat{b}^\dagger = \hat{b}^\dagger\,\hat{b} + 1 = \hat{n} + 1 \quad . \tag{832}$$

Es ist

$$\begin{aligned} |C'(n,1)|^2 &= |C'(n,1)|^2\,\underbrace{\langle u_{n+1}|u_{n+1}\rangle}_{=1} \\ &= \langle C'(n,1)\,u_{n+1}\,|C'(n,1)\,u_{n+1}\rangle = \langle \hat{b}^\dagger\,u_n\,|\hat{b}^\dagger\,u_n\rangle \\ &= \langle u_n|\hat{b}\,\hat{b}^\dagger\,|u_n\rangle = \langle u_n|(\hat{n}+1)\,|u_n\rangle = n+1 \quad . \end{aligned} \tag{833}$$

Ebenso resultiert

$$\begin{aligned} |C(n,1)|^2 &= |C(n,1)|^2\,\langle u_{n-1}|u_{n-1}\rangle = \langle \hat{b}\,u_n|\hat{b}\,u_n\rangle \\ &= \langle u_n|\hat{b}^\dagger\,\hat{b}\,|u_n\rangle = \langle u_n|\hat{n}\,|u_n\rangle = n \quad . \end{aligned} \tag{834}$$

Damit haben wir also

$$
\begin{aligned}
\hat{b}^\dagger \, |u_n\rangle &= \sqrt{n+1} \, |u_{n+1}\rangle \quad , && (835) \\
\hat{b} \, |u_n\rangle &= \sqrt{n} \, |u_{n-1}\rangle \quad . && (836)
\end{aligned}
$$

Die willkürliche Phase der Wellenfunktion haben wir dabei außer acht gelassen. Die Koeffizienten $C$ und $C'$ wurden positiv reell gewählt. Im nächsten Schritt zeigen wir, daß der kleinste Eigenwert von $\hat{n}$ auf das Resultat $n_{\text{min}} = 0$ führt. Wir wissen, daß gilt

$$
\hat{b} \, |u_n\rangle = \sqrt{n} \, |u_{n-1}\rangle \tag{837}
$$

mit $n \geq 0$. Wenn wir nur $\hat{b}$ oft genug anwenden, muß so ein minimales $n = n_{\text{min}}$ mit

$$
\hat{b} \, |u_{n_{\text{min}}}\rangle = 0 \tag{838}
$$

geben. Daraus folgt

$$
\begin{aligned}
0 &= \langle \hat{b} \, u_{n_{\text{min}}} | \hat{b} \, u_{n_{\text{min}}} \rangle = \langle u_{n_{\text{min}}} | \hat{b}^\dagger \, \hat{b} \, | u_{n_{\text{min}}} \rangle \\
&= \langle u_{n_{\text{min}}} | \hat{n} \, | u_{n_{\text{min}}} \rangle = n_{\text{min}} \quad . && (839)
\end{aligned}
$$

Die Zahl Null ist also der kleinste Eigenwert des Anzahloperators $\hat{n}$. Wir schreiben

$$
|u_{n_{\text{min}}}\rangle = |0\rangle \quad . \tag{840}
$$

Wir nennen $|0\rangle$ den Vakuumerwartungswert. Es ist nicht der Nullvektor! Der Vakuumerwartungswert ist auf $1$ normiert,

$$
\langle 0 | 0 \rangle = 1 \quad . \tag{841}
$$

Schließlich beweisen wir noch, daß es Eigenzustände $|u_n\rangle$ mit nicht–ganzzahligen $n$ nicht geben kann. Es sei $|\Psi\rangle$ ein Eigenzustand zu $\hat{n}$ mit

$$
\hat{n} \, |\Psi\rangle = (m + x) \, |\Psi\rangle \qquad \text{mit } m \in \mathbf{N}, \mathbf{0 \leq x \leq 1} \quad . \tag{842}
$$

Nach Voraussetzung hat $|\Psi\rangle$ eine endliche Norm. Wir wenden jetzt den Operator $\hat{b}$ $\overline{m}$-mal auf $|\Psi\rangle$ an.

$$
\begin{aligned}
\hat{n} \, |\hat{b}^{\overline{m}} \, \Psi\rangle &= (-\overline{m} \, \hat{b}^{\overline{m}} + \hat{b}^{\overline{m}} \, \hat{n}) \, |\Psi\rangle \\
&= (-\overline{m} \, \hat{b}^{\overline{m}} + \hat{b}^{\overline{m}} \, (m + x)) \, |\Psi\rangle \\
&= (-\overline{m} + m + x) \, |\hat{b}^{\overline{m}} \Psi\rangle \quad . && (843)
\end{aligned}
$$

Im ersten Schritt haben wir die allgemeine Kommutatorrelation

$$
\hat{n} \, \hat{b}^{\overline{m}} = \hat{b}^{\overline{m}} \, \hat{n} - \overline{m} \, \hat{b}^{\overline{m}} \tag{844}
$$

ausgenutzt. Wir sehen also, der Zustand $|\hat{b}^{\overline{m}}\,\Psi\rangle$ ist Eigenzustand von $\hat{n}$ mit dem Eigenwert $(-\overline{m}+m+x)$. Wir betrachten nun die Norm des Zustandes $\hat{b}^{\overline{m}+1}\,|\Psi\rangle$. Es folgt

$$\begin{aligned}\langle \hat{b}^{\overline{m}+1}\,\Psi|\hat{b}^{\overline{m}+1}\,\Psi\rangle &= \langle \hat{b}^{\overline{m}}\,\Psi|\hat{b}^{\dagger}\,\hat{b}\,|\hat{b}^{\overline{m}}\,\Psi\rangle \\ &= (-\overline{m}+m+x)\,\langle \hat{b}^{\overline{m}}\,\Psi|\hat{b}^{\overline{m}}\,\Psi\rangle \end{aligned} \tag{845}$$

Der Vorfaktor $(-\overline{m}+m+x)$ ist nach Voraussetzung nie Null. Ansonsten steht links und rechts die Norm eines Zustandes. Die Norm des Zustandes $|\hat{b}^{\overline{m}+1}\,\Psi\rangle$ existiert genau dann, wenn die des Zustandes $|\hat{b}^{\overline{m}}\,\Psi\rangle$ existiert. Für $\overline{m} \geq m+1$ führt dies zu verschiedenen Widersprüchen. In (843) könnte die Norm negativ werden. In (845) gäbe es einen negativen Eigenwertn von $\hat{n}$, was wir bereits ausgeschlossen haben. Den einzig konsistenten Rahmen bietet $x = 0$.
Es ist

$$\begin{aligned}||\hat{b}^{q+1}\,u_n||^2 &= \langle \hat{b}^{q+1}\,u_n|\hat{b}^{q+1}\,u_n\rangle = \langle \hat{b}\,\hat{b}^{q}\,u_n|\hat{b}\,\hat{b}^{q}\,u_n\rangle \\ &= \langle \hat{b}^{q}\,u_n|\hat{b}^{\dagger}\,\hat{b}\,\hat{b}^{q}\,u_n\rangle = \langle \hat{b}^{q}\,u_n|\hat{n}\,\hat{b}^{q}\,u_n\rangle \\ &= \langle \hat{b}^{q}\,u_n|(n-q)\,\hat{b}^{q}\,u_n\rangle = (n-q)\,||\hat{b}^{q}\,u_n||^2 \quad . \end{aligned} \tag{846}$$

Weil die Länge eines Vektors nicht negativ sein darf, darf auch $(n-q)$ nicht negativ werden. Da $q$ eine positive, ganze Zahl ist, müssen die Eigenwerte $n$ positiv ganzzahlig sein, also

$$n = 0, 1, 2, \ldots \quad . \tag{847}$$

Diese Eigenwerte und nur diese gewährleisten, daß die Länge der Eigenvektoren nicht negativ wird. Für $q_{\text{max}} = n$ verschwindet die Länge $||\hat{b}^{n+1}\,u_n||$, das heißt $||\hat{b}^{n+1}\,u_n|| = 0$. Damit verschwinden auch alle Eigenvektoren $||\hat{b}^{m}\,u_n||$ mit $m \geq n+1$. Mit der Buchstabenwahl für $\hat{n} = \hat{b}^{\dagger}\,\hat{b}$ hatten wir bereits die Eigenwerte (847) präjudiziert. Aus der stationären Schrödinger-Gleichung

$$\hbar\,\omega\left(\hat{n}+\frac{1}{2}\right)\,|u_n\rangle = E\,|u_n\rangle \tag{848}$$

erhalten wir nun als Energieeigenwerte

$$E_n = \hbar\,\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \quad . \tag{849}$$

Das Energiespektrum ist diskret. Die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators sind also äquidistant. Den Abstand $\hbar\omega$ zweier benachbarter Energieterme nennt man ein Schwingungsquant. Die Zahl $n$ nennt man die Anzahl der Schwingungsquanten, und $\hat{n}$ ist der Operator der Anzahl der Schwingungsquanten. Verkürzt sagt man, $\hat{n}$ ist der *Anzahloperator*. Die Schwingungsquanten einer bestimmten Frequenz $\omega$ bezeichnet man auch als Phononen dieser Frequenz. Im Unterschied dazu sind Photonen Schwingungsquanten des elektromagnetischen Feldes.
Es ist wichtig zu bemerken, daß die tiefste Energie des harmonischen Oszillators nicht bei Null liegt. Diese niedrigste Energie folgt für $n = 0$ und ist gegeben durch

$$E_0 = \frac{1}{2}\,\hbar\,\omega \quad . \tag{850}$$

Diese Nullpunktsenergie ist eine direkte Folge der Unschärferelation. Für $E = 0$ müßte schon nach der klassischen Mechanik $x$ verschwinden, damit $V(x) = 0$ ist, sowie auch $p$ verschwinden, damit $T = p^2/2m = 0$ ist. Dies bedeutet aber eine gleichzeitige scharfe Angabe von kanonischen Größen, was nach der Unschärferelation verboten ist. Daher ist die Energie $E = 0$ nicht möglich. Diese Argumente gelten nicht nur spezifisch für das Potential des harmonischen Oszillators, sondern sie gelten für eine beliebige Potentialmulde. *Gebundene Zustände müssen stets eine Nullpunktsenergie besitzen.*
Wir vergleichen nochmals die Energieeigenwerte für das eindimensionale Kastenpotential mit unendlich hohen Potentialwänden, für das Coulomb–Potential und für den harmonischen Oszillator. Besonderes Augenmerk legen wir auf die Abhängigkeit des Energiewertes von der Quantenzahl $n$ mit jeweils $n \in \mathbf{Z}$ und $n \geq 0$.

| Eindimensionales Kastenpotential der Breite $a$ | Coulomb–Potential für die Zentralladung $Ze$ | Eindimensionaler harmonischer Oszillator |
|---|---|---|
| $E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\, n^2$ | $E_n = -\frac{Z^2e^4m}{2\hbar^2}\,\frac{1}{n^2}$ | $E_n = \hbar\,\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ |

Wir wollen nun einen ersten Blick auf die Normierungskonstante der Zustände werfen. Der Operator $\hat{b}$ ist ein Vernichtungsoperator eines Schwingungsquants oder Phonons. Es gilt

$$\hat{b}\,|u_n\rangle = C\,|u_{n-1}\rangle \quad . \tag{851}$$

Aus der Normierungsbedingung

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{!}{=} \langle u_{n-1}|u_{n-1}\rangle = \frac{1}{|C|^2}\,\langle \hat{b}\,u_n|\hat{b}\,u_n\rangle = \frac{1}{|C|^2}\,\langle u_n|\hat{b}^\dagger\,\hat{b}\,u_n\rangle \\ &= \frac{1}{|C|^2}\,\langle u_n|\hat{n}\,u_n\rangle = \frac{1}{|C|^2}\,\langle u_n|n\,u_n\rangle = \frac{n}{|C|^2} \end{aligned} \tag{852}$$

folgt

$$|C|^2 = n \tag{853}$$

und damit weiter

$$\hat{b}\,|u_n\rangle = \sqrt{n}\,|u_{n-1}\rangle \quad . \tag{854}$$

Der Operator $\hat{b}^\dagger$ ist der Erzeugungsoperator eines Schwingungsquants. Es ist

$$\hat{b}^\dagger\,|u_n\rangle = C'\,|u_{n+1}\rangle \quad . \tag{855}$$

Mit der Normierungsbedingung

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{!}{=} \langle u_{n+1}|u_{n+1}\rangle = \frac{1}{|C'|^2}\,\langle \hat{b}^\dagger\,u_n|\hat{b}^\dagger\,u_n\rangle = \frac{1}{|C'|^2}\,\langle u_n|\hat{b}\,\hat{b}^\dagger\,u_n\rangle \\ &= \frac{1}{|C'|^2}\,\langle u_n|(\hat{b}^\dagger\,\hat{b} + 1)\,u_n\rangle = \frac{1}{|C'|^2}\,\langle u_n|(\hat{n} + 1)\,u_n\rangle = \frac{n+1}{|C'|^2} \end{aligned} \tag{856}$$

folgt

$$|C'|^2 = n+1 \tag{857}$$

und somit

$$\hat{b}^\dagger\,|u_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|u_{n+1}\rangle \quad . \tag{858}$$

Der tiefste Eigenzustand ist definiert durch

$$\hat{b}\,|u_0\rangle = 0 \quad . \tag{859}$$

Durch $n$-malige Anwendung von $\hat{b}^\dagger$ auf $|u_0\rangle$ läßt sich jeder Eigenvektor $|u_n\rangle$ generieren. Der tiefste Zustand $|u_0\rangle$ sei normiert, $\|u_0\| = 1$. Aus der $n$-maligen Anwendung von (858) folgt bezüglich des normierten Eigenzustandes $|u_n\rangle$ zunächst

$$|u_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{0+1}}\,|\hat{b}^\dagger\,u_0\rangle \ , \tag{860}$$

$$|u_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+1}}\,|\hat{b}^\dagger\,u_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\frac{1}{\sqrt{1}}\,|(\hat{b}^\dagger)^2\,u_0\rangle \tag{861}$$

und generell

$$|u_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\,|(\hat{b}^\dagger)^n\,u_0\rangle \quad . \tag{862}$$

Die Wirkung des Orts- und Impulsoperators auf die Eigenzustände erhalten wir, indem wir $\hat{x}$ und $\hat{p}$ durch $\hat{b}$ und $\hat{b}^\dagger$ ausdrücken. Es resultiert

$$\hat{x}\,|u_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\,m\,\omega}}\,\Big(\sqrt{n}\,|u_{n-1}\rangle + \sqrt{n+1}\,|u_{n+1}\rangle\Big) \quad , \tag{863}$$

$$\hat{p}\,|u_n\rangle = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{\hbar\,m\,\omega}{2}}\,\Big(\sqrt{n}\,|u_{n-1}\rangle - \sqrt{n+1}\,|u_{n+1}\rangle\Big) \quad . \tag{864}$$

Die Eigenvektoren $|u_n\rangle$ des hermiteschen Hamilton–Operators $\hat{\mathcal{H}}$ bilden einen vollständigen Satz orthonormierter Basisvektoren des Hilbert–Raums

$$\langle u_n|u_m\rangle = \delta_{nm} \quad \rightarrow \quad \text{Orthonormalität} \quad , \tag{865}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} |u_n\rangle\langle u_n| = 1 \quad \rightarrow \quad \text{Vollständigkeit} \quad . \tag{866}$$

Damit können wir jeden beliebigen Vektor $|\Psi\rangle$ des Hilbert–Raums nach Eigenvektoren $|u_n\rangle$ des harmonischen Oszillators entwickeln. Es ist

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |u_n\rangle\,\Psi_n \tag{867}$$

mit

$$\Psi_n = \langle u_n|\Psi\rangle \quad . \tag{868}$$

# Die Schrödinger-Gleichung für den harmonischen Oszillator in der Ortsdarstellung

Als Alternative verfolgen wir jetzt einen mehr traditionellen Weg zur Bestimmung der Energieeigenwerte für den quantenmechanischen harmonischen Oszillator. Mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \tag{869}$$

lautet die Schrödinger-Differentialgleichung in der Ortsdarstellung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\Psi = E\Psi\,. \tag{870}$$

Zur Lösung dieser Gleichung führen wir die folgenden Größen ein

$$z = x/x_0, \;\; x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \;\; \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}. \tag{871}$$

Wir schreiben die Differentialgleichung in bezug auf die neue Variable $z$ um. Es ist

$$\frac{d\Psi}{dx} = \frac{d\Psi}{dz}\frac{dz}{dx} = \frac{d\Psi}{dz}\frac{1}{x_0}, \;\; \frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{d^2\Psi}{dz^2}\frac{1}{x_0^2}. \tag{872}$$

Aus (870) erhalten wir durch Multiplikation mit $-2/(\hbar\omega)$

$$\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d^2\Psi}{dz^2}\frac{1}{x_0^2} - \frac{m\omega}{\hbar}x^2\Psi = -\frac{2E}{\hbar\omega}\Psi \tag{873}$$

und weiter

$$\frac{d^2\Psi}{dz^2} + (\lambda - z^2)\Psi = 0. \tag{874}$$

Wir haben auf dimensionslose Variable transformiert. Wir müssen die endlichen, stetigen und eindeutigen Lösungen dieser Gleichung im Intervall von $-\infty < z < +\infty$ finden. Dazu untersuchen wir zunächst das asymptotische Verhalten der Lösung von (874) für $z \to \pm\infty$. Wir setzen

$$\Psi(z) = e^{f(z)}\, v(z). \tag{875}$$

Diesen Ansatz setzen wir in die Differntialgleichung (874) ein. Es ist

$$\frac{d\Psi}{dz} = e^{f(z)} f'(z)\, v(z) + e^{f(z)}\, v'(z) \tag{876}$$

und weiter

$$\begin{aligned}\frac{d^2\Psi}{dz^2} &= e^{f(z)} f'^2(z)\, v(z) + e^{f(z)} f''(z)\, v(z) + e^{f(z)} f'(z)\, v'(z) \\ &\quad + e^{f(z)} f'(z)\, v'(z) + e^{f(z)}\, v''(z) \\ &= e^{f(z)} f'^2(z)\, v(z) + e^{f(z)} f''(z)\, v(z) + 2e^{f(z)} f'(z)\, v'(z) + e^{f(z)}\, v''(z).\end{aligned} \tag{877}$$

Nach Division durch $e^{f(z)}$ wird aus (874)

$$v''(z) + 2f'(z)\, v'(z) + [f''(z) + f'^2(z) + \lambda - z^2]v(z) = 0. \tag{878}$$

Wir wollen erreichen, daß $e^{f(z)}$ der alleinige Faktor ist, der die Asymptotik der Wellenfunktion für $z \to \pm\infty$ determiniert. Wir wollen daher Terme proportional zu $z^2$ oder $z$ eliminieren. Die Wahl

$$f(z) = \pm\frac{1}{2}z^2 \tag{879}$$

bewerkstelligt dies, denn damit wird

$$f''(z) + f'^2(z) + \lambda - z^2 = \pm 1 + z^2 + \lambda - z^2 = \pm 1 + \lambda. \tag{880}$$

Wir setzen also an

$$\Psi(z) = c_1\, e^{-\frac{1}{2}z^2} v_1(z) + c_2\, e^{+\frac{1}{2}z^2} v_2(z). \tag{881}$$

Die Forderung nach einer endlichen normierbaren Lösung bedingt

$$c_2 = 0 \tag{882}$$

und somit

$$\Psi(z) = e^{-\frac{1}{2}z^2} v(z). \tag{883}$$

Damit ist die Asymptotik fixiert. Für die noch unbekannte Funktion $v(z)$ gilt also die Differentialgleichung

$$v''(z) - 2z\, v'(z) + [\lambda - 1]v(z) = 0. \tag{884}$$

Wir machen einen Potenzreihenansatz für $v(z)$, um (884) zu lösen,

$$v(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k\, z^k. \tag{885}$$

Wir setzen diesen Ansatz in (884) ein und sortieren nach Potenzen von $z$. Zunächst bekommen wir

$$\sum_k a_k k(k-1)\, z^{k-2} - 2\sum_k k a_k\, z^k + (\lambda - 1)\sum_k a_k\, z^k = 0. \tag{886}$$

Der Koeffizientenvergleich führt auf

$$(k+2)(k+1)a_{k+2} - 2k a_k + (\lambda - 1)a_k = 0 \tag{887}$$

und damit

$$a_{k+2} = \frac{2k - (\lambda - 1)}{(k+2)(k+1)} a_k. \tag{888}$$

Dies ist eine Rekursionsformel zur Ermittlung der Koeffizienten $a_k$. Bricht diese Reihe mit dem Glied $n$ ab, dann wird aus $v$ ein Polynom $n$-ten Grades. Dann und nur dann wird die Wellenfunktion (883) endlich, stetig und eindeutig für den ganzen Bereich $-\infty < z < +\infty$. Die Normierungsbedingung führt zum Abbruch der unendlichen Reihe und damit auch zur Eigenwertbestimmung. Für $k = n$ soll die Reihe abbrechen, also

$$2n - (\lambda - 1) = 0. \tag{889}$$

Somit folgt

$$\lambda = 2n + 1 \tag{890}$$

mit $n = 0, 1, 2, \ldots$. Aus (871) bekommen wir

$$E = \frac{1}{2}\hbar\omega\lambda = \frac{1}{2}\hbar\omega(2n+1) \tag{891}$$

und somit erneut

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{892}$$

# Die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators

Der Operator $\hat{b}$ bewirkt in der Ortsdarstellung, daß einer Funktion

$$< u_x|\varphi > = \varphi(x) \tag{893}$$

die Funktion

$$\hat{b}\,\varphi(x) \;= < u_x|\hat{b}\,\varphi > = \;\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,x + \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}}\frac{d}{dx}\right)\varphi(x) \tag{894}$$

zugeordnet wird. Wieder definieren wir die dimensionslose Größe

$$z = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x. \tag{895}$$

Damit bekommen wir

$$\hat{b}\,\varphi(x) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z + \frac{d}{dz}\right)\varphi(z) \tag{896}$$

und

$$\hat{b}^{+}\varphi(x) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z - \frac{d}{dz}\right)\varphi(z). \tag{897}$$

Aus $\hat{b}|u_0(x) > = 0$ folgt in der Ortsdarstellung $< u_x|u_0 > = u_0(x)$ die Differentialgleichung

$$\left(z + \frac{d}{dz}\right)u_0(z) = 0. \tag{898}$$

Durch Trennung der Variablen erhalten wir

$$\frac{du_0}{u_0} = -z\,dz \tag{899}$$

und weiter durch Integration

$$\ln u_0 = -\frac{1}{2}z^2 + \text{const.} \tag{900}$$

Damit haben wir

$$u_0(z) = c_0\,e^{-z^2/2}. \tag{901}$$

Die Normierungsbedingung

$$\begin{aligned} 1 \;&=\; \int_{-\infty}^{\infty}|u_0(x)|^2dx \;=\; |C_0|^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-z^2}\,dz \\ &=\; |C_0|^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{\pi} \;=\; |C_0|^2\sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}} \end{aligned} \tag{902}$$

führt schließlich auf

$$C_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}. \tag{903}$$

Aus

$$|u_n> = \frac{1}{\sqrt{n!}} \, |\hat{b}^{+n} u_0> \tag{904}$$

erhalten wir die angeregten Energiezustände $u_n(z)$. Somit gilt

$$u_n(z) = \frac{C_0}{\sqrt{2^n n!}} \left( z - \frac{d}{dz} \right)^n e^{-z^2/2}. \tag{905}$$

Dies wollen wir etwas umformen. Dazu bemerken wir die folgenden Identitäten für eine beliebige Funktion $\varphi(z)$

$$\begin{aligned}
\left( z - \frac{d}{dz} \right) \varphi(z) &= -e^{+z^2/2} \frac{d}{dz} \left[ e^{-z^2/2} \varphi(z) \right], \\
\left( z - \frac{d}{dz} \right)^2 \varphi(z) &= +e^{+z^2/2} \frac{d^2}{dz^2} \left[ e^{-z^2/2} \varphi(z) \right].
\end{aligned} \tag{906}$$

Es ist

$$\begin{aligned}
\frac{d^2}{dz^2} \left( e^{-z^2/2} \varphi(z) \right) &= \frac{d}{dz} \left( -z \, e^{-z^2/2} \varphi(z) + e^{-z^2/2} \frac{d}{dz} \varphi(z) \right) \\
&= -e^{-z^2/2} \varphi(z) - z(-z) e^{-z^2/2} \varphi(z) - z \, e^{-z^2/2} \frac{d}{dz} \varphi(z) \\
&\quad -z \, e^{-z^2/2} \frac{d}{dz} \varphi(z) + e^{-z^2/2} \frac{d^2}{dz^2} \varphi(z) \\
&= e^{-z^2/2} \, \varphi(z) + z^2 e^{-z^2/2} \, \varphi(z) - 2z e^{-z^2/2} \frac{d}{dz} \varphi(z) \\
&\quad + e^{-z^2/2} \frac{d^2}{dz^2} \varphi(z)
\end{aligned} \tag{907}$$

Andererseits ist

$$\begin{aligned}
\left( z - \frac{d}{dz} \right)^2 \varphi(z) &= \left( z - \frac{d}{dz} \right) \left( z - \frac{d}{dz} \right) \varphi(z) \\
&= z^2 \, \varphi(z) - z \frac{d}{dz} \varphi(z) - \frac{d}{dz} (z \, \varphi(z)) + \frac{d^2}{dz^2} \varphi(z) \\
&= z^2 \varphi(z) - 2z \frac{d}{dz} \varphi(z) - \varphi(z) + \frac{d^2}{dz^2} \varphi(z).
\end{aligned} \tag{908}$$

Damit ist (906) nachgewiesen. Allgemeiner gilt nun

$$\left( z - \frac{d}{dz} \right)^n \varphi(z) = (-1)^n e^{+z^2/2} \frac{d^n}{dz^n} \left[ e^{-z^2/2} \varphi(z) \right]. \tag{909}$$

Mit

$$\varphi(z) = e^{-z^2/2} \tag{910}$$

nimmt (905) die Form an

$$u_n(z) = \frac{C_0}{\sqrt{2^n n!}} (-1)^n e^{+z^2/2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}. \tag{911}$$

Jetzt nennen wir

$$H_n(z) \;=\; (-1)^n \, e^{+z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}. \tag{912}$$

Damit lauten die normierten Oszillatoreigenfunktionen in der Ortsdarstellung

$$u_n(z) \;=\; \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \, H_n(z) \, e^{-z^2/2}. \tag{913}$$

Die Funktionen $H_n(z)$ sind Polynome $n$-ten Grades. Es sind die Hermiteschen Polynome. Die ersten Polynome lauten explizit

$$\begin{aligned} H_0 &= 1, \\ H_1 &= 2z, \\ H_2 &= (2z)^2 - 2, \\ H_3 &= (2z)^3 - 6(2z), \\ H_4 &= (2z)^4 - 12(2z)^2 + 12, \\ H_5 &= (2z)^5 - 20(2z)^3 + 60(2z). \end{aligned} \tag{914}$$

Die Orthonormierungsbedingung der $u_n(x)$ überträgt sich auf die Hermiteschen Polynome in der Form

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} H_n(z) \, H_{n'}(z) \, dz \;=\; 2^n n! \sqrt{\pi} \, \delta_{nn'}. \tag{915}$$

Die Eigenfunktionen $u_n(x)$ für die niedrigsten Zustände sind in der nachfolgenden Figur aufgetragen.

Für $z \to \pm\infty$ klingen die Eigenfunktionen wie $z^n e^{-z^2/2}$ ab. Das Quadrat $u_n^2(x)$ gibt die Wahrscheinlichkeitsdichte an, das Teilchen an einem Ort $x$ anzutreffen, wenn unmittelbar vorher der Energiewert $E_n$ festgestellt wurde.

Wir wollen abschließend noch eine Rekursionsformel für die Hermite-Polynome ableiten, die es in einfacher Weise ermöglichen wird, aus der Kenntnis der niedrigsten Hermite-Polynome für beliebige $n$ die Hermite-Polynome zu berechnen. Dabei gehen wir aus von

$$\hat{b}|u_n > = \sqrt{n}|u_{n-1} >, \qquad \hat{b}^+|u_n > = \sqrt{n+1}|u_{n+1} > . \tag{916}$$

Dies übertragen auf die Ortsdarstellung führte auf

$$\begin{aligned} \hat{b}\, u_n(z) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(z + \frac{d}{dz}\right) u_n(z) = \sqrt{n}\, u_{n-1}, \\ \hat{b}^+ \, u_n(z) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(z - \frac{d}{dz}\right) u_n(z) = \sqrt{n+1}\, u_{n+1}. \end{aligned} \tag{917}$$

Wir addieren beide Gleichungen. Dies ergibt

$$\sqrt{2} z \, u_n(z) = \sqrt{n+1}\, u_{n+1}(z) + \sqrt{n}\, u_{n-1}(z). \tag{918}$$

Wir setzen hierin (913) ein und dividieren durch $(m\omega/(\hbar\pi))^{1/4} \, e^{-z^2/2}$. Damit erhalten wir

$$\sqrt{2} z \frac{1}{2^n n!} H_n(z) = \sqrt{n+1} \frac{1}{2^{n+1}(n+1)!} H_{n+1}(z) + \sqrt{n} \frac{1}{\sqrt{2^{n-1}(n-1)!}} H_{n-1}(z). \tag{919}$$

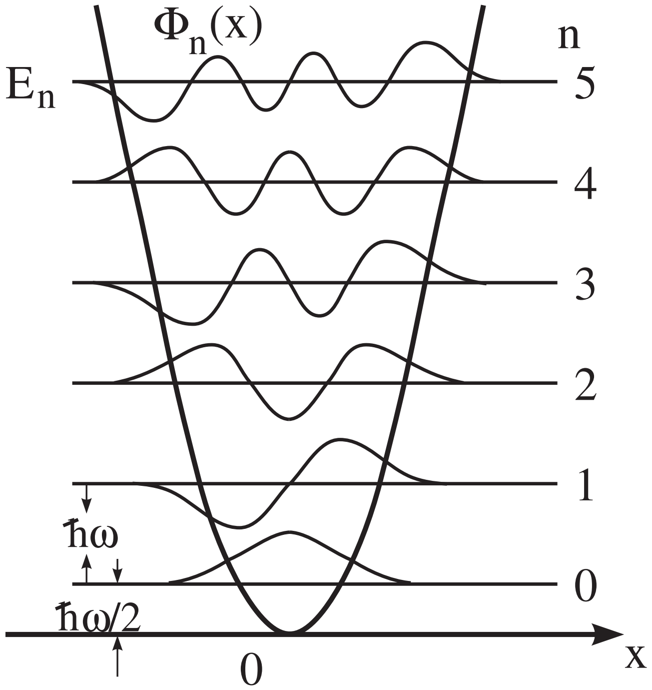


Abbildung 17: Die Eigenwerte $E_n$ und Eigenfunktionen $u_n(x) = \phi_n(x)$ für das Oszillatorpotential.

Wir multiplizieren mit $\sqrt{2^{n+1}n!}$ und bekommen so

$$2z\, H_n(z) = H_{n+1}(z) + 2n\, H_{n-1}(z). \tag{920}$$

Schließlich haben wir die gesuchte Rekursionsformel

$$H_{n+1}(z) = 2z\, H_n(z) - 2nH_{n-1}(z). \tag{921}$$

# Parität

Wir betrachten nun die Parität der Zustände. Die Parität ist eine Eigenschaft der Zustände. Sie beschreibt das Verhalten der Wellenfunktion bei der diskreten Symmetrietransformation der Raumspiegelung am Ursprung. Dies heißt, wir studieren nun das Verhalten der Wellenfunktion bei dem bergang $x \to -x$ oder äquivalent $z \to -z$. Der Paritätsoperator $\hat{P}$ ist definiert durch die Wirkung

$$\hat{P}\, u_n(z) = u_n(-z). \tag{922}$$

Hierbei ist der Paritätsoperator nicht zu verwechseln mit dem zuvor diskutierten Projektionsoperator. Wir definieren nun die Begriffe positive und negative Parität durch

$$\begin{aligned} u_n(z) &= +u_n(-z), \quad \text{(gerade, positive Parität)} \\ u_n(z) &= -u_n(-z), \quad \text{(ungerade, negative Parität)} \end{aligned} \tag{923}$$

Gilt hingegen

$$u_n(z) \neq \pm u_n(-z), \tag{924}$$

so liegt keine definite Parität vor. Die Parität ist eine der fundamentalen Symmetrietransformationen in der Natur.
Betrachten wir die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators, so stellen wir fest, daß der aus der Gauß-Funktion bestehende Faktor

$$F(z) = e^{-z^2/2} \tag{925}$$

stets positive Parität aufweist. Bei den Hermiteschen Polynomen $H_n(z)$ gilt, daß sie positive Parität haben für gerade $n$,

$$H_n(z) = H_n(-z) \qquad \text{für gerade } n, \tag{926}$$

und daß sie negative Parität haben für ungerade $n$,

$$H_n(z) = -H_n(-z) \qquad \text{für ungerade } n. \tag{927}$$

Das gleiche überträgt sich auf die vollständige Eigenfunktion $u_n(z)$.
Für eine allgemeine Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$ ist die Paritätstransformation definiert durch

$$\hat{P}\, \Psi(\vec{r}, t) = \Psi(-\vec{r}, t). \tag{928}$$

Offensichtlich sollte gelten

$$\hat{P}^2\, \Psi(\vec{r}, t) = +\Psi(\vec{r}, t). \tag{929}$$

Hieraus ergibt sich, daß die Eigenwerte des Operators $\hat{P}$ gleich $\pm 1$ sind. Zustände mit dem Eigenwert $p = +1$ nennt man Zustände mit gerader oder positiver Parität, solche mit $p = -1$ Zustände mit ungerader oder negativer Parität. Die Parität ist eines der wesentlichen Merkmale, die ein quantenmechenisches System charakterisieren.
Wir wollen nun nachweisen, daß der Paritätsoperator ein unitärer und hermitescher Operator ist. Dazu verwenden wir wieder die bra- und ket-Schreibweise. Es ist

$$\hat{P}^2\, |q> = \ \hat{P}\, |-q> = \ |q> \tag{930}$$

für alle $|q>$. Daraus folgt

$$\hat{P}^2 = \hat{1} \tag{931}$$

und somit

$$\hat{P}^{-1} = \hat{P}. \tag{932}$$

Für den Nachweis der Hermitezität nutzen wir aus, daß ebenso wie für die Eigenfunktionen des Impulsoperators

$$< p|p' > = \delta(p - p') \tag{933}$$

auch für die Eigenfunktionen des Ortsoperators gilt

$$< q|q' > = \delta(q - q'). \tag{934}$$

Ferner gilt für die $\delta$-Funktion

$$\delta(x) = \delta(-x). \tag{935}$$

Damit können wir schreiben

$$\begin{aligned} < q|\hat{P}|q' > &= < q| - q' > = \delta(q + q') = \delta(-q - q') = < -q|q' > \\ &= < q'| - q >^* = < q'|\hat{P}|q >^* \stackrel{!}{=} < q'|\hat{P}^+|q >^*, \end{aligned} \tag{936}$$

wobei wir im letzten Schritt den ersten Ausdruck adjungiert haben. Adjungierte Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{A}^+$ sind generell durch die Vorschrift

$$< \beta|\hat{A}|\alpha > = < \alpha|\hat{A}^+|\beta >^* \tag{937}$$

definiert. Der Vergleich der letzten Zeile von (936) zeigt uns

$$\hat{P} = \hat{P}^+ , \tag{938}$$

und damit ist $\hat{P}$ hermitesch. $\hat{P}$ hat somit auch reelle Eigenwerte. Mit (932) haben wir weiter

$$\hat{P} = \hat{P}^+ = \hat{P}^{-1} , \tag{939}$$

und damit ist $\hat{P}$ unitär. Bezüglich der Eigenwerte $p$ von $\hat{P}$ folgt aus $\hat{P}^2 = 1$,

$$\hat{P}^2|q > = p^2|q > = |q > \tag{940}$$

und daher

$$p = \pm 1. \tag{941}$$

# Dynamik von Quantensystemen

Wir wollen nun die zeitliche Ableitung von Operatoren und deren Erwartungswerte diskutieren. Dabei verbleiben wir zunächst in der Schrödinger–Ortsdarstellung. Wir bezeichnen mit $\bar{L}$ oder $< \hat{L} >$ den Erwartungswert einer physikalischen Größe $L$. Entsprechend bezeichnet $d\bar{L}/dt$ die zeitliche Ableitung dieses Erwartungswertes. In der Ortsdarsteluung gilt definitionsgemäß

$$\bar{L}(t) \;=\; \int \psi^*(x,t)\, \hat{L}\, \psi(x,t)\, dx \; . \tag{942}$$

Wir können nicht nur zum Zeitpunkt $t$ eine große Zahl von Messungne an einem Quantensystem durchführen und mitteln, sondern auch diese Messungen zum Zeitpunkt

$$t' \;=\; t + \Delta t \tag{943}$$

durchführen. Der entsprechende Mittelwert lautet dann $\bar{L}(t+\Delta t)$. Somit ist die zeitliche Änderung des Mittelwertes der Meßergebnisse gegeben durch

$$\frac{d}{dt}\bar{L} \;=\; \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\bar{L}(t+\Delta t) - \bar{L}(t)}{\Delta t} \; . \tag{944}$$

Um diesen Differentialquotienten zu berechnen, differenzieren wir (942) nach der Zeit und erhalten

$$\frac{d\bar{L}}{dt} \;=\; \int \psi^* \, \frac{\partial \hat{L}}{\partial t}\, \psi\, dx + \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\, \hat{L}\, \psi\, dx + \int \psi^*\, \hat{L}\, \frac{\partial \psi}{\partial t}\, dx \; . \tag{945}$$

Um die beiden letzten Terme umzuformen, verwenden wir die Schrödinger–Gleichung

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \;=\; -\frac{i}{\hbar}\, \hat{H}\psi \; , \tag{946}$$

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \;=\; \frac{i}{\hbar}\, \hat{H}^*\psi^* \; . \tag{947}$$

Einsetzen in (945) liefert

$$\frac{d\bar{L}}{dt} \;=\; \overline{\frac{\partial L}{\partial t}} + \frac{i}{\hbar} \int (\hat{H}^*\psi^*)(\hat{L}\psi)\, dx - \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \hat{L}\hat{H}\psi\, dx \; . \tag{948}$$

Wir formen das erste Integral um, indem wir die Selbstadjungiertheit des Operators $\hat{H}$ benutzen. Als Hilfsgrößen setzen wir $\psi^* = u_2^\dagger$ und $\hat{L}\psi = u_1$. Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} \int (\hat{H}^*\psi^*)(\hat{L}\psi)\, dx \;&=\; \int (\hat{H}^* u_2^*) \cdot u_1\, dx \\ &=\; \int u_2^* \cdot \hat{H} u_1\, dx = \int \psi^* (\hat{H}\hat{L}\psi)\, dx \; . \end{aligned} \tag{949}$$

Somit finden wir für (948)

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{L}}{dt} \;&=\; \overline{\frac{\partial L}{\partial t}} - \frac{i}{\hbar} \int \psi^* (\hat{L}\hat{H} - \hat{H}\hat{L}) \psi\, dx \\ &=\; \overline{\frac{\partial L}{\partial t}} - \frac{i}{\hbar} \int \psi^* [\hat{L}, \hat{H}] \psi\, dx \\ &=\; \overline{\frac{\partial L}{\partial t}} + \frac{i}{\hbar} \int \psi^* [\hat{H}, \hat{L}] \psi\, dx \; . \end{aligned} \tag{950}$$

Die zeitliche Ableitung des Erwarungswertes $\bar{L}$ des Operators $\hat{L}$ ist also durch den Erwartungswert des Operators $\partial\hat{L}/\partial t + i/\hbar[\hat{H}, \hat{L}]$ bestimmt. Entsprechend defnieren wir die zeitliche Ableitung des Operators $\hat{L}$ durch

$$\text{Def.}: \quad \boxed{\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial\hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{L}]} \quad = \quad \overset{\circ}{\hat{L}} \ . \tag{951}$$

Nach dieser Defnition gilt

$$\int \psi^* \cdot \frac{d\hat{L}}{dt}\,\psi\, dx \quad \equiv \quad \overline{\frac{dL}{dt}} \ = \ \frac{d}{dt}\bar{L} \ , \tag{952}$$

d.h., die zeitliche Ableitung des Mittelwertes ist gleich dem Mittelwert der zeitlichen Ableitung. Da der Ausdruck (951) nicht mit der üblichen Definition einer zeitlichen Ableitung übereinstimmt, verwendet man auch häufig hierfür ein anderes Zeichen

$$\overset{\circ}{\hat{\mathcal{L}}} \quad \equiv \quad \frac{d\hat{L}}{dt} \ . \tag{953}$$

Hängt die physikalische Größe $L$ nicht explizit von der Zeit ab, so vereinfachen sich die Ausdrücke (949) und (951) zu

$$\overline{\frac{dL}{dt}} \quad = \quad \frac{i}{\hbar}\,\overline{[\hat{H}, \hat{L}]} \tag{954}$$

und

$$\frac{d\hat{L}}{dt} \quad = \quad \frac{i}{\hbar}\,[\hat{H}, \hat{L}] \tag{955}$$

für $\partial\hat{L}/\partial t = 0$. Setzen wir für den Operator $\hat{L}$ den Hamilton–Operator $\hat{H}$ ein, so folgt

$$\frac{d\hat{H}}{dt} \quad = \quad \frac{\partial\hat{H}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\,[\hat{H}, \hat{H}] \ = \ \frac{\partial\hat{H}}{\partial t} \ . \tag{956}$$

Hängt der Hamilton–Operator nicht explizit von der Zeit ab, so gilt

$$\frac{d\hat{H}}{dt} \quad = \quad 0 \ . \tag{957}$$

Wir betrachten nun weiter den Fall $\partial\hat{L}/\partial t = 0$ und setzen

$$\hat{L} \quad = \quad \hat{A} + \hat{B} \ . \tag{958}$$

Damit haben wir

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{L}}{dt} \quad &= \quad \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A} + \hat{B}] = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}] + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{B}] \\ &= \quad \frac{d\hat{A}}{dt} + \frac{d\hat{B}}{dt} \ . \end{aligned} \tag{959}$$

Für

$$\hat{L} \quad = \quad \hat{A}\hat{B} \tag{960}$$

folgt ebenso

$$
\begin{aligned}
\frac{d\hat{L}}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\,[\hat{H},\hat{A}\hat{B}] = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\hat{B}\hat{H}) \\
&= \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{A}\hat{B}\underbrace{-\hat{A}\hat{H}\hat{B} + \hat{A}\hat{H}\hat{B}}_{=0}-\hat{A}\hat{B}\hat{H}) \\
&= \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}]\,\hat{B} + \hat{A}\,\frac{i}{\hbar}\,[\hat{H},\hat{B}] \\
&= \frac{d\hat{A}}{dt}\,\hat{B} + \hat{A}\,\frac{d\hat{B}}{dt}\ . \qquad (961)
\end{aligned}
$$

# Die Ehrenfestschen Sätze

Wir wollen jetzt die Gesetze für die Änderungen der Impulse und Koordinaten mit der Zeit aufstellen. Der Impulsoperator und der Ortsoperator hängen in der Schrödinger–Darstellung nicht explizit von der Zeit ab. Daher wird deren zeitliche Ableitung allein durch den Kommutator mit dem Hamilton–Operator bestimmt. Somit haben wir

$$
\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{x}]\ , \qquad (962)
$$

$$
\frac{d\hat{p}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{p}_x]\ . \qquad (963)
$$

Äquivalente Gleichungen gelten für die $y$– und $z$–Komponente. Für den Hamilton–Operator schreiben wir

$$
\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right) + V(\hat{x},\hat{y},\hat{z},t)\ . \qquad (964)
$$

In der Ortsdarstellung gilt

$$
\hat{x} = x\ , \qquad (965)
$$

$$
\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \qquad (966)
$$

und äquivalente Ausdrücke für die $y$– und $z$–Komponente. Zur Berechnung von $d\hat{x}/dt$ betrachten wir

$$
\begin{aligned}
\frac{d\hat{x}}{dt} &= \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{x}] = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{x} - \hat{x}\hat{H}) \\
&= \frac{i}{2m\hbar}\left(\hat{p}_x^2\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x^2\right)\ . \qquad (967)
\end{aligned}
$$

$\hat{x}$ vertauscht jeweils mit $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$ und $V(x,y,z,t)$. Jetzt ist

$$
\begin{aligned}
\hat{p}_x^2\hat{x} &= \hat{p}_x(\hat{p}_x\hat{x}) = \hat{p}_x(\hat{x}\hat{p}_x - i\hbar) = (\hat{p}_x\hat{x})\hat{p}_x - i\hbar\hat{p}_x \\
&= (\hat{x}\hat{p}_x - i\hbar)\hat{p}_x - i\hbar p_x = \hat{x}\hat{p}_x^2 - 2i\hbar\hat{p}_x\ . \qquad (968)
\end{aligned}
$$

Dies setzen wir in (967) ein, es resultiert

$$
\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{x}] = \frac{1}{2m}\frac{i}{\hbar}(-2i\hbar\hat{p}_x) = \frac{1}{m}\hat{p}_x\ . \qquad (969)
$$

Zusammenfassend haben wir also

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\hat{p}_x}{m} \quad ; \quad \frac{d\hat{y}}{dt} = \frac{\hat{p}_y}{m} \quad ; \quad \frac{d\hat{z}}{dt} = \frac{\hat{p}_z}{m} \; . \tag{970}$$

Der Geschwindigkeitsoperator ist also gleich dem Impulsoperator, dividiert durch die Teilchenmasse. Diese Relation erinnern sehr an die entsprechenden Größen der klassischen Mechanik.
Wir betrachten jetzt den Operator $d\hat{p}_x/dt$. Da $\hat{p}_x$ mit $\hat{p}_x^2$ vertauscht, haben wir

$$\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{p}_x] \;\; = \;\; \frac{i}{\hbar}[V, \hat{p}_x] = \frac{i}{\hbar}(V\hat{p}_x - \hat{p}_x V) \;\; = \;\; -\frac{\partial V}{\partial x} \; . \tag{971}$$

Also ist

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad ; \quad \frac{d\hat{p}_y}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial y} \quad ; \quad \frac{d\hat{p}_z}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial y} \; . \tag{972}$$

Die negativen Ableitungen des Potentials sind aber nichts anderes als die Operatoren der Kraftkomponenten,

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = \hat{F}_x \quad ; \quad \frac{d\hat{p}_y}{dt} = \hat{F}_y \quad ; \quad \frac{d\hat{p}_z}{dt} = \hat{F}_z \; . \tag{973}$$

Der Operator der zeitlichen Ableitung des Impulses ist gleich dem Operator der Kraft.
Für die Erwartungswerte gilt explizit ausgeschrieben

$$\frac{d}{dt}\int \psi^* \, \hat{x} \, \psi \, dx \;\; = \;\; \frac{1}{m}\int \psi^* \hat{p}_x \psi \, dx \; , \tag{974}$$

$$\frac{d}{dt}\int \psi^* \, \hat{p}_x \, \psi \, dx \;\; = \;\; -\frac{1}{m}\int \psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \psi \, dx \; . \tag{975}$$

Dies sind die Ehrenfestschen Sätze. Sie verknüpfen die Dynamik eines Quantensystems mit den klasssichen Bewegungsgleichungen.

# Konstanten der Bewegung

Eine Größe $L$ heißt ein Integral der Bewegungsgleichung oder Erhaltungsgröße, wenn gilt

$$\frac{\hat{L}}{dt} \;\; = \;\; \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{L}] \equiv 0 \; . \tag{976}$$

Hänge $L$ nicht explizit von der Zeit ab, d. h. $\partial \hat{L}/\partial t = 0$, dann haben wir

$$\frac{d\hat{L}}{dt} \;\; = \;\; \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{L}] \equiv 0 \; . \tag{977}$$

Für Integrale der Bewegung verschwindet der Kommutator. Eine Größe $L$, die nicht explizit von der Zeit abhängt, ist genau dann eine Erhaltungsgröße, wenn gilt

$$[\hat{H}, \hat{L}] \;\; = \;\; 0 \quad \Rightarrow \; L\text{: Erhaltungsgröße.} \tag{978}$$

Der Mittelwert eines Integrals der Bewegungsgleichungen hängt nicht von der Zeit ab,

$$\frac{d}{dt}\bar{L} \;\; = \;\; 0 \; . \tag{979}$$

Wir wollen jetzt zeigen, daß auch die Wahrscheinlichkeit im Zeitpunkt $t$ irgendeinen Wert $L_n$ des Bewegungsintegrals zu finden, nicht von der Zeit abhängt.
Da die Operatoren $\hat{L}$ und $\hat{H}$ vertauschen, besitzen sie ein gemeinsames System von Eigenfunktionen $u_n(x)$,

$$\hat{L}u_n = L_n u_n \ , \tag{980}$$

$$\hat{H}u_n = E_n u_n \ . \tag{981}$$

Wir entwickeln nun einen beliebigen Zustand $\psi(x,t)$ nach den Eigenfunktionen $u_n$. Die Funktionen $u_n$ entsprechen stationären Zuständen. Somit gilt

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n \, u_n(x) \, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \tag{982}$$

oder

$$\psi(x,t) = \sum_n a_n(t) \, u_n(x) \tag{983}$$

mit

$$a_n(t) = c_n \, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} = a_n(t=0) \, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \ . \tag{984}$$

Die Zerlegung (982) ist die Entwicklung von $\psi(x,t)$ nach den Eigenfunktionen des Operators $\hat{L}$.
Es ist

$$\begin{aligned} \int \psi^*(x,t) \, \hat{L} \, \psi(x,t) \, dx &= \sum_{n,n'} a_n^*(t) \, a_{n'}(t) \int u_n^*(x) \, \hat{L} \, u_{n'}(x) \, dx \\ &= \sum_{n,n'} a_n^*(t) \, a_{n'}(t) \, L_{n'} \, \delta_{n,n'} \ = \ \sum_n L_n \, a_n^*(t) \, a_n(t) \\ &= \sum_n L_n \, |a_n(t)|^2 \ = \ \sum_n L_n \, w(L_n,t) \ . \end{aligned} \tag{985}$$

Daher ist

$$w(L_n,t) = |a_n(t)|^2 = |c_n|^2 = |a_n(t=0)|^2 = \mathrm{const.} \tag{986}$$

Für die kräftefreie Bewegung wird die potentielle Energie $V(x,y,z,t) = 0$, und der Hamilton–Operator lautet somit

$$\hat{H} = \hat{T} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right) \ . \tag{987}$$

Wie in der klassischen Mechanik ist das Bewegungsintegral der Impuls.
Es ist

$$[\hat{H},\hat{p}_x] = [\hat{H},\hat{p}_y] \ = \ [\hat{H},p_z] \ = \ 0 \ . \tag{988}$$

d.h.

$$\frac{\hat{p}_x}{dt} = 0 \quad ; \quad \frac{\hat{p}_y}{dt} = 0 \quad ; \quad \frac{\hat{p}_z}{dt} = 0 \ . \tag{989}$$

In einem Zentralkraftfeld gilt der Flächensatz, und der Drehimpuls ist ein Bewegungsintegral. Hier haben wir

$$V = V(r) \tag{990}$$

und für den Hamilton–Operator

$$\hat{H} \;=\; \hat{T}_r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r)\;, \tag{991}$$

wobei $\hat{\vec{L}}$ der Operator des Bahndrehimpulses ist. $\hat{T}_r$ und $V$ hängen nur von der radialen Koordinate ab, nicht aber von den Winkeln. $\hat{\vec{L}}$ hingegen wirkt nur auf die Winkel. Daher gilt für den Kommutator

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] \;=\; 0 \tag{992}$$

und weiter

$$\frac{d\hat{L}^2}{dt} \;=\; 0\;. \tag{993}$$

Ebenso folgt aus

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] \;=\; 0 \tag{994}$$

für $i = 1, 2, 3$

$$[\hat{H}, \hat{L}_x] = [\hat{H}, \hat{L}_y] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0\;. \tag{995}$$

Dies impliziert

$$\frac{d\hat{L}_x}{dt} = \frac{d\hat{L}_y}{dt} = \frac{d\hat{L}_z}{dt} = 0\;. \tag{996}$$

Damit ist in einem Zentralkraftfeld der Drehimpuls ein Bewegungsintegral. Hängt die Hamilton–Funktion nicht explizit von der Zeit ab, so hatten wir

$$\frac{d\hat{H}}{dt} \;=\; 0\;. \tag{997}$$

In diesem Fall stimmt der Hamilton–Operator mit dem Operator der Gesamtenergie überein. (997) drückt den Energiesatz der Quantenmechanik aus.

# Die Energie–Zeit–Unschärferelation

Haben wir die beiden Observablen $F$ und $G$ vorliegen, so hatten wir die allgemeine Unschärferelation

$$\Delta F \cdot \Delta G \geq \left| \frac{1}{2i} \left\langle [\hat{\mathcal{F}}, \hat{\mathcal{G}}] \right\rangle \right| \tag{998}$$

gefunden. Hierbei kennzeichnete $< \hat{A} >$ den Erwartungswert des Operators $\hat{A}$ und

$$\Delta F \;=\; \left\| (\hat{\mathcal{F}} - < \hat{\mathcal{F}} >)\psi \right\| \geq 0\;, \tag{999}$$

d. h., $\Delta F$ ist die Wurzel aus der mittleren quadratischen Abweichung bei der Messung der Größe $F$.

Wir betrachten nun zunächst die Unschärferelation zwischen der Energie $E$ und einer explizit zeitunabhängigen Observablen $L$ mit

$$\left\langle \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \right\rangle = 0 \,. \tag{1000}$$

Somit gilt

$$\begin{aligned} \Delta E \cdot \Delta L &\geq \left| \frac{1}{2i} \left\langle [\hat{\mathcal{H}}, \hat{L}] \right\rangle \right| \\ &= \left| \frac{1}{2i} \frac{\hbar}{i} \left\langle \frac{d\hat{L}}{dt} \right\rangle \right| = \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d}{dt} < \hat{L} > \right| \,. \end{aligned} \tag{1001}$$

Wir definieren jetzt eine Zeit

$$\Delta t_L = \frac{\Delta L}{\left| \frac{d}{dt} < \hat{L} > \right|} \,. \tag{1002}$$

Diese Zeit gibt die Dauer an, innerhalb der der Erwartungswert sich um die Unschärfe $\Delta L$ verändert. $\Delta t_L$ ist typischerweise die Zeit, innerhalb der das System Werte im Unschärfeintervall zwischen $L$ und $L + \Delta L$ annehmen kann. Dann folgt aus (1001) und (1002)

$$\Delta E \cdot \Delta t_L \geq \frac{\hbar}{2} \,. \tag{1003}$$

Die Zeit ist hier immer assoziiert mit der Änderung der Observablen $L$.

## Die Greensche Funktion in der Quantenmechanik

Die Grundgleichung der Quantenmechanik ist die Schrödinger - Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) \;=\; H \psi(\mathbf{r}, t) \; . \tag{1004}$$

Betrachten wir die Bewegung eines Teilchens mit der Masse $m$ in einem Potential $V(\mathbf{r}, t)$, so gilt

$$H \;=\; H_0 + V(\mathbf{r}, t) \tag{1005}$$

mit

$$H_0 \;=\; -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \; . \tag{1006}$$

Die Schrödinger - Gleichung ist eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit. Kennen wir also die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ zu einer speziellen Zeit $t$ und für alle $\mathbf{r}$, so bestimmt dies eindeutig die Wellenfunktion für alle $\mathbf{r}$ und alle anderen Zeiten $t'$. Da die Schrödinger - Gleichung außerdem linear in $\psi$ ist, gilt das Superpositionsprinzip sowie ein linearer Zusammenhang zwischen den Wellenfunktionen zu verschiedenen Zeiten, beispielsweise zwischen $\psi(\mathbf{r}, t')$ und $\psi(\mathbf{r}, t)$. Dies impliziert weiter, daß $\psi$ eine homogene Integralgleichung der Form

$$\psi(\mathbf{r}', t') \;=\; \int G(\mathbf{r}', t'; \mathbf{r}, t) \, \psi(\mathbf{r}, t) \, d^3r \tag{1007}$$

befriedigt. Hierbei erstreckt sich die Integration über den ganzen Raum.

Die Gleichung (1007) dient gleichzeitig zur Definition der Funktion $G$. $G$ nennen wir die zum Hamilton - Operator $H$ korrespondierende Greensche Funktion. Mit Hilfe der Greenschen Funktion $G$ und dem Anfangswert $\psi(\mathbf{r}, t)$ ist es uns möglich, die Wellenfunktion an allen Raumpunkten $\mathbf{r}'$ und zu allen Zeiten $t'$ zu bestimmen.

In den folgenden Betrachtungen beschränken wir uns zunächst auf die sogenannte retardierte Greensche Funktion, die der einschränkenden Bedingung

$$G(\mathbf{r}', t'; \mathbf{r}, t) \;=\; 0 \qquad \text{für} \qquad t' \;<\; t \tag{1008}$$

unterworfen ist.

Um etwas vertrauter zu werden mit der Greenschen Funktion und für spätere Anwendungen ermitteln wir zunächst im eindimensionalen Fall die Eigenfunktionsdarstellung der Greenschen Funktion.

## Die Eigenfunktionsdarstellung der Greenschen Funktion

Wir wollen nun eine weitere wichtige Relation bezüglich der Greenschen Funktion ableiten, die für einige nachfolgende Rechnungen von Bedeutung ist. Wir betrachten zeitunabhängige Hamilton-Operatoren, d.h., es gilt die stationäre Gleichung

$$H \phi_n \;=\; E_n \, \phi_n \tag{1009}$$

und wir können die zeitabhängige Wellenfunktion $\psi_n(x,t)$ ansetzen als

$$\psi_n(x,t) \;=\; e^{-(i/\hbar)E_n t}\, \phi_n(x)\,. \tag{1010}$$

Die rein ortsabhängigen Wellenfunktionen $\phi_n(x)$ seien vollständig und orthonormal

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_m^*(x)\, \phi_n(x)\, dx \;=\; \delta_{mn}\,. \tag{1011}$$

In dem durch die Basisfunktionen $\phi_n(x)$ aufgespannten Hilbert-Raum können wir jede Funktion $f(x)$ darstellen als Superposition der Basisfunktionen

$$f(x) \;=\; \sum_{n=1}^{\infty} a_n\, \phi_n(x)\,. \tag{1012}$$

Die Entwicklungskoeffizienten $a_n$ lassen sich leicht bestimmen. Wir bilden

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x)\, f(x)\, dx \;=\; \sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x)\, \phi_n(x)\, dx \;=\; \sum_{n=1}^{\infty} a_n\, \delta_{mn} \;=\; a_m\,. \tag{1013}$$

Somit folgt zusammengefaßt

$$a_n \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x)\, f(x)\, dx\,. \tag{1014}$$

Setzen wir diesen Ausdruck in (1012) ein, so führt dies offensichtlich auf die Idendität

$$f(x) \;=\; \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(y)\, f(y)\, dy \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x)\, \phi_n^*(y)\right] f(y)\, dy\,. \tag{1015}$$

Durch diese einfachen Umformungen haben wir eine Darstellung der $\delta$-Funktion gewonnen

$$\delta(x-y) \;=\; \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x)\, \phi_n^*(y)\,, \tag{1016}$$

was natürlich durch die angenommene Vollständigkeit der Basisfunktionen bereits impliziert wurde.

Wir können nun die Greensche Funktion durch die Basisfunktionen $\phi_n$ ausdrücken. Zum Zeitpunkt $t_1$ gilt

$$f(x) \;\equiv\; \Psi(x,t_1) \;=\; \sum_{n=1}^{\infty} c_n\, e^{-(i/\hbar)E_n t_1}\, \phi_n(x) \;=\; \sum_{n=1}^{\infty} a_n\, \phi_n(x) \tag{1017}$$

für eine Lösung der Schrödinger-Gleichung. Es folgt

$$c_n \;=\; a_n\, e^{(i/\hbar)E_n t_1}\,. \tag{1018}$$

Zum Zeitpunkt $t_2 \;>\; t_1$ gilt analog

$$\Psi(x,t_2) \;=\; \sum_{n=1}^{\infty} c_n\, e^{-(i/\hbar)E_n t_2}\, \phi_n(x) \;=\; \sum_{n=1}^{\infty} a_n\, e^{(i/\hbar)E_n(t_1-t_2)}\, \phi_n(x)\,. \tag{1019}$$

Nun nutzen wir die Relation (1014) für $a_n$ aus. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \Psi(x,t_2) &= \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x)\, e^{(-i/\hbar)E_n(t_2-t_1)} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(y)\, f(y)\, dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x)\, \phi_n^*(y)\, e^{(-i/\hbar)E_n(t_2-t_1)}\, f(y)\, dy\,. \end{aligned} \tag{1020}$$

Dies vergleichen wir mit der Definitionsgleichung der Greenschen Funktion

$$\Psi(x,t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x,t_2;y,t_1)\, f(y)\, dy \tag{1021}$$

und ermitteln schließlich die Eigenfunktionsdarstellung für den Integralkern

$$G(x_2,t_2;x_1,t_1) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x_2)\, \phi_n^*(x_1)\, e^{(-i/\hbar)E_n(t_2-t_1)} \quad \text{für} \quad t_2 > t_1\,. \tag{1022}$$

# Die zeitliche Änderung von Quantensystemen

Bislang haben wir die wichtigsten Größen der Quantenmechanik, wie zum Beispiel die Zustände, Observablen, Skalarprodukte oder Erwartungswerte, zumeist zu einem festen Zeitpunkt betrachtet. Wir wollen uns weiter der Frage zuwenden: Wie ändern sich diese Größen mit der Zeit ? Wir betrachten dabei die Zeit als einen Parameter des quantenmechanischen Systems. Wir gehen davon aus, daß wir durch einen Meßprozeß zum Zeitpunkt $t = t_0$ das System genau kennen.
Zur Zeit $t = t_0$ liegt also der reine Zustand $| \Psi(t_0) \rangle$ vor. Die Frage lautet nun: Wie entwickelt sich das System bis zur Zeit $t > t_0$, wenn im Intervall $[t_0 \, , \, t]$ keine Messung vorgenommen wird ? Wir machen den Ansatz

$$| \Psi(t) \rangle = \hat{U}(t, t_0) \, | \Psi(t_0) \rangle \; . \tag{1023}$$

Hierbei ist $\hat{U}\,(t, t_0)$ ein zunächst unbekannter Zeitentwicklungsoperator. Wir wollen einige Eigenschaften dieses Zeitentwicklungsoperators ableiten, ohne zunächst die explizite Struktur zu kennen.
Für Wahrscheinlichkeitsaussagen ist es unumgänglich, daß die Norm des Zustandes konstant ist,

$$\langle \Psi(t) \, | \, \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t_0) \, | \, \Psi(t_0) \rangle \qquad . \tag{1024}$$

Somit haben wir

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{U}(t, t_0) \, \Psi(t_0) \right| \left. \hat{U}(t, t_0) \, \Psi(t_0) \right\rangle &\equiv \left\langle \hat{U} \, \Psi(t_0) \right| \left. \hat{U} \, \Psi(t_0) \right\rangle \\ &= \left\langle \Psi(t_0) \, | \, \hat{U}^{+} \, \hat{U} \, \Psi(t_0) \right\rangle \\ &= \langle \Psi(t_0) \, | \, \Psi(t_0) \rangle \qquad . \end{aligned} \tag{1025}$$

Dies bedingt

$$\hat{U}^{+} \, \hat{U} = 1 \tag{1026}$$

und daher

$$\hat{U}^{+} = \hat{U}^{-1} \quad , \tag{1027}$$

d. h., $\hat{U}(t, t_0)$ ist ein unitärer Operator.
Ferner muß offensichtlich gelten:

$$\hat{U}(t_0, t_0) = 1 \quad . \tag{1028}$$

Schließlich gilt für das Aufeinanderfolgen

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t') \, \hat{U}(t', t_0) \tag{1029}$$

mit $t_0 < t' < t$. Setzen wir in (1029) aber $t = t_0$, so resultiert aus dem Vergleich mit (1028)

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}^{-1}(t_0, t) \; . \tag{1030}$$

# Der Zeitentwicklungsoperator

Wir gehen aus von der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \left| \dot{\Psi}(t) \right\rangle \; = \; \hat{H} \; | \, \Psi(t) \, \rangle \tag{1031}$$

und von der Definitionsgleichung

$$| \, \Psi(t) \, \rangle \; = \; \hat{U}(t, t_0) \; | \, \Psi(t_0) \, \rangle \tag{1032}$$

für $\hat{U}(t, t_0)$. Damit erhalten wir als Bewegungsgleichung für den Zeitentwicklungsoperator

$$i\hbar \, \frac{d}{dt} \, \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \, \hat{U}(t, t_0) \quad . \tag{1033}$$

Mit der Anfangsbedingung $\hat{U}(t_0, t_0) \; = \; 1$ läßt sich diese Operatoren-Gleichung formal integrieren:

$$\hat{U}(t, t_0) \; = \; 1 \, + \, \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} dt_1 \, \hat{H}(t_1) \, \hat{U}(t_1, t_0) \quad . \tag{1034}$$

Da links wie rechts jeweils der Operator $\hat{U}$ steht, bietet sich eine Iteration an. Im ersten Iterationsschritt folgt

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0) \; &= \; 1 \, + \, \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} dt_1 \, \hat{H}(t_1) \\ &+ \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \, \hat{H}(t_1) \, \hat{H}(t_2) \, \hat{U}(t_2, t_0) \quad . \end{aligned} \tag{1035}$$

Wir iterieren das $\hat{U}$ auf der rechten Seite weiter und erhalten so schließlich

$$\hat{U}(t, t_0) \; = \; 1 \, + \, \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}^{(n)}(t, t_0) \tag{1036}$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{U}^{(n)}(t, t_0) \; &= \; \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \, \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \\ &\times \hat{H}(t_1) \, \hat{H}(t_2) \, \ldots \, \hat{H}(t_n) \end{aligned} \tag{1037}$$

und

$$t \, \geq \, t_1 \, \geq \, t_2 \geq \, \ldots \, \geq \, t_n \, \geq t_0 \quad . \tag{1038}$$

In (1037) ist strikt auf die Zeitordnung zu achten, da die Hamilton-Operatoren bei expliziter Zeitabhängigkeit zu verschiedenen Zeitpunkten nicht notwendigerweise vertauschen.
Für die weiteren Umformungen führen wir den Dyson-Zeitordnungsoperator ein,

$$\hat{T} \left[ \hat{A}(t_1) \, \hat{B}(t_2) \right] \; = \; \begin{cases} \hat{A}(t_1) \, \hat{B}(t_2) & \text{für} \quad t_1 \, > \, t_2 \\ \hat{B}(t_2) \, \hat{A}(t_1) & \text{für} \quad t_2 \, > \, t_1 \quad . \end{cases} \tag{1039}$$

Die Verallgemeinerung für mehr als zwei Operatoren ist evident.
Wir betrachten nun den Term für $n \, = \, 2$ in (1037). Wir können die Integration in verschiedener Weise durchführen. Wir untersuchen das Integrationsgebiet in der $(t_2, t_1)$-Ebene.

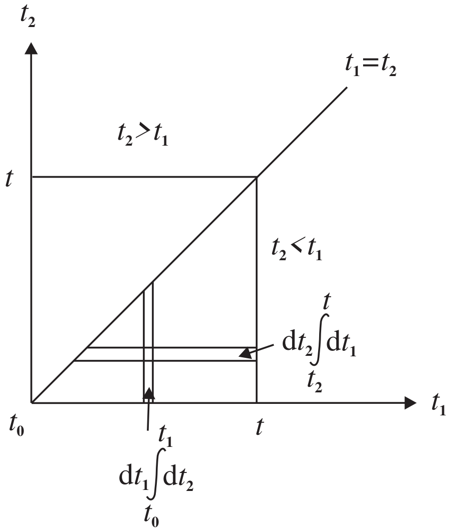


Abbildung 18: Zur Auswertung des zeitlichen Doppelintegrals.

Nach der obigen Abbildung können wir schreiben

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \, \hat{H}(t_1)\, \hat{H}(t_2) \;=\; \int_{t_0}^{t} dt_2 \int_{t_2}^{t} dt_1 \, \hat{H}(t_1)\, \hat{H}(t_2) \quad . \tag{1040}$$

Die linke Seite lassen wir stehen, auf der rechten Seite vertauschen wir $t_2$ und $t_1$ ($t_1 \leftrightarrow t_2$). Dies führt auf

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \, \hat{H}(t_1)\, \hat{H}(t_2) \;=\; \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_1}^{t} dt_2 \, \hat{H}(t_2)\, \hat{H}(t_1) \quad . \tag{1041}$$

Die beiden Gleichungen (1040) und (1041) lassen sich nun wie folgt kombinieren

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \, \hat{H}(t_1)\, \hat{H}(t_2) \;&=\; \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t} dt_2 \\ &\times \Big[ \hat{H}(t_1)\, \hat{H}(t_2)\, \Theta(t_1 - t_2) \,+ \hat{H}(t_2)\, \hat{H}(t_1)\, \Theta(t_2 - t_1) \Big] \quad . \end{aligned} \tag{1042}$$

Hierbei ist $\Theta(t)$ die Stufenfunktion mit

$$\Theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{für } t > 0 \\ 0 & \text{sonst} \quad . \end{cases} \tag{1043}$$

Damit können wir zusammenfassend schreiben

$$\int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \, \hat{H}(t_1)\, \hat{H}(t_2) \;=\; \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t} \int_{t_0}^{t} dt_1 \, dt_2 \, \hat{T} \left[ \hat{H}(t_1)\, \hat{H}(t_2) \right] \quad . \tag{1044}$$

Dies läßt sich sofort auf Terme mit beliebigem $n$ verallgemeinern,

$$\begin{aligned} \hat{U}^{(n)}(t,t_0) \;&=\; \frac{1}{n!} \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^{n} \int_{t_0}^{t} \ldots \int_{t_0}^{t} dt_1 \, \ldots \, dt_n \\ &\times \hat{T} \Big[ \hat{H}(t_1)\, \hat{H}(t_2) \, \ldots \, \hat{H}(t_n) \Big] \quad . \end{aligned} \tag{1045}$$

Setzen wir dieses Resultat in (1036) ein, so resultiert folgende kompakte Darstellung des Zeitentwicklungsoperators im Schrödinger-Bild,

$$\hat{U}(t,t_0) \;=\; \hat{T} \, \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' \, \hat{H}(t') \right\} \quad . \tag{1046}$$

Wir wollen uns nun einige Spezialfälle etwas näher anschauen. Gilt zunächst

$$\left[\hat{H}(t),\, \hat{H}(t')\right] \,=\, 0 \quad \forall\, t,\, t' \quad , \tag{1047}$$

so ist der Zeitordnungsoperator $\hat{T}$ in (1046) irrelevant und reduziert sich auf den Einheitsoperator, d. h.

$$\hat{U}(t,t_0) \,=\, \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\,\hat{H}(t')\right\} \quad . \tag{1048}$$

In einem abgeschlossenen, konservativen System gilt Energieerhaltung, und wir haben daher

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \,=\, 0 \quad . \tag{1049}$$

Wir können aufgrund der Konstanz von $\hat{H}$ das Zeitintegral in (1046) sofort ausführen und bekommen

$$\hat{U}(t,t_0) \,=\, \hat{U}(t-t_0) \,=\, \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\,\hat{H}\,(t-t_0)\right\} \quad . \tag{1050}$$

Hieraus kann man folgern, daß die Eigenzustände des Hamilton-Operators

$$\hat{H}\,|\,\Psi_E\,\rangle \,=\, E_n\,|\,\Psi_E\,\rangle \tag{1051}$$

eine triviale Zeitabhängigkeit aufweisen

$$|\,\Psi_E(t)\,\rangle \,=\, \hat{U}(t,\,t_0=0)\,|\,\Psi_E(0)\,\rangle \,=\, e^{-i\,E_n\,t/\hbar}\,|\,\Psi_E(0)\,\rangle \quad . \tag{1052}$$

# Heisenberg-Bild

Das Schrödinger-Bild, das wir bisher diskutiert haben, ist keineswegs zwingend zur Beschreibung der Dynamik eines Quantensystems. Wir können mit Hilfe der bereits studierten unitären Transformation das Bild wechseln, ohne dabei physikalische Meßgrößen zu ändern.
Im Schrödinger-Bild wird die volle Zeitabhängigkeit von den Zuständen getragen. Meßbare Größen, so zum Beispiel Erwartungswerte, werden aber aus Operatoren und Zustandsvektoren gebildet.
Wir können nun unitäre Transformationen vornehmen, so daß die Zeitabhängigkeit statt von den Zuständen von den Operatoren getragen wird. Genau dies machen wir im Heisenberg-Bild. Es ist definiert durch

$$|\,\Psi_H(t)\,\rangle \,\equiv\, |\,\Psi_H\,\rangle \,=\, |\,\Psi(t_0)\,\rangle \;. \tag{1053}$$

Der zeitunabhängige Heisenberg-Zustand soll zu einem festen Zeitpunkt $t_0$ mit dem Schrödinger-Zustand übereinstimmen. Die Bewegungsgleichung für den Heisenberg-Zustand $|\,\Psi_H\,\rangle$ lautet

$$\frac{d}{dt}\,|\,\Psi_H\,\rangle \,=\, 0 \quad . \tag{1054}$$

Nun gilt mit dem Zeitentwicklungsoperator im Schrödinger-Bild

$$\begin{aligned} |\,\Psi_H\,\rangle \,=\, |\,\Psi(t\,=\,t_0)\,\rangle \;&=\; \hat{U}^{-1}(t,t_0)\;|\Psi(t)\rangle \\ &=\; \hat{U}^{+}(t,t_0)\;|\Psi(t)\rangle \\ &=\; \hat{U}(t_0,t)\;|\Psi(t)\rangle \quad . \end{aligned} \tag{1055}$$

Die Rücktransformation lautet

$$| \Psi(t) \rangle \;=\; \hat{U}(t, t_0) \; |\Psi_H\rangle \qquad . \tag{1056}$$

Die entsprechende unitäre Transformation für die Operatoren $\hat{A}$ lautet dann

$$\hat{A}_H(t) \;=\; \hat{U}^+(t_0, t) \, \hat{A} \, \hat{U}(t, t_0) \qquad . \tag{1057}$$

Die Physik ändert sich durch diese Transformation nicht. Wir hatten bereits nachgewiesen, daß Erwartungswerte und Skalarprodukte bei unitären Transformationen unverändert bleiben.
Wir wollen nun zeigen, daß Vertauschungsrelationen in der Quantenmechanik bei unitären Transformationen forminvariant bleiben. Wir gehen aus von

$$\left[ \hat{A} , \, \hat{B} \right] \;=\; \hat{C} \qquad . \tag{1058}$$

Dann haben wir

$$\begin{aligned} \left[ \hat{A} , \, \hat{B} \right] \;&=\; \hat{A} \, \hat{B} \;-\; \hat{B} \, \hat{A} \\ &=\; \hat{U} \, \hat{A}_H \, \hat{U}^+ \, \hat{U} \, \hat{B}_H \, \hat{U}^+ \;-\; \hat{U} \, \hat{B}_H \, \hat{U}^+ \, \hat{U} \, \hat{A}_H \, \hat{U}^+ \\ &=\; \hat{U} \, \left[ \hat{A}_H \, , \, \hat{B}_H \right] \, \hat{U}^+ \end{aligned} \tag{1059}$$

und somit

$$\left[ \hat{A}_H \, , \, \hat{B}_H \right] \;=\; \hat{U}^+ \, \hat{C} \, \hat{U} \;=\; \hat{C}_H \qquad . \tag{1060}$$

Nun untersuchen wir die Bewegungsgleichungen der Operatoren bei unitären Transformationen. Wir verwenden dabei

$$i\hbar \, \frac{d}{dt} \, \hat{U}(t, t_0) \;=\; \hat{H}(t) \, \hat{U}(t, t_0) \qquad . \tag{1061}$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \, \hat{A}_H(t) \;&=\; \frac{\partial \hat{U}^+}{\partial t} \, \hat{A} \, \hat{U} \;+\; \hat{U}^+ \, \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \, \hat{U} \;+\; \hat{U}^+ \, \hat{A} \, \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \\ &=\; -\frac{1}{i\hbar} \, \left( \hat{H} \, \hat{U} \right)^+ \, \hat{A} \, \hat{U} \;+\; \hat{U}^+ \, \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \, \hat{U} \;+\; \hat{U}^+ \, \hat{A} \, \frac{1}{i\hbar} \, \left( \hat{H} \, \hat{U} \right) \\ &=\; \frac{1}{i\hbar} \, \hat{U}^+ \, \left[ \hat{A} , \, \hat{H} \right] \hat{U} \;+\; \hat{U}^+ \, \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \, \hat{U} \qquad . \end{aligned} \tag{1062}$$

Wir haben dabei von der Hermitezität von $\hat{H}$ Gebrauch gemacht. Wir definieren jetzt

$$\frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} \;=\; \hat{U}^+(t, t_0) \, \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \, \hat{U}(t, t_0) \qquad . \tag{1063}$$

Mit (1060) folgt damit

$$i\hbar \, \frac{d}{dt} \, \hat{A}_H(t) \;=\; \left[ \hat{A}_H \, , \, \hat{H}_H \right] \;+\; i\hbar \, \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} \qquad . \tag{1064}$$

Ein wichtiger Spezialfall ist wieder das konservative abgeschlossene System mit

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \;=\; 0 \tag{1065}$$

und

$$\hat{U}(t,t_0) \;=\; \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\,\hat{H}\,(t-t_0)\right\} \quad . \tag{1066}$$

Hier gilt offensichtlich

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{U}\right] \;=\; 0 \tag{1067}$$

und daher

$$\begin{aligned}\hat{H}_H(t) \;&=\; \left[\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\,\hat{H}\,(t-t_0)\right\}\right]^+ \,\hat{H}\,\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\,\hat{H}\,(t-t_0)\right\} \\ &=\; \hat{H} \;=\; \hat{H}_S \quad ,\end{aligned} \tag{1068}$$

wobei $\hat{H}_S$ für den Hamilton-Operator im Schrödinger-Bild steht. Für die anderen Operatoren gilt dann

$$\hat{A}_H(t) \;=\; \mathrm{e}^{i\,\hat{H}\,(t-t_0)/\hbar}\,\hat{A}\,\mathrm{e}^{-i\,\hat{H}\,(t-t_0)/\hbar} \quad . \tag{1069}$$

Es gibt spezielle Operatoren, die auch im Heisenberg-Bild zeitunabhängig sind. Es sind die Konstanten der Bewegung oder Erhaltungsgrößen. Hierbei gilt

$$\frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} \;=\; 0 \tag{1070}$$

sowie

$$\left[\hat{H}_H\,,\,\hat{A}_H\right] \;=\; 0 \quad . \tag{1071}$$

So ist beispielsweise der Hamilton-Operator für abgeschlossene Systeme eine Konstante der Bewegung.
Das Heisenberg-Bild erscheint auf den ersten Blick zunächst abstrakter und unanschaulicher als das Schrödinger-Bild. Es ist jedoch vollkommen äquivalent und wird insbesondere in der Quantenfeldtheorie häufiger verwendet.

# Das Wechselwirkungsbild

Wir gehen nun weg von den Extremfällen im Schrödinger–Bild und Heisenberg–Bild und verteilen die Zeitabhängigkeit auf Zustände und Operatoren. Wir diskutieren das von Dirac, Schwinger und Tomonaga eingeführte Wechselwirkungsbild. Dazu zerlegen wir den Hamilton–Operator $\hat{\mathcal{H}}$ in zwei Anteile

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_1(t) \quad . \tag{1072}$$

$\hat{\mathcal{H}}_0$ sei hier der zeitunabhängige Hamilton–Operator eines einfacher zu behandelnden Systems. Der Störterm $\hat{\mathcal{H}}_1(t)$ trägt hingegen eventuell eine explizite Zeitabhängigkeit. Häufig versteht man unter $\hat{\mathcal{H}}_0$ das freie, nicht wechselwirkende System, während $\hat{\mathcal{H}}_1(t)$ die Wechselwirkung beschreibt. Da gilt

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{H}}_0}{\partial t} = 0 \tag{1073}$$

haben wir

$$\hat{\mathcal{H}}_{0,H} = \hat{\mathcal{H}}_{0,S} \quad . \tag{1074}$$

Im Wechselwirkungsbild machen wir den Ansatz

$$\begin{aligned}
|\Psi_W(t_0)\rangle &= |\Psi_H\rangle = |\Psi(t_0)\rangle \quad , & (1075)\\
|\Psi_W(t)\rangle &= \hat{U}_W(t,t')\,|\Psi_W(t')\rangle \quad , & (1076)\\
|\Psi_W(t)\rangle &= \hat{U}_0(t_0,t)\,|\Psi(t)\rangle \quad . & (1077)
\end{aligned}$$

$\hat{U}_W(t,t')$ ist der Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild. $\hat{U}_0$ ist der Zeitentwicklungsoperator des ungestörten freien Systems,

$$\hat{U}_0(t,t') = \hat{U}_0(t-t') = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\hat{\mathcal{H}}_0(t-t')\right) \quad . \tag{1078}$$

Vergleichen wir (1077) mit

$$|\Psi_H(t)\rangle = |\Psi(t_0)\rangle \quad , \tag{1079}$$

so erkennen wir, daß für $\hat{\mathcal{H}}_1 = 0$ das Wechselwirkungsbild mit dem Heisenberg–Bild identisch ist,

$$|\Psi_H\rangle = |\Psi_W\rangle \quad \text{für } \hat{\mathcal{H}}_1 = 0 \quad . \tag{1080}$$

Die Größen ohne Index sind jeweils im Schrödinger–Bild gemeint. Wir wollen jetzt die Konsequenzen aus dem Ansatz (1075), (1076) und (1077) studieren. So bekommen wir

$$\begin{aligned}
|\Psi_W(t)\rangle &= \hat{U}_0(t_0,t)\,|\Psi(t)\rangle\\
&= \hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\,\hat{U}(t,t')\,|\Psi(t')\rangle\\
&= \hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\,\hat{U}(t,t')\,\hat{U}_0^{-1}(t_0,t')\,|\Psi_W(t')\rangle \quad . & (1081)
\end{aligned}$$

Dies liefert uns eine Verknüpfungsrelation zwischen dem Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild und im Schrödinger–Bild. Wir vergleichen (1081) mit (1075) und bekommen

$$\hat{U}_W(t,t') = \hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\,\hat{U}(t,t')\,\hat{U}_0(t',t_0) \quad . \tag{1082}$$

Bei fehlender Wechselwirkung, $\hat{\mathcal{H}}_1(t) = 0$, folgt mit $\hat{U} \equiv \hat{U}_0$ sofort $\hat{U}_W \equiv 1$, das heißt der Zustand ist im Wechselwirkungsbild wie im Heisenberg–Bild zeitunabhängig. Die Zeitabhängigkeit der Zustände wird also offensichtlich durch die zeitabhängige Wechselwirkung $\hat{\mathcal{H}}_1(t)$ determiniert.

Bezüglich der Transformation einer beliebigen Observablen fordern wir Gleichheit in beiden Bildern

$$\langle\Psi_W(t)|\,\hat{A}_W(t)\,|\Psi_W(t)\rangle = \langle\Psi(t)|\,\hat{A}\,|\Psi(t)\rangle \quad . \tag{1083}$$

Mit Hilfe von (1077) transformieren wir die rechte Seite von (1083) in das Wechselwirkungsbild. Es ist

$$\begin{aligned}\langle\Psi(t)|\,\hat{A}\,|\Psi(t)\rangle &= \langle\hat{U}_0^{-1}(t_0,t)\,\Psi_W(t)|\,\hat{A}\,|\hat{U}_0^{-1}(t_0,t)\,\Psi_W(t)\rangle \\ &= \langle\Psi_W(t)|\,\hat{U}_0(t_0,t)\,\hat{A}\,\hat{U}_0^{-1}(t_0,t)\,|\Psi_W(t)\rangle \quad . \end{aligned} \tag{1084}$$

Hierbei hatten wir die Unitarität, das heißt

$$\hat{U}_0^{-1}(t_0,t) = \hat{U}_0^{\dagger}(t_0,t) \quad , \tag{1085}$$

ausgenutzt. Dies impliziert also

$$\begin{aligned}\hat{A}_W(t) &= \hat{U}_0(t_0,t)\,\hat{A}\,\hat{U}_0^{-1}(t_0,t) \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\hat{\mathcal{H}}_0(t-t_0)\right)\hat{A}\,\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\hat{\mathcal{H}}_0(t-t_0)\right) \quad . \end{aligned} \tag{1086}$$

Die Dynamik der Observablen und der Operatoren ist also durch $\hat{H}_0$ fixiert. Wir differenzieren (1086) nach der Zeit und erhalten direkt

$$i\hbar\,\frac{d}{dt}\,\hat{A}_W(t) = \left[\hat{A}_W(t),\hat{\mathcal{H}}_0\right] + i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\hat{A}_W \tag{1087}$$

mit der Definition

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\hat{A}_W = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\hat{\mathcal{H}}_0(t-t_0)\right)\frac{\partial\,\hat{A}_W}{\partial t}\,\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\hat{\mathcal{H}}_0(t-t_0)\right) \quad . \tag{1088}$$

Die Bewegungsgleichung (1087) stimmt fast mit der des Heisenberg–Bildes überein, nur steht im Kommutator nicht der volle Hamilton–Operator $\hat{\mathcal{H}}$, sondern der freie Anteil $\hat{\mathcal{H}}_0$. Wir untersuchen noch die Zeitabhängigkeit der Zustände im Wechselwirkungsbild. Dazu differenzieren wir (1077) nach der Zeit,

$$\frac{d}{dt}\,|\Psi_W(t)\rangle = \left(\frac{d}{dt}\,\hat{U}_0(t_0,t)\right)|\Psi(t)\rangle + \hat{U}_0(t_0,t)\,\frac{d}{dt}\,|\Psi(t)\rangle \quad . \tag{1089}$$

Jetzt ist

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\,\hat{U}_0(t_0,t) &= \frac{d}{dt}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\hat{\mathcal{H}}_0(t_0-t)\right) \\ &= \frac{i}{\hbar}\,\hat{\mathcal{H}}_0\,\hat{U}_0(t_0,t) = \frac{i}{\hbar}\,\hat{\mathcal{H}}_0\,\hat{U}_0^{\dagger}(t,t_0) \\ &= \frac{i}{\hbar}\,\hat{U}_0^{\dagger}(t,t_0)\,\hat{\mathcal{H}}_0 \quad , \end{aligned} \tag{1090}$$

sowie

$$\frac{d}{dt}\,|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\,\hat{\mathcal{H}}\,|\Psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\,\hat{\mathcal{H}}\,|\Psi(t)\rangle \quad , \tag{1091}$$

also

$$
\begin{aligned}
\hat{U}_0(t_0,t)\,\frac{d}{dt}\,|\Psi(t)\rangle &= -\frac{i}{\hbar}\,\hat{U}_0(t_0,t)\,\hat{\mathcal{H}}\,|\Psi(t)\rangle \\
&= -\frac{i}{\hbar}\,\hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\,\hat{\mathcal{H}}\,|\Psi(t)\rangle \quad . \qquad (1092)
\end{aligned}
$$

Zusammengefaßt resultiert damit

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\,|\Psi_W(t)\rangle &= \frac{i}{\hbar}\,\left(\hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\,\hat{\mathcal{H}}_0 - \hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\,\hat{\mathcal{H}}\right)|\Psi(t)\rangle \\
&= \frac{i}{\hbar}\,\hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\,(-\hat{\mathcal{H}}_1(t))\,|\Psi(t)\rangle \\
&= \frac{i}{\hbar}\,\hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\,(-\hat{\mathcal{H}}_1(t))\,\hat{U}_0^{-1}(t_0,t)\,|\Psi_W(t)\rangle \\
&= \frac{i}{\hbar}\,\hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\,(-\hat{\mathcal{H}}_1(t))\,\hat{U}_0(t,t_0)\,|\Psi_W(t)\rangle \quad . \qquad (1093)
\end{aligned}
$$

Damit haben wir schließlich die Bewegungsgleichung der Zustände im Wechselwirkungsbild

$$
i\hbar\,\frac{d}{dt}|\Psi_W(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}_{1W}(t)\,|\Psi_W(t)\rangle \quad . \qquad (1094)
$$

Dies entspricht der üblichen Schrödinger–Gleichung mit dem Unterschied, daß auf der rechten Seite der volle Hamilton–Operator $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_1$ durch $\hat{\mathcal{H}}_1$ ersetzt wurde. Der Zeitentwicklungsoperator im Wechselwirkungsbild bestimmt sich aus der Schrödinger–Gleichung

$$
i\hbar\,\frac{d}{dt}\,\hat{U}_W(t,t_0) = \hat{\mathcal{H}}_{1W}(t)\,\hat{U}_W(t,t_0) \quad . \qquad (1095)
$$

Also eine formale Lösung finden wir wie zuvor

$$
\hat{U}_W(t,t_0) = \hat{T}\,\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\,\hat{\mathcal{H}}_{1W}(t')\right) \quad . \qquad (1096)
$$

Abschließend fassen wir die essentiellen Gleichungen in den verschiedenen Bildern zusammen.

1. **Schrödinger–Bild**

$$
i\hbar\,\frac{d}{dt}\,|\Psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}\,|\Psi(t)\rangle \qquad (1097)
$$

2. **Heisenberg–Bild**

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\,|\Psi_H\rangle &= 0 \quad , && (1098) \\
i\hbar\,\frac{d}{dt}\,\hat{A}_H &= \left[\hat{A}_H, \hat{\mathcal{H}}_H\right] + i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\hat{A}_H \quad , && (1099) \\
|\Psi_H\rangle &= \hat{U}^\dagger(t,t_0)\,|\Psi(t)\rangle \quad , && (1100) \\
\hat{A}_H(t) &= \hat{U}^\dagger(t,t_0)\,\hat{A}\,\hat{U}(t,t_0) \quad , && (1101) \\
\hat{U}(t,t_0) &= \hat{T}\,\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\,\hat{\mathcal{H}}(t')\right) \quad . && (1102)
\end{aligned}
$$

3. **Wechselwirkungsbild**

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_W(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}_{1W}(t) |\Psi_W(t)\rangle \quad , \tag{1103}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_W = \left[\hat{A}_W, \hat{\mathcal{H}}_0\right] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_W \quad , \tag{1104}$$

$$|\Psi_W(t)\rangle = \hat{U}_0(t_0, t) |\Psi(t)\rangle \quad , \tag{1105}$$

$$\hat{A}_W(t) = \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) \hat{A} \hat{U}_0(t, t_0) \quad , \tag{1106}$$

$$\hat{U}_0(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}}_0(t - t_0)\right) \quad . \tag{1107}$$

# Der Tunneleffekt

Im folgenden betrachten wir ein quantenmechanisches Teilchen im Feld einer Potentialbarriere mit der Höhe $V_m$ und der Breite $d$. Zur Erläuterung der prinzipiellen physikalischen Sachverhalte ist es ausreichend, daß wir die eindimensionale Schrödinger-Gleichung unter Einbeziehung einer Rechteckbarriere studieren.

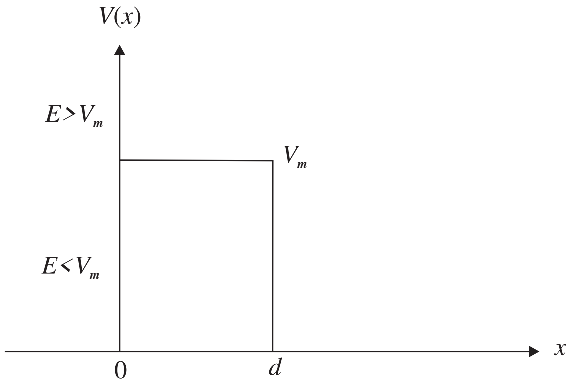


Abbildung 19: Rechtexkpotentialbarriere der Höhe $V_m$ und Breite $d$.

Die eindimensionale Schrödinger-Gleichung, die wir lösen wollen hat in der Ortsdarstellung die Form

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad . \tag{1108}$$

Hierbei gilt für unsere spezielle Potentialstruktur

$$V(x) = V_m \quad \text{für} \quad 0 < x < d \quad , \tag{1109}$$

$$V(x) = 0 \quad \text{für} \quad x < 0 \quad \text{und für} \quad x > d \quad . \tag{1110}$$

Bezüglich der Energie des einfallenden quantenmechanischen Teilchens müssen wir die Fälle $E > V_m$ und $E < V_m$ deutlich unterscheiden. Ein von der Region $x < 0$ einfallendes Teilchen mit $E > V_m$ kann auch im Rahmen der klassischen Physik die Potentialbarriere überwinden und wird daher auch für $x > d$ stets eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit aufweisen. Gilt jedoch $E < V_m$, so kann ein klassisches Teilchen die Potentialbarriere nicht überwinden. Ein klassisches Teilchen wird am Potentialwall reflektiert. Wir werden jedoch zeigen, daß im Gegensatz hierzu ein quantenmechanisches Teilchen als Folge der Unschärferelation sehr wohl mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit auch für $E < V_m$ die Potentialbarriere überwinden kann. Der quantenmechanische Strom für $x > d$ ist von Null verschieden. Das Phänomen wird Tunneleffekt genannt.
Zunächst betrachten wir die Gesamtenergie des Teilchens

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad . \tag{1111}$$

Hieraus folgt für den Impuls

$$p(x) = \pm\sqrt{2m(E - V(x))} \quad . \tag{1112}$$

Je nach Bewegungsrichtung des Teilchens ist das Plus- oder Minuszeichen zu nehmen. Für ein klassisches Teilchen ist die Potenialschwelle absolut undurchlässig für $E < V_m$ und durchlässig für $E > V_m$. Für ein quantenmechanisches Teilchen werden wir hingegen feststellen, daß selbst für $E > V_m$ das Teilchen partiell an der Barriere reflektiert wird sowie für $E < V_m$ die Barriere partiell passieren kann.
In Anlehnung an äquivalente Studien in der Optik führen wir jetzt die folgenden Bezeichnungen ein

$$k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad , \tag{1113}$$

$$k_0^2 n^2(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right] \quad , \tag{1114}$$

wobei $n(x)$ auf einen Brechungsindex hinweisen soll. Aus (1108) bekommen wir mit $\Psi'(x) = d/dx\,\Psi(x)$

$$\Psi''(x) + k_0^2 n^2(x)\,\Psi(x) = 0 \quad . \tag{1115}$$

Wir studieren jetzt die drei Raumbereiche

$$\text{I)} \quad x < 0, \qquad V(x) = 0 \quad , \tag{1116}$$

$$\text{II)} \quad 0 \le x \le d, \quad V(x) = V_m \quad , \tag{1117}$$

$$\text{III)} \quad x > d, \qquad V(x) = 0 \quad . \tag{1118}$$

Entsprechend gilt für die Schrödinger-Gleichung in den drei Bereichen

$$\text{I)} \quad \Psi'' + k_0^2 \Psi = 0 \quad , \tag{1119}$$

$$\text{II)} \quad \Psi'' + k_0^2 n_m^2(x) \Psi = 0 \quad , \tag{1120}$$

$$\text{III)} \quad \Psi'' + k_0^2 \Psi = 0 \quad , \tag{1121}$$

wobei $n_m$ zum Potential $V = V_m$ gehört. Wir können die Lösungen für diese drei Raumbereiche sofort hinschreiben

$$\text{I)} \quad \Psi(x) = A\,e^{ik_0 x} + B\,e^{-ik_0 x} \quad , \tag{1122}$$

$$\text{II)} \quad \Psi(x) = \alpha\,e^{ik_0 n_m x} + \beta\,e^{-ik_0 n_m x} \quad , \tag{1123}$$

$$\text{III)} \quad \Psi(x) = a\,e^{ik_0 x} + b\,e^{-ik_0 x} \quad . \tag{1124}$$

Hierbei sind $A$, $B$, $\alpha$, $\beta$, $a$ und $b$ zunächst beliebige Konstanten. Damit die drei Teillösungen eine einzige Wellenfunktion $\psi(x)$ als Lösung ergeben, müssen die Randbedingungen befriedigt werden, die wir nun aufstellen wollen. An den Sprungstellen des Potentials bei $x = 0$ und $x = d$ fordern wir die Stetigkeit der Wellenfunktion sowie ihrer ersten Ableitung, d.h.

$$\lim_{\epsilon\to 0}\Psi(x=\epsilon) = \lim_{\epsilon\to 0}\Psi(x=-\epsilon) \quad , \tag{1125}$$

$$\lim_{\epsilon\to 0}\Psi(x=d+\epsilon) = \lim_{\epsilon\to 0}\Psi(x=d-\epsilon) \quad , \tag{1126}$$

$$\lim_{\epsilon\to 0}\frac{d\Psi(x=\epsilon)}{dx} = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{d\Psi(x=-\epsilon)}{dx} \quad , \tag{1127}$$

$$\lim_{\epsilon\to 0}\frac{d\Psi(x=d+\epsilon)}{dx} = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{d\Psi(x=d-\epsilon)}{dx} \quad . \tag{1128}$$

Diese Randbedingungen erkennen wir folgendermaßen. Zunächst gehen wir aus von der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \mathrm{div}\vec{j} = 0 \tag{1129}$$

mit

$$w = \Psi^*\Psi \quad , \quad \vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi\vec{\nabla}\Psi^* - \Psi^*\vec{\nabla}\Psi) \quad . \tag{1130}$$

Wir integrieren über den ganzen Raum und wenden den Gaußschen Satz an. Dann haben wir

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} w\, d^3r = -\int_V \mathrm{div}\vec{j}\, d^3r = -\int_F j_N\, dF \quad . \tag{1131}$$

Hierbei bezeichnet $F$ die Oberfläche des Volumens V, über das integriert wird. $j_N$ ist die Normalenkomponente des Stromvektors $\vec{j}$, d.h. die senkrecht auf der Fläche stehende Komponente von $\vec{j}$. Nun ist nach der Schrödinger-Gleichung

$$\int \frac{\partial(\Psi^*\Psi)}{\partial t}\, d^3r = \frac{1}{i\hbar}\int \Psi^*\hat{H}\Psi\, d^3r - \frac{1}{i\hbar}\int \Psi\hat{H}^*\Psi^*\, d^3r \quad . \tag{1132}$$

Aufgrund der Selbstadjungiertheit des Operators $\hat{H}$ folgt aber

$$\int \Psi^*\hat{H}\Psi\, d^3r = \int \Psi\hat{H}^*\Psi^*\, d^3r \tag{1133}$$

und damit, weil

$$\frac{d}{dt}\int \Psi^*\Psi\, d^3r = -\int j_N\, dF = 0 \quad . \tag{1134}$$

Im eindimensionalen Fall haben wir $d^3r = dx$ und $\mathrm{div}\vec{j} = dj_x/dx$. Wir führen die Integration in (1131) aus und lassen dabei den Bereich $(x=0)$ aus, an dem das Potential einen Sprung aufweist. Es folgt

$$j_x(x\to+\infty) - j_x(x=\epsilon) + j_x(x=-\epsilon) - j_x(x\to-\infty) = 0 \quad . \tag{1135}$$

Aus Normierungsgründen muß die Stromdichte $j_x(x\to\pm\infty)$ verschwinden. Damit folgt

$$j_x(x=\epsilon) = j_x(x=-\epsilon) \quad \text{für} \quad \epsilon\to 0 \quad . \tag{1136}$$

Als Bedingung bekommen wir so die erwähnte Stetigkeit der Wellenfunktion und ihre Ableitung an der Potentialsprungstelle. Dies führt uns bezüglich der Wellenfunktionskoeffizienten auf die folgenden Bedingungsgleichungen

$$
\begin{aligned}
A+B &= \alpha+\beta \quad , && (1137)\\
ik_0(A-B) &= ik_0 n_m(\alpha-\beta) \quad , && (1138)\\
\alpha\, e^{ik_0 n_m d}+\beta\, e^{-ik_0 n_m d} &= a\, e^{ik_0 d}+b\, e^{-ik_0 d} \quad , && (1139)\\
ik_0 n_m(\alpha\, e^{ik_0 n_m d}-\beta\, e^{-ik_0 n_m d}) &= ik_0(a\, e^{ik_0 d}-b\, e^{-ik_0 d}) \quad . && (1140)
\end{aligned}
$$

Wir haben somit vier algebraische Gleichungen zur Festlegung der sechs willkürlichen Konstanten vorliegen. Die Willkür erklärt sich partiell dadurch, daß wir sowohl Wellen vorliegen haben können, die von rechts oder von links auf die Barriere auftreffen. Nehmen wir z.B. $A, B \neq 0, b=0$, dann kann $A\, e^{ik_0 x}$ als die einfallende, $B\, e^{-ik_0 x}$ als die reflektierte Welle und $a\, e^{ik_0 x}$ als die hindurchgehende Welle aufgefaßt werden. Hätten wir $b \neq 0$ angenommen, so hätte das bedeutet, daß auch auf der anderen Seite der Schwelle eine Welle einfällt. Das entspricht in der klassischen Mechanik der Tatsache, daß sich die Teilchen von links oder von rechts auf die Schwelle zu bewegen können. Wir untersuchen jetzt den Fall eines von links kommenden Teilchens. Dann setzen wir $b=0$. Als sechste und letzte Bedingung können wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit als Normierungsbedingung die Amplitude der einfallenden Welle willkürlich gleich Eins setzen, d.h. $A=1$. Dann haben wir die folgenden Bedingungsgleichungen vorliegen

$$
\begin{aligned}
1+B &= \alpha+\beta \quad , && (1141)\\
1-B &= n_m(\alpha-\beta) \quad , && (1142)\\
\alpha\, e^{ik_0 n_m d}+\beta\, e^{-ik_0 n_m d} &= a\, e^{ik_0 d} \quad , && (1143)\\
n_m(\alpha\, e^{ik_0 n_m d}-\beta\, e^{-ik_0 n_m d}) &= a\, e^{ik_0 d} \quad . && (1144)
\end{aligned}
$$

Wir lösen diese vier algebraischen Gleichungen auf und finden

$$
\begin{aligned}
\alpha &= \frac{-2\, e^{ik_0 n_m d}\,(1+n_m)}{e^{-ik_0 n_m d}\,(1+n_m)^2-e^{ik_0 n_m d}\,(1-n_m)^2} \quad , && (1145)\\
\beta &= \frac{-2\, e^{ik_0 n_m d}\,(1-n_m)}{e^{-ik_0 n_m d}\,(1+n_m)^2-e^{ik_0 n_m d}\,(1-n_m)^2} \quad , && (1146)\\
B &= \frac{(e^{-ik_0 n_m d}-e^{ik_0 n_m d})(1-n_m^2)}{e^{-ik_0 n_m d}\,(1+n_m)^2-e^{ik_0 n_m d}\,(1-n_m)^2} \quad , && (1147)\\
a\, e^{ik_0 d} &= \frac{4n_m}{e^{-ik_0 n_m d}\,(1+n_m)^2-e^{ik_0 n_m d}\,(1-n_m)^2} \quad . && (1148)
\end{aligned}
$$

Dies kann sofort verifiziert werden, indem man diese Lösungen in die obigen Bedingungsgleichungen einsetzt.
Für die Größe $n^2(x)$ hatten wir

$$
n^2(x) = \frac{E-V(x)}{E} = 1-\frac{V_m}{E} \qquad (1149)
$$

und damit

$$n(x) = n_m = \sqrt{1 - \frac{V_m}{E}} \tag{1150}$$

Für $E > V_m$ ist die Größe $n_m$ reell. In diesem Fall ist die Intensität $|B|^2$ der reflektierten Welle

$$\begin{aligned}
|B|^2 &= \frac{(e^{-ik_0n_md} - e^{ik_0n_md})(1-n_m^2)}{e^{-ik_0n_md}\,(1+n_m)^2 - e^{ik_0n_md}\,(1-n_m)^2} \cdot \\
& \quad \frac{(e^{ik_0n_md} - e^{-ik_0n_md})\,(1-n_m^2)}{e^{ik_0n_md}\,(1+n_m)^2 - e^{-ik_0n_md}\,(1-n_m)^2} \\
&= \frac{(-e^{-2ik_0n_md} - e^{2ik_0n_md} + 2)(1-n_m^2)^2}{(1+n_m)^4 + (1-n_m)^4 - (e^{-2ik_0n_md} + e^{2ik_0n_md})(1-n_m)^2(1+n_m)^2} \\
&= \frac{2(1-\cos(2k_0n_md))(1-n_m^2)^2}{(1+n_m)^4 + (1-n_m)^4 - 2(1-n_m^2)^2\cos(2k_0n_md)} \\
&= \frac{4(1-n_m^2)^2\sin^2(k_0n_md)}{(1+n_m)^4 + (1-n_m)^4 - 2(1-n_m^2)^2\cos(2k_0n_md)} \quad .
\end{aligned} \tag{1151}$$

Hierbei haben wir von der trigonometrischen Relation

$$\cos 2x = \cos^2 x - \sin^2 x \tag{1152}$$

Gebrauch gemacht. Für die durchgehende Welle finden wir vollkommen analog

$$|a|^2 = \frac{16\,n_m^2}{(1+n_m)^4 + (1-n_m)^4 - 2(1-n_m^2)^2\cos(2k_0n_md)} \quad . \tag{1153}$$

Wir betrachten jetzt die Stromdichte

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi\vec{\nabla}\Psi^* - \Psi^*\vec{\nabla}\Psi) \quad . \tag{1154}$$

Mit diesem Ausdruck erhalten wir nun für die Stromdichte $j_0$ der einfallenden Welle

$$j_0 = \frac{\hbar k_0}{m}|A|^2 = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m} = v_0 \quad . \tag{1155}$$

Für die Stromdichte $j_r$ der reflektierten Welle folgt

$$j_r = -\frac{\hbar k_0}{m}|B|^2 \quad . \tag{1156}$$

Für die Stromdichte $j_t$ der durchgehenden Welle resultiert

$$j_t = \frac{\hbar k_0}{m}|a|^2 \quad . \tag{1157}$$

Der Index $t$ steht hierbei abkürzend für Transmission. Das Verhältnis zwischen der Stromdichte der reflektierten zu dem der einfallenden Teilchen heißt Reflektionskoeffizient,

$$R = \frac{|j_r|}{j_0} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = |B|^2 \quad . \tag{1158}$$

Das Verhälnis zwischen dem Strom der durchgehenden zu dem der einfallenden Teilchen heißt der Transmissionskoeffizient oder Durchlässigkeitskoeffizient

$$T = \frac{j_t}{j_0} = \frac{|a|^2}{|A|^2} = |a|^2 \quad . \tag{1159}$$

Aus dem Erhaltungssatz für die Teilchenzahl oder der Kontinuitätsgleichung folgt

$$R + T = 1 \tag{1160}$$

oder

$$|B|^2 + |a|^2 = 1 \quad . \tag{1161}$$

Wir verifizieren dies explizit

$$\frac{2(1-n_m^2)^2 - 2(1-n_m^2)^2\cos(2k_0n_md) + 16n_m^2}{(1+n_m)^4 + (1-n_m)^4 - 2(1-n_m^2)^2\cos(2k_0n_md)} \stackrel{!}{=} 1 \quad . \tag{1162}$$

Also muß gelten

$$2(1-n_m^2)^2 + 16n_m^2 = (1+n_m)^4 + (1-n_m)^4 \tag{1163}$$

und somit

$$\begin{aligned} 2(1-2n_m^2+n_m^4) + 16n_m^2 &= 2n_m^4 + 12n_m^2 + 2 \\ &= (1+2n_m+n_m^2)^2 + (1-2n_m+n_m^2)^2 \\ &= (1+4n_m^2+n_m^4+4n_m+2n_m^2+4n_m^3) + \\ &\quad\ (1+4n_m^2+n_m^4-4n_m+2n_m^2-4n_m^3) \\ &= 2n_m^4 + 12n_m^2 + 2 \quad . \end{aligned} \tag{1164}$$

Für $E > V_m$ muß nach der klassischen Mechanik $R = 0$ und $T = 1$ sein. Die Schwelle ist ohne Einschränkungen durchlässig. In der Quantenmechanik haben wir aber $|B|^2 \neq 0$, daher ist in der Quantenmechanik $R > 0$ und $T < 1$. Die Teilchen werden zum Teil ebenso reflektiert wie Lichtwellen an der Grenze zweier Medien.

Ist die Teilchenenergie $E$ kleiner als die Höhe der Schwelle $V_m$, so findet nach der klassischen Mechanik eine Totalreflexion statt: $T = 0, R = 1$. Die Teilchen dringen dabei überhaupt nicht in die Schwelle ein. Für $E < V_m$ schreiben wir für $n_m$ noch

$$n_m = \sqrt{1 - \frac{V_m}{E}} = i\sqrt{\frac{V_m}{E} - 1} = i|n_m| \quad . \tag{1165}$$

Dies setzen wir in (1148) ein. Es folgt

$$a\, e^{ik_0 d} = \frac{4i|n_m|}{e^{k_0|n_m|d}(1 + i|n_m|)^2 - e^{-k_0|n_m|d}(1 - i|n_m|)^2} \quad . \tag{1166}$$

Wir ermitteln jetzt hieraus den Transmissionskoeffizienten

$$T = |a|^2 = \frac{16\,|n_m|^2}{e^{k_0|n_m|d}(1 + i|n_m|)^2 - e^{-k_0|n_m|d}(1 - i|n_m|)^2} \cdot \frac{1}{e^{k_0|n_m|d}(1 - i|n_m|)^2 - e^{-k_0|n_m|d}(1 + i|n_m|)^2} =$$
$$\frac{16\,|n_m|^2}{e^{2k_0|n_m|d}(1 + |n_m|^2)^2 + e^{-2k_0|n_m|d}(1 + |n_m|^2)^2 - (1 + i|n_m|)^4 - (1 - i|n_m|)^4}$$

Jetzt ist

$$\begin{aligned} (1 \pm i|n_m|)^4 &= (1 \pm 2i|n_m| - |n_m|^2)^2 \\ &= 1 - 4|n_m|^2 + |n_m|^4 \pm 4i|n_m| - 2|n_m|^2 \pm 4i|n_m|^3 \\ &= |n_m|^4 \pm 4i|n_m|^3 - 6|n_m|^2 \pm 4i|n_m| + 1 \quad . \end{aligned} \tag{1167}$$

Somit haben wir

$$T = \frac{16\,|n_m|^2}{(1 + |n_m|^2)^2(e^{2k_0|n_m|d} + e^{-2k_0|n_m|d}) - |n_m|^4 + 6|n_m|^2 - 1} \quad . \tag{1168}$$

Jetzt nehmen wir an, daß gilt

$$e^{2k_0|n_m|d} \gg 1 \quad . \tag{1169}$$

Dann bekommen wir

$$T = \frac{16\,|n_m|^2}{(1 + |n_m|^2)^2}\, e^{-2k_0|n_m|d} \quad . \tag{1170}$$

Wir bezeichnen den Vorfaktor vor der Exponentialfunktion mit $T_0$,

$$T_0 = \frac{16|n_m|^2}{(1+|n_m|^2)^2} \tag{1171}$$

und schreiben weiter

$$k_0|n_m| = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}\sqrt{\frac{V_m}{E}-1} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_m-E)} \quad . \tag{1172}$$

Somit gilt

$$T = T_0\, e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(V_m-E)}\,d} \quad . \tag{1173}$$

Im Gegensatz zu den Schlußfolgerungen der klassischen Mechanik durchdringen also die Teilchen auch für $E < V_m$ die Schwelle. Das Phänomen des Durchgangs durch eine Potentialschwelle bezeichnet man als Tunneleffekt. Offensichtlich tritt der Tunneleffekt nur dann merklich auf, wenn gilt

$$\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(V_m-E)}\,d \approx 1 \quad . \tag{1174}$$

Damit tritt der Tunneleffekt zumeist nur in atomaren Erscheinungen auf.

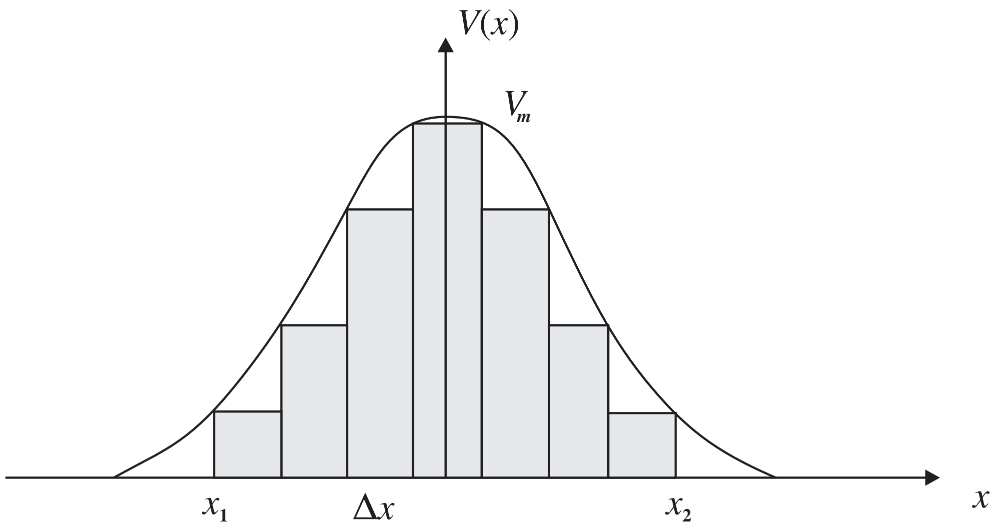


Abbildung 20: Allgemeine Potentialschwelle und Approximation durch endlich viele Rechteckschwellen.

Wir wollen nun die vereinfachende Annahme einer Rechteckpotentialbarriere fallen lassen und eine allgemeine Potentialschwelle studieren. Diese Potentialschwelle approximieren wir duch eine Ansammlung von Rechteckschwellen. Für den Transmissionskoeffizienten für den Durchgang durch eine dieser Schwellen gilt

$$T' = T'_0 \; e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(V(x)-E)}\Delta x} \quad . \tag{1175}$$

Für den Transmissionskoeffizienten für den Durchgang durch all diese einzelnen Schwellen nehmen wir nun an, daß er gerade durch das Produkt der einzelnen Transmissionskoeffizienten gegeben ist. Wir nutzen die Riemannsche Definition des Integrals aus und bekommen schließlich

$$T = T_0 \; \exp\left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(V(x)-E)}\, dx \right\} \quad . \tag{1176}$$

Der Tunneleffekt ist eine typisch quantenmechanische Erscheinung. Für $\hbar \to 0$ verschwindet der Tunneleffekt. Der Tunneleffekt erscheint zunächst paradox. Für die Gesamtenergie schreiben wir

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad , \tag{1177}$$

also muß für $V(x) > E$ gelten

$$\frac{p^2}{2m} < 0 \tag{1178}$$

und somit müßte $p$ imaginär sein. Diese Aufspaltung in potentielle und kinetische Energie macht aber im Tunnelbereich nicht ungedingt Sinn, da sie anderen Grundprinzipien der Quantenmechanik widerspricht. Die gleichzeitige Bestimmung der potentiellen Energie und der kinetischen Energie erfordert die eindeutige gleichzeitige Festlegung von Ort und Impuls, was nach der Heisenbergschen Unschärferelation nicht möglich ist. Mit der Festlegung des Raumbereiches $\Delta x = d$ haben wir nach der Unschärferelation

$$\overline{\Delta p^2} > \frac{\hbar^2}{4\overline{\Delta x^2}} = \frac{\hbar^2}{4d^2} \quad . \tag{1179}$$

Mit $d$ aus (1174) finden wir

$$\frac{\overline{\Delta p^2}}{2m} > V_m - E \quad . \tag{1180}$$

Durch die Festlegung des Ortes wird unvermeidlich eine Impulsschwankung bewirkt. Dabei ist die Änderung der kinetischen Energie des Teilchens größer als die Energie, die dem Teilchen bis zur Höhe $V_m$ der Potentialschwelle fehlt.

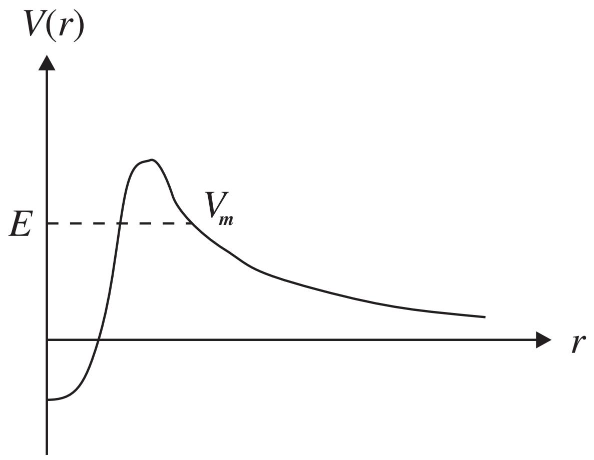


Abbildung 21: Die potentielle Energie des $\alpha$-Teilchens als Funktion des Abstands vom Kern.

## Die Theorie des $\alpha$-Zerfalls

Bekanntlich zerfallen viele radioaktive Elemente unter Emission von $\alpha$-Teilchen. Das $\alpha$-Teilchen ist der Atomkern des Elements Helium mit der Ordnungszahl 2 und besteht aus zwei Protonen und zwei Neutronen. Nach Verlassen des Atomkerns wird das $\alpha$-Teilchen im Coulomb–Feld des Restkerns oder Tochterkerns beschleunigt. Der Tochterkern habe die Ladung $Z$, also ist

$$Z = Z' - 2 \quad , \tag{1181}$$

wenn $Z'$ die Protonenzahl des ursprünglichen radioaktiven Kerns ist. Die potentielle Energie, die das $\alpha$-Teilchen spürt, hat qualitativ den in der Abbildung (21) gezeigten Verlauf.
Im Coulomb–Feld des Kerns lautet die potentielle Energie

$$V(r) = \frac{2Ze^2}{r} \quad \text{für } r > R_{\text{nuc}} \quad , \tag{1182}$$

wobei $R_{\text{nuc}}$ den Kernradius angibt. Für $R_{\text{nuc}}$ gilt näherungsweise

$$R_{\text{nuc}} = r_0 \, A^{1/3} \quad , \tag{1183}$$

wobei $A$ die Massenzahl des Atomkerns angibt und $r_0 = 1.2\,\text{fm} = 1.2 \cdot 10^{-15}\,\text{m}$ ist. Für sehr schwere Kerne mit $A \simeq 200$ folgt näherungsweise $R_{\text{nuc}} \simeq 7\,\text{fm}$. Aufgrund der gleichnamigen Ladung von $\alpha$-Teilchen und Tochterkern ist die potentielle Energie außerhalb des Atomkerns positiv. Am Kernrand spürt das $\alpha$-Teilchen auch die attraktiven Kernkräfte, die zu einer Potentialmulde führen. Das $\alpha$-Teilchen ist ursprünglich im Mutterkern in dieser Potentialmulde gebunden. Hat das $\alpha$-Teilchen im Mutterkern eine Energie $E > 0$, so kann es prinzipiell den Potentialberg durchtunneln, und der Kern zerfällt radioaktiv. Umgekehrt kann natürlich auch ein $\alpha$-Teilchen von großen Abständen herankommend selbst für Energien $E < V_m$ den Potentialberg durchtunneln und mit dem Atomkern fusionieren. Dies ist der dominante Prozeß für die Elementsynthese im Universum. Es wird hierbei der Potentialberg, Coulomb–Wall genannt, durchtunnelt. Wir betrachten nun die elementarste Theorie des radioaktiven Zerfalls. Ist die Zahl der nichtzerfallenden Atome zum Zeitpunkt $t$ gleich $N$, so wird im Laufe der Zeit $dt$ die Änderung der Zahl der Atome oder das Negative der Zahl der zerfallenden Atome den Wert

$$dN = -\lambda \, N \, dt \tag{1184}$$

annehmen. Die Proportionalitätskonstante $\lambda$ ist die Zerfallskonstante. Die Aufintegration ergibt sofort

$$N(t) = N(0)\, e^{-\lambda t} \quad . \tag{1185}$$

Die Zerfallskonstante $\lambda$ hat die Dimension einer inversen Zeit,

$$\dim \lambda = s^{-1} \quad . \tag{1186}$$

Um $\lambda$ zu berechnen werden wir die Quantentheorie des Tunneleffekts anwenden. Als ersten etwas naiven Ansatz stellt man sich vor, daß das $\alpha$-Teilchen im Kern mit der Geschwindigkeit $v$ zwischen den Potentialwänden hin und her springt. Bei jedem Stoß an die Potentialwand durchdringt es diese mit der Tunnelwahrscheinlichkeit gegeben durch den Transmissionskoeffizienten $T$. $T$ hängt dabei von der Energie des $\alpha$-Teilchen ab, $T = T(E)$. Die Zeit zwischen zwei Wandstößen des $\alpha$-Teilchens ist gegeben durch

$$t_0 = \frac{2R_{\text{nuc}}}{v} \quad \text{mit}\ v = \sqrt{\frac{2E}{m}} \quad . \tag{1187}$$

Das $\alpha$-Teilchen benötigt im Mittel $1/T$ Stöße, um den Potentialberg zu durchtunneln. Für die Lebensdauer $\tau$ beim $\alpha$-Zerfall setzen wir daher

$$\tau = \frac{t_0}{T} \tag{1188}$$

an, und die Zerfallskonstante ist gerade

$$\lambda = \frac{1}{\tau} \quad . \tag{1189}$$

Damit folgt

$$\lambda = \frac{v}{2R_{\text{nuc}}} T_0 \, \exp\left( -\frac{2}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m\,(V(r) - E)}\, dr \right) \quad . \tag{1190}$$

$m$ ist die Masse des $\alpha$-Teilchens. Es verbleibt noch die Festlegung der Integralgrenzen $r_1$ und $r_2$. $r_1$ setzen wir gleich dem Kernradius $R_{\text{nuc}}$, das heißt

$$r_1 = R_{\text{nuc}} \quad . \tag{1191}$$

$r_2$ folgt aus der Bedingung

$$\frac{2Ze^2}{r_2} = E \tag{1192}$$

und somit

$$r_2 = \frac{2Ze^2}{E} \quad . \tag{1193}$$

Jetzt können wir das Tunnelintegral auswerten. Wir betrachten das Integral

$$
\begin{aligned}
I &= \int_{R_{\text{nuc}}}^{r_2} \sqrt{2m\left(\frac{2Ze^2}{r} - E\right)}\, dr \\
&= \sqrt{2mE} \int_{R_{\text{nuc}}}^{r_2} \sqrt{\frac{2Ze^2}{E\,r} - 1}\, dr \quad .
\end{aligned}
\tag{1194}
$$

Dieses Integral läßt sich elementar lösen. Wir substituieren

$$
\frac{E\,r}{2Ze^2} = \sin^2 u \quad . \tag{1195}
$$

Somit erhalten wir

$$
dr = 2\,\frac{2Ze^2}{E}\,\sin u\,\cos u\, du \quad . \tag{1196}
$$

Aus $r_2$ wird die Integralgrenze $u_2 = \pi/2$ und somit $\sin^2 u_2 = 1$. Aus der Integralgrenze $r_1 = R_{\text{nuc}}$ wird nach (1195)

$$
u_1 = \arcsin \sqrt{\frac{E R_{\text{nuc}}}{2Ze^2}} \quad . \tag{1197}
$$

Für das Integral $I$ haben wir damit

$$
\begin{aligned}
I &= \sqrt{2mE}\,\frac{4Ze^2}{E} \int_{u_1}^{u_2} \sqrt{\frac{1}{\sin^2 u} - 1}\,\sin u\,\cos u\, du \\
&= \sqrt{2mE}\,\frac{4Ze^2}{E} \int_{u_1}^{\pi/2} \sqrt{\frac{\sin^2 u + \cos^2 u - \sin^2 u}{\sin^2 u}}\,\sin u\,\cos u\, du \\
&= \sqrt{2mE}\,\frac{4Ze^2}{E} \int_{u_1}^{\pi/2} \frac{\cos u}{\sin u}\,\sin u\,\cos u\, du \\
&= \sqrt{2mE}\,\frac{4Ze^2}{E} \int_{u_1}^{\pi/2} \cos^2 u\, du \quad .
\end{aligned}
\tag{1198}
$$

Wir führen das Integral aus, und es folgt

$$
\begin{aligned}
I &= \sqrt{2mE}\,\frac{4Ze^2}{E}\left(\frac{1}{2}\,u + \frac{1}{4}\,\sin 2u\right)\Bigg|_{u_1}^{\pi/2} \\
&= \sqrt{2mE}\,\frac{2Ze^2}{E}\left(\frac{\pi}{2} - u_1 - \frac{1}{2}\,\sin 2u_1\right) \\
&= \sqrt{2mE}\,\frac{2Ze^2}{E}\left(\frac{\pi}{2} - u_1 - \sin u_1\,\cos u_1\right) \quad .
\end{aligned}
\tag{1199}
$$

Erneut haben wir ausgenutzt, daß gilt

$$
\sin 2x = 2\,\sin x\,\cos x \quad . \tag{1200}
$$

Es resultiert weiter

$$
\begin{aligned}
I &= \sqrt{2mE}\,\frac{2Ze^2}{E} \\
&\quad \times \left(\frac{\pi}{2} - \arcsin\sqrt{\frac{ER_{\text{nuc}}}{2Ze^2}} - \sqrt{\frac{ER_{\text{nuc}}}{2Ze^2}}\sqrt{1 - \frac{ER_{\text{nuc}}}{2Ze^2}}\right) \\
&= \sqrt{2mE}\,\frac{2Ze^2}{E} \\
&\quad \times \left(\frac{\pi}{2} - \arcsin\sqrt{\frac{ER_{\text{nuc}}}{2Ze^2}} - \sqrt{\frac{ER_{\text{nuc}}}{2Ze^2}\left(1 - \frac{ER_{\text{nuc}}}{2Ze^2}\right)}\right) \quad . \qquad (1201)
\end{aligned}
$$

Jetzt ist oftmals $r_1/r_2 \ll 1$ und damit

$$
\frac{ER_{\text{nuc}}}{2Ze^2} \ll 1 \quad . \qquad (1202)
$$

Somit können wir approximieren

$$
\arcsin\sqrt{\frac{ER_{\text{nuc}}}{2Ze^2}} \approx \sqrt{\frac{ER_{\text{nuc}}}{2Ze^2}} \quad . \qquad (1203)
$$

Somit resultiert näherungsweise

$$
I = \sqrt{2mE}\,\frac{2Ze^2}{E}\left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{ER_{\text{nuc}}}{2Ze^2}}\right) \quad . \qquad (1204)
$$

Damit haben wir

$$
\begin{aligned}
\lambda &= \frac{v}{2R_{\text{nuc}}}\,T_0\,\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2mE}\,\frac{2Ze^2}{E}\left(\frac{\pi}{2} - 2\sqrt{\frac{ER_{\text{nuc}}}{2Ze^2}}\right)\right) \\
&= \frac{v}{2R_{\text{nuc}}}\,T_0\,\exp\left(-\frac{\pi}{\hbar}\sqrt{2m}\,\frac{2Ze^2}{\sqrt{E}} + \frac{8}{\hbar}\sqrt{Ze^2}\sqrt{mR_{\text{nuc}}}\right) \quad . \qquad (1205)
\end{aligned}
$$

Jetzt ist

$$
\sqrt{E} = \sqrt{\frac{m}{2}}\,v \quad . \qquad (1206)
$$

Somit folgt

$$
\ln\lambda = -\frac{4\pi}{\hbar}\,\frac{Ze^2}{v} + \frac{8}{\hbar}\sqrt{Ze^2\,mR_{\text{nuc}}} + \ln\left(\frac{v\,T_0}{2R_{\text{nuc}}}\right) \quad . \qquad (1207)
$$

Dies ist die Geiger–Nutall–Formel für die Zerfallskonstante beim $\alpha$-Zerfall. Charakteristisch ist hierbei die Abhängigkeit von der Geschwindigkeit $v$ des $\alpha$-Teilchens und von der Ordnungszahl $Z$ des Tochterkerns.

## Das magnetische Moment

Liegt ein homogenes, statisches Magnetfeld $\vec{B}_0$ vor, so läßt sich dieses durch das Vektorpotential

$$\vec{A}(\vec{r}) = -\frac{1}{2}\,(\vec{r} \times \vec{B}_0) \tag{1208}$$

darstellen. Die Rotation dieses Ausdrucks führt sofort wieder auf $\vec{B}_0$. Wir setzen dies in die Hamilton–Funktion

$$H(\vec{r},\vec{p},t) = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\,\vec{A}(\vec{r},t)\right)^2 + e\,\Phi(\vec{r},t) \tag{1209}$$

ein. Durch Einsetzen des Vektorpotentials erhalten wir den magnetischen Beitrag

$$H_m = -\frac{e}{2mc}\,\vec{B}_0 \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) + \frac{e^2}{8mc^2}\,(\vec{r} \times \vec{B}_0)^2 \quad . \tag{1210}$$

Der erste Term folgt explizit aus

$$\frac{e}{2mc}\left(\frac{1}{2}\,\vec{p} \cdot (\vec{r} \times \vec{B}_0) + \frac{1}{2}\,(\vec{r} \times \vec{B}_0) \cdot \vec{p}\right) = -\frac{e}{2mc}\left(\vec{B}_0 \cdot (\vec{r} \times \vec{p})\right) \quad . \tag{1211}$$

Jetzt ist

$$\vec{r} \times \vec{p} = \vec{L} \tag{1212}$$

und

$$(\vec{r} \times \vec{B}_0)^2 = -\left(\vec{r} \times (\vec{r} \times \vec{B}_0)\right) \cdot \vec{B}_0 \quad . \tag{1213}$$

Damit können wir schreiben

$$H_m = -\frac{e}{2mc}\,\vec{L} \cdot \vec{B}_0 - \frac{e^2}{8mc^2}\left(\vec{r} \times (\vec{r} \times \vec{B}_0)\right) \cdot \vec{B}_0 \quad . \tag{1214}$$

Nun ist die Energie eines permanenten magnetischen Dipols $\vec{m}$ in einem äußeren Magnetfeld $\vec{B}_0$ gerade $(-\vec{m} \cdot \vec{B}_0)$. Daher identifizieren wir das magnetische Bahnmoment mit

$$\vec{m}_L = \frac{e}{2mc}\,\vec{L} \quad . \tag{1215}$$

Magnetisches Moment und Bahndrehimpuls sind parallel. Weil die Energie eines induzierten Moments $(-\frac{1}{2}\,\vec{m}_{\text{ind}} \cdot \vec{B}_0)$ beträgt, bezeichnen wir die Größe

$$\vec{m}_{\text{ind}}(\vec{B}_0) = \frac{e^2}{4mc^2}\left(\vec{r} \times (\vec{r} \times \vec{B}_0)\right) \tag{1216}$$

als induziertes magnetisches Moment. Für die klassische Hamilton–Funktion erhalten wir somit

$$H_m = -\vec{m}_L \cdot \vec{B}_0 - \frac{1}{2}\,\vec{m}_{\text{ind}} \cdot \vec{B}_0 \quad . \tag{1217}$$

In der Quantentheorie gilt nach dem Korrespondenzprinzip

$$\hat{\vec{m}}_L = \frac{e}{2mc}\,\hat{\vec{L}} \quad . \tag{1218}$$

Die nicht gleichzeitige Meßbarkeit der einzelnen Komponenten des Drehimpulses überträgt sich daher auf das magnetische Moment. Man kann gleichzeitig nur eine Komponente und den Betrag messen. Eine Komponente des permanenten magnetischen Moments $\vec{m}_L$ hat daher die $(2l+1)$ Eigenwerte

$$\frac{e\,\hbar}{2mc}\,m_l \quad \text{mit} \quad m_l = l, \ldots, -l \quad . \tag{1219}$$

Die Größe

$$\mu_B = \frac{e\,\hbar}{2mc} \tag{1220}$$

mit der Masse des Elektrons $m$ nennt man das Bohrsche Magneton.

Auch der Spin des geladenen Elementarteilchens ist mit einem magnetischen Moment $\vec{m}_s$ verknüpft. Jedoch ist die Proportionalitätskonstante zwischen $\vec{m}_s$ und dem Spin $\vec{S}$ anders als beim Drehimpuls in der Schrödinger–Theorie. Es gilt

$$\hat{\vec{m}}_s = g_s\,\frac{e}{2mc}\,\hat{\vec{S}} \quad . \tag{1221}$$

Die Zahl $g_s$ nennt man gyromagnetischen Faktor. Nach der relativistischen Dirac–Gleichung folgt

$$g_s = 2 \quad . \tag{1222}$$

Die Quantenelektrodynamik liefert hierzu weitere Korrekturen. Mit

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \tag{1223}$$

folgt

$$g_s = 2\left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \ldots\right) \quad . \tag{1224}$$

Die Korrektur $(\alpha/2\pi + \ldots)$ nennt man das anomale magnetische Moment. Diese Korrektur ist für das Elektron mit ca. 12 Stellen Genauigkeit gemessen worden. Für die Bausteine des Atomkerns, die Protonen und Neutronen, die ebenfalls den Spin $s = 1/2$ besitzen, gilt hingegen

$$g_s^p = 5.59 \quad \text{und} \quad g_s^n = -3.83 \quad . \tag{1225}$$

Hier spielt für die Festlegung des $g$-Faktors die innere Struktur von Protonen und Neutronen, die aus Quarks und Gluonen aufgebaut sind, eine wesentliche Rolle.

Wir wollen nun überlegen, welchen Effekt das Spinmoment eines Elektrons bewirkt. Dazu bringen wir zum Beispiel das Wasserstoffatom mit einem $s$-Elektron, das heißt $l = 0$ und $s = 1/2$, in ein Magnetfeld $\vec{B}$. Der Hamilton–Operator dieses Elektrons hat dann die Gestalt

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 - (\hat{\vec{m}}_s \cdot \vec{B}) \quad . \tag{1226}$$

Dabei ist $\hat{\mathcal{H}}_0$ der Hamilton–Operator ohne Magnetfeld und $(-\hat{\vec{m}}_s \cdot \vec{B})$ der Hamilton–Operator des Spinmoments im Feld. Das Bahndrehmoment liefert wegen $l = 0$ keinen Beitrag. Die Eigenwerte des Spins $\vec{s}$ sind $\pm 1/2$. Somit folgt für den Hamilton–Operator (1226) als Energie

$$E = E_0 \pm g_s \frac{\mu_B}{2} B \quad . \tag{1227}$$

Der Eigenwert $E_0$, der wegen des Spins ohne Magnetfeld zweifach entartet ist, spaltet im Magnetfeld in zwei Terme mit dem Abstand $g_s \mu_B B$ auf. Diese Aufspaltung der atomaren Energiezustände nennt man Zeeman–Effekt.

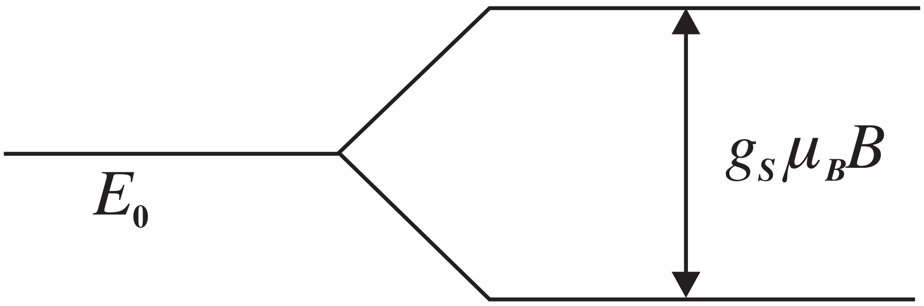


Abbildung 22: Aufspaltung atomarer Energieeigenzustände im äußeren Magnetfeld.

# Spin

## Kurze Wiederholung: Bahndrehimpuls

- Definition :

$$\hat{\vec{L}} := \vec{r} \times \vec{p} \tag{1228}$$

- Vertauschungsrelationen :

$$\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y\right] = i\hbar \hat{L}_z \quad \text{usw.} \tag{1229}$$

Kurz :

$$\begin{aligned} \left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] &= i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \ , && (1230) \\ \left[\hat{L}_i, \hat{\vec{L}}^2\right] &= 0 \ . && (1231) \end{aligned}$$

- Gleichzeitig meßbar sind $\hat{\vec{L}}^2$ und eine Komponente ( meist $\hat{L}_z$ ).
- Eigenwerte:
  - Aufgrund der Vertauschungsrelationen sind zulässig
    * für $\hat{\vec{L}}^2$ : $l(l+1)\hbar^2$, mit $l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$
    * für $\hat{L}_z$, bei vorgegebenem $l$ : $m\hbar$, mit $m = -l, -l+1, \ldots, l$, also $2l+1$ mögliche Werte.

    $\Rightarrow$ Eigenzustände $|lm\rangle$.
  - Tatsächlich angenommen werden vom Bahndrehimpuls aber nur ganzzahlige $l = 0, 1, 2, \ldots$ .

    Grund :
    In der Ortsdarstellung sind die Eigenzustände $|lm\rangle$ beschrieben durch Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ mit

    $$\hat{L}_z \, Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = m\hbar \, Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \ . \tag{1232}$$

    Drehung um die $z$–Achse um einen Winkel $\alpha$ liefert eine Phase

    $$\begin{aligned} Y_{lm}(\vartheta, \varphi + \alpha) &= e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \hat{L}_z} \, Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \\ &= e^{-im\alpha} \, Y_{lm}(\vartheta, \varphi) && (1233) \end{aligned}$$

    Wenn wir Eindeutigkeit der Wellenfunktion fordern,

    $$Y_{lm}(\vartheta, \varphi + 2\pi) = Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \ , \tag{1234}$$

    dann folgt, daß $m$ ( und somit $l$ ) ganzzahlig sein muß.

- Mit dem Bahndrehimpuls $\hat{\vec{L}}$ verknüpft ist ein magnetisches Moment

$$\hat{\vec{M}} = \frac{q}{2m}\,\hat{\vec{L}} \tag{1235}$$

mit dem Bohr Magneton $q/2m$. Hierbei sind $q$ und $m$ die Ladung und Masse des Elektrons. Klassische Herleitung :

$$\begin{aligned} \vec{M} &= \frac{1}{2}\int dV\, \vec{r}\times\vec{j}\,, \\ \vec{j} &= \rho\vec{v} = \frac{\rho}{m}\vec{p}\,, \\ \Rightarrow\quad \vec{M} &= \frac{1}{2m}\int dV\,\rho\vec{r}\times\vec{p} = \frac{\varrho}{2m}\vec{L}\,. \end{aligned} \tag{1236}$$

- Die Energie eines magnetischen Dipols mit magnetischem Moment $\vec{M}$ in einem äußeren Magnetfeld $\vec{B}$ ist

$$H_{\text{Dipol}} = -\vec{B}\cdot\vec{M}\ . \tag{1237}$$

## Experimentelle Hinweise auf Spin

1. Stern–Gerlach–Experiment

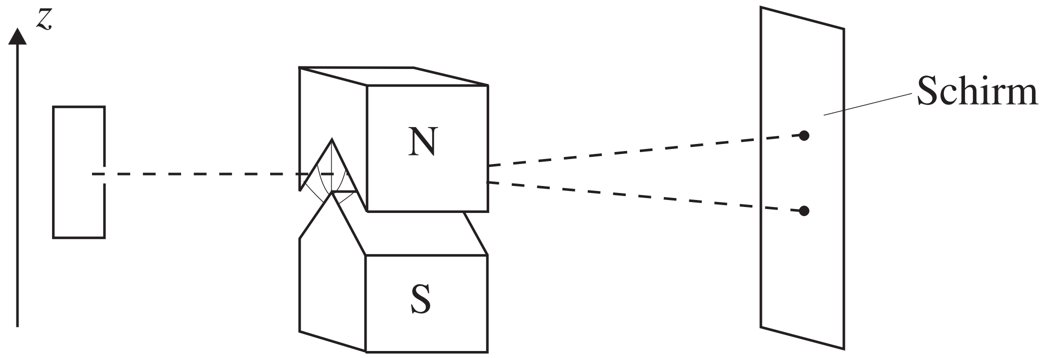


Abbildung 23: Schematische Darstellung des Stern-Gerlach Experiments. Links zeigt die gestrichelte Linie den Strahl von Wasserstoff-Atomen im 1s-Grundzustand (im Originalexperiment: Silber-Atome), sie sollten keinen Bahndrehimpuls haben. Das starke inhomogene Magnetfeld $\vec{B}$ übt auf einen magnetischen Dipol die Kraft aus $\vec{F} = -\vec{\nabla}H_{\text{Dipol}} = \vec{\nabla}(\vec{B}\cdot\vec{M}) \approx \partial B_z/\partial z\, M_z$.

Beobachte

- Aufspaltung in zwei Strahlen (symmetrisch, gleiche Intensität) $\Rightarrow$ 2 unterschiedliche Werte für $M_z$.

- Das magnetische Moment kann nicht vom Bahndrehimpuls herrühren, da $l = 0$. Selbst, wenn $l \neq 0$, würde man immer eine Aufspaltung in $(2l + 1)$ = ungerade Zahl von Strahlen erwarten.

2. Multiplettstruktur

   - Nach der einfachen Theorie des Wasserstoffatoms ohne Spin sollte der $2p$–Zustand $(l = 1)$ $\quad 2l + 1 = 3$–fach entartet sein.
     Tatsächlich beobachtet man jedoch ein <u>Dublett</u> :

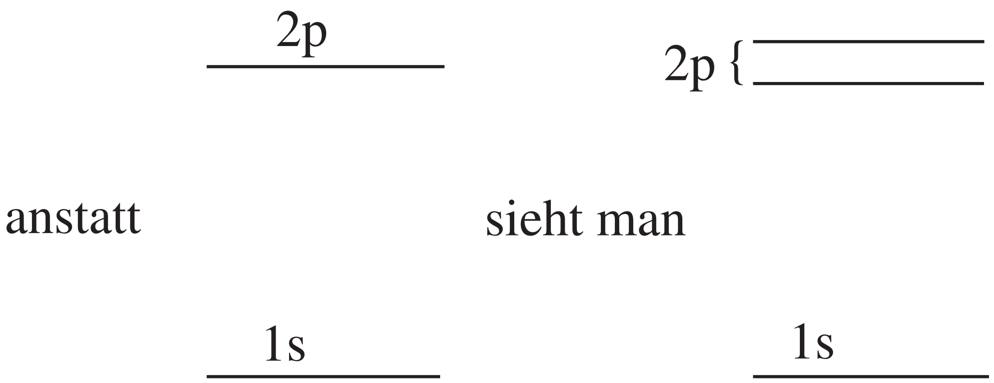


Abbildung 24: Niveauaufspaltung in ein Dublett.

   $\Rightarrow$ Die einfache Theorie des $H$–Atoms kann nicht exakt sein.

   - Plausible Erklärung der Dublett–Aufspaltung mit Spin :
     Der Bahndrehimpuls $(l = 1)$ induziert Strom $\Rightarrow$ internes Magnetfeld. An dieses Magnetfeld koppelt der Spin $\frac{1}{2}$ der Elektronen $\Rightarrow$ Aufspaltung in 2 Niveaus, wie bei Stern–Gerlach.

3. Zeeman–Effekt

   - Wegen

$$H_{\text{Dipol}} = -\vec{B} \cdot \vec{M} = -\mu_B \vec{B} \cdot \vec{L} \tag{1238}$$

     erwartet man bei einem äußerem Magnetfeld $\vec{B}$ (o.B.d.A. in $z$–Richtung) eine Aufspaltung von Niveaus:

     – Einfacher Zeeman–Effekt
       Magnetfeld stark $\Rightarrow$ resultierende Aufspaltung viel größer als Multiplett–Aufspaltung $\Rightarrow$ Multiplett–Aufspaltung vernachlässigbar.

     – Anomaler Zeeman–Effekt
       Magnetfeld schwach $\Rightarrow$ resultierende Aufspaltung kleiner als Multiplett–Aufspaltung.

   - Beobachte :
     Aufspaltung jeweils in eine gerade Anzahl von Niveaus. wie bei Stern–Gerlach könnte der Bahndrehimpuls nur eine Aufspaltung in eine ungerade Anzahl von Niveaus liefern.

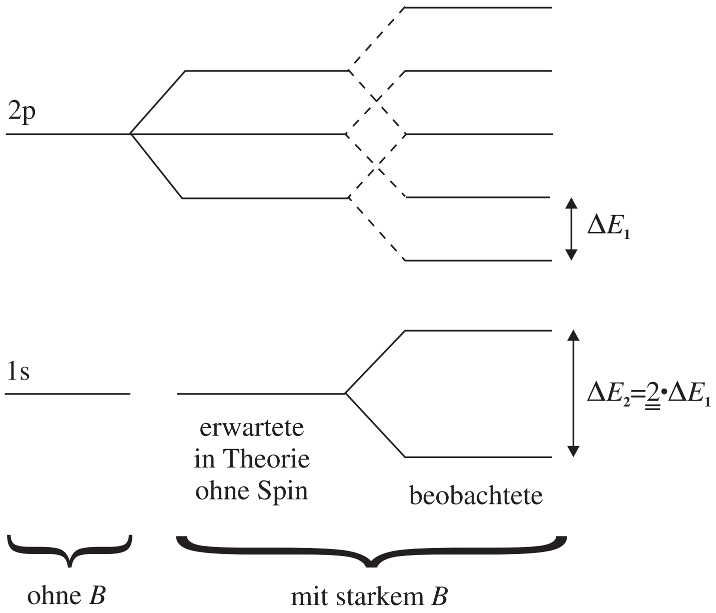


Abbildung 25: Multiplettaufspaltung in einem starken Magnetfeld.

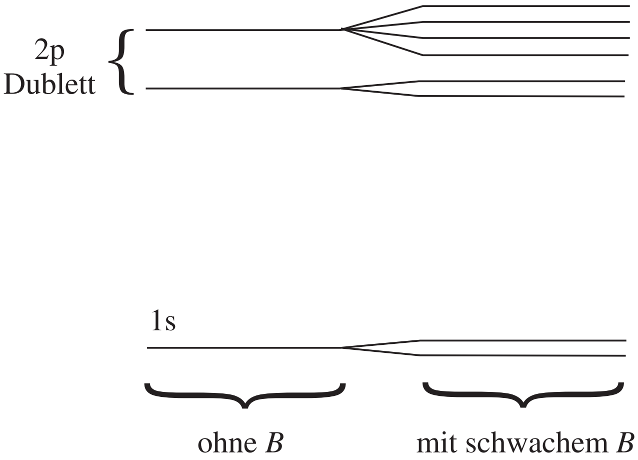


Abbildung 26: Niveauaufspaltung beim anomalen Zeemann-Effekt.

4. Einstein–deHaas Experiment

Das äußere Magnetfeld richtet elementare magnetische Momente und daher Drehimpulse aus.
Messe :

- Drehimpulsübertrag $\Delta L$ bei Einschalten des Feldes ($\sim$ Auslenkung des Lichtstrahls).
- Magnetisierung $\Delta M$ des Stabs.

Finde :

$$\Delta M = 2\ \mu_B \Delta L. \tag{1239}$$

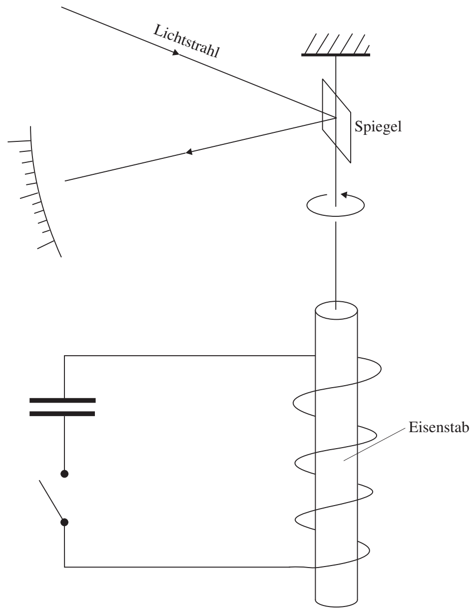


Abbildung 27: Schematische Darstellung des Einstein – deHaas Experiments.

## Mathematische Grundlagen des Spin

- Uhlenbeck–Goudsmit Hypothese (1925) :

  - Das Elektron hat einen intrinsischen Drehimpuls ( Spin ) $\vec{s}$ mit $\vec{s}^2 = s(s+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$, also ist $s = \frac{1}{2}$ (Spin $1/2$) .
  - Verknüpft mit dem Spin $\vec{s}$ ist ein magnetisches Moment

$$\vec{M}_s = 2\mu_B \vec{s} \; . \tag{1240}$$

    (Beachte den Faktor 2 !)

- Zum Spin gibt es kein klassisches Analogon!
- Mathematische Formulierung der Hypothese :

  - Es gibt einen Spin–Operator $\hat{\vec{s}}$. Er erfüllt die Vertauschungsrelationen eines Drehimpulses:

$$\begin{aligned} [\hat{s}_i, \hat{s}_j] &= i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \, \hat{s}_k \; , &(1241)\\ \left[\hat{s}_i, \hat{\vec{s}}^{\,2}\right] &= 0 \; . &(1242)\end{aligned}$$

    Es ist $\hat{\vec{s}}^{\,2} = s(s+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$, also ist $s = \frac{1}{2}$. Die Komponente $\hat{s}_z$ hat die Eigenwerte $\pm\hbar/2$.

– Der Spin–Operator $\hat{\vec{S}}$ wirkt in einem $(2s+1) = 2$–dimensionalen Zustandsraum (Hilbertraum) $\mathcal{H}_{\text{Spin}}$, aufgespannt von den Eigenzuständen

$$\begin{aligned} |s_z = +\hbar/2\rangle &=: |+\rangle \, , \\ |s_z = -\hbar/2\rangle &=: |-\rangle \end{aligned} \tag{1243}$$

von $\hat{S}_z$.

– Der Zustandsraum $\mathcal{H}$ des Elektrons ist das <u>Produkt</u> aus dem (bisher betrachteten) räumlichen Zustandsraum $\mathcal{H}_{\text{Raum}}$ und dem Spin–Zustandsraum $\mathcal{H}_{\text{Spin}}$ :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{Raum}} \otimes \mathcal{H}_{\text{Spin}} \; . \tag{1244}$$

Die vollständige Wellenfunktion des Elektrons hat somit 2 Komponenten:

$$\left. \begin{array}{l} \langle \vec{r}, +|\Psi\rangle =: \Psi_+(\vec{r}) \\ \langle \vec{r}, -|\Psi\rangle =: \Psi_-(\vec{r}) \end{array} \right\} =: \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{r}) \\ \Psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} \; . \tag{1245}$$

Die Wellenfunktion ist ein <u>2–Komponenten Spinor</u>.

• Pauli–Matrizen:
Wir betrachten die Darstellung des Spin–Operators $\hat{\vec{S}}$ in der Basis $\{|+\rangle, |-\rangle\}$.
Jede Komponente $\hat{S}_i$ wird von einer $2 \times 2$–Matrix dargestellt.

– Mit

$$\hat{S}_z |\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle \tag{1246}$$

folgt sofort die Darstellung

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \; . \tag{1247}$$

– Für die Leiteroperatoren

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i \hat{S}_y \tag{1248}$$

gilt

$$\begin{aligned} &\hat{S}_+ |+\rangle = 0 \quad , \quad \hat{S}_- |+\rangle = \hbar |-\rangle \, , \\ &\hat{S}_+ |-\rangle = \hbar |+\rangle \quad , \quad \hat{S}_- |-\rangle = 0 \, . \end{aligned} \tag{1249}$$

und somit die Darstellung

$$S_+ = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad S_- = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \quad . \tag{1250}$$

Daraus folgen

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \tag{1251}$$

$$S_y = \frac{1}{2}(S_+ - S_-) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad . \tag{1252}$$

– Zusammenfassend :

$$S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i \quad , \tag{1253}$$

wobei

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1254}$$

die sogenannten Pauli–Matrizen sind.

– Eigenschaften

$$\sigma_i^2 = 1 \, , \tag{1255}$$

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \sum_k \epsilon_{ijk}\, \sigma_k \ , \tag{1256}$$

$$\sigma_x \sigma_y = i\sigma_z \ \text{ und zyklisch in } \ x, y, z \ , \tag{1257}$$

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} 1 + i \sum_k \epsilon_{ijk}\, \sigma_k \ , \tag{1258}$$

$$\mathrm{Spur}(\sigma_i) = 0 \, , \tag{1259}$$

$$\det(\sigma_i) = -1 \, . \tag{1260}$$

# Die Pauli–Gleichung

Wir untersuchen nun die Bewegung des Elektrons im elektromagnetischen Feld unter Berücksichtigung des Spins. Nach der grundlegenden Hypothese besitzt das Elektron das magnetische Moment

$$\hat{\vec{m}} = -\frac{e}{mc}\hat{\vec{s}} \tag{1261}$$

mit dem Spin–Operator

$$\hat{\vec{s}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}} \; . \tag{1262}$$

In der Standarddarstellung lauten die Spin–Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \; , \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \; , \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \; . \tag{1263}$$

Die Vertauschungsregeln lauten

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k = -\sigma_j \sigma_i \; . \tag{1264}$$

Hier ist $\epsilon_{ijk}$ der total antisymmetrische Tensor. Es ist das Levi–Civita–Symbol.
Wir fanden die folgenden Eigenwerte von $\hat{\vec{s}}^{\,2}$ und $\hat{s}_z$.

$$\begin{aligned} \hat{\vec{s}}^{\,2}\Psi &= \frac{3}{4}\hbar^2\Psi \; , \\ \hat{s}_z\Psi &= \hbar m_s \Psi \; . \end{aligned} \tag{1265}$$

mit

$$m_s = \pm\frac{1}{2} \tag{1266}$$

und dem Spinor

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} \; . \tag{1267}$$

In einem Magnetfeld erhält das Elektron die zusätzliche potentielle Energie

$$\Delta E = -\vec{m}\vec{B} \; . \tag{1268}$$

Daher schreiben wir nun für den erweiterten Hamilton–Operator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - e\phi + \frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\vec{B} \; . \tag{1269}$$

Wir haben hier die Ladung des Elektrons gleich $-e$ gesetzt. Die Schrödinger–Gleichung für die Wellenfunktion $\Psi(\Psi_1, \Psi_2)$ erhält jetzt die Form

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 \Psi - e\phi\Psi + \frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\vec{B}\Psi \; . \tag{1270}$$

Dies ist die Pauli–Gleichung.
Mit

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - e\phi \tag{1271}$$

können wir auch schreiben

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}_0\Psi + \frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\vec{B}\Psi \ . \tag{1272}$$

Wir wollen die Stromdichte bestimmen. Ausgehend von $\Psi$ bestimmen wir die adjungierte Funktion als den zweikomponentigen Zeilenvektor

$$\Psi^+ = \left(\Psi_1^*, \Psi_2^*\right) \ . \tag{1273}$$

Damit lautet die adjungierte Form der Pauli–Gleichung

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^+}{\partial t} = \hat{H}_0^*\Psi^+ + \frac{e\hbar}{2mc}\left(\vec{\sigma}\vec{B}\Psi\right)^+ \ . \tag{1274}$$

Wir multiplizieren nun (1272) von links mit $\Psi^+$ und (1274) von rechts mit $\Psi$. Danach subtrahieren wir beide Gleichungen voneinander. So bekommen wir

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^+\Psi) &= \Psi^+(\hat{H}_0\Psi) - (\hat{H}_0^*\Psi^+)\Psi \\ &\quad + \frac{e\hbar}{2mc}\left[\Psi^+\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\Psi - (\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\Psi)^+\Psi\right] \ . \end{aligned} \tag{1275}$$

Nun gilt

$$\vec{\sigma}^+ = (\vec{\sigma}^*)^T = \vec{\sigma} \tag{1276}$$

und damit

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\Psi)^+ = \Psi^+\vec{\sigma}\cdot\vec{B} \ . \tag{1277}$$

Daher ist der Ausdruck in der eckigen Klammer in (1275) gleich Null. Die verbleibenden Rechnungen sind analog zu den früheren Rechnungen mit dem Unterschied, daß wir es nun mit den beiden Komponenten $\Psi_1$ und $\Psi_2$ zu tun haben. Es resultiert

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi_1^*\Psi_1 + \Psi_2^*\Psi_2) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\left[\Psi_1^*\vec{\nabla}\Psi_1 - \Psi_1\vec{\nabla}\Psi_1^* + \Psi_2^*\vec{\nabla}\Psi_2 - \Psi_2\vec{\nabla}\Psi_2^*\right] \\ &\quad + \frac{ie\hbar}{mc}\vec{\nabla}\left[\vec{A}(\Psi_1^*\Psi_1 + \Psi_2^*\Psi_2)\right] \ . \end{aligned} \tag{1278}$$

Wir formen diese Gleichung um in die Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte $w$ ($w = \rho$) und die Stromdichte $\vec{j}$. Damit haben wir

$$
\begin{aligned}
w &= \left(\Psi_1^*\Psi_1 + \Psi_2^*\Psi_2\right) , \\
\vec{j} &= \frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi_1^*\vec{\nabla}\Psi_1 - \Psi_1\vec{\nabla}\Psi_1^* + \Psi_2^*\vec{\nabla}\Psi_2 - \Psi_2\vec{\nabla}\Psi_2^*\right] \\
&\quad -\frac{e}{mc}\left[\vec{A}(\Psi_1^*\Psi_1 + \Psi_2^*\Psi_2)\right] \ . \qquad (1279)
\end{aligned}
$$

Dies können wir kompakter schreiben als

$$
\begin{aligned}
w &= \Psi^+\Psi \ , \\
\vec{j} &= \frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi\vec{\nabla}\Psi^+ - \Psi^+\vec{\nabla}\Psi\right] - \frac{e}{mc}\vec{A}\Psi^+\Psi \ . \qquad (1280)
\end{aligned}
$$

Diese Relationen zeigen, daß sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons und die Stromdichte additiv aus zwei Teilen zusammnesetzen, von denen sich jeder auf Elektronen mit einer bestimmten Spinrichtung bezieht. Die Normierungsbedingung hat die Form

$$
\int \left(\Psi_1^*\Psi_1 + \Psi_2^*\Psi_2\right) d^3r = 1 \qquad (1281)
$$

oder

$$
\int \Psi^+\Psi \, d^3r = 1 \ . \qquad (1282)
$$

# Der anomale Zeeman–Effekt

Wir untersuchen nun die Aufspaltung von atomaren Spektrallinien in einem Magnetfeld. Insbesondere betrachten wir ein Atom mit einem Valenzelektron in einem äußeren Magnetfeld. Stellen wir dabei den Elektronenspin in Rechnung, so bezeichnen wir die Aufspaltung der Spektrallinien als den anomalen Zeeman–Effekt. Das Elektron spürt nun das attraktive elektrische Potential des Atomkerns sowie das Magnetfeld. Das elektrische Potential des Atomkerns bezeichnen wir mit $V(r)$. Das Magnetfeld legen wir in die $z$–Richtung,

$$
\vec{B} = B\,\vec{e}_z . \qquad (1283)
$$

Das Vektorpotential habe dann die Form

$$
\begin{aligned}
A_x &= -\frac{B}{2}y \ , \\
A_y &= +\frac{B}{2}x \ , \\
A_z &= 0 \ . \qquad (1284)
\end{aligned}
$$

Mit $\vec{B} = \mathrm{rot}\,\vec{A}$ folgt dann wieder (1283). Wir setzen diesen Ausdruck für $\vec{A}$ in die Pauli–Gleichung ein. Es folgt

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2\Psi + V(r)\Psi - \frac{i\hbar e}{2mc}\,B\left(x\frac{\partial\Psi}{\partial y} - y\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right) \\
&\quad + \frac{e^2}{8mc^2}\,B^2\left(x^2+y^2\right)\,\Psi + \frac{e\hbar}{2mc}\left(\sigma_z B\right)\,\Psi\ . \qquad (1285)
\end{aligned}
$$

Als wesentliche Näherung betrachten wir nun kleine magnetische Feldstärken und vernachlässigen daher den Term proportional zu $B^2$.
Ferner ist

$$
i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\ . \qquad (1286)
$$

Mit

$$
\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \qquad (1287)
$$

können wir somit schreiben

$$
i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}_0\Psi + \frac{eB}{2mc}\,\left(\hat{L}_z + \hbar\sigma_z\right)\,\Psi\ . \qquad (1288)
$$

Wir wollen nun die stationären Zustände ermitteln. Die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion ist erneut durch den Faktor $\exp\{-iEt/\hbar\}$ bestimmt. Damit lautet die stationäre Gleichung

$$
\hat{H}_0\Psi + \frac{eB}{2mc}\,\left(\hat{L}_z + \hbar\sigma_z\right)\,\Psi = E\Psi\ . \qquad (1289)
$$

In der Diagonaldarstellung von $\sigma_z$ folgt

$$
\sigma_z\Psi = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ -\Psi_2 \end{pmatrix}\ . \qquad (1290)
$$

Somit separiert die stationäre Gleichung (1289) in

$$
\hat{H}_0\Psi_1 + \frac{eB}{2mc}\,\left(\hat{L}_z + \hbar\right)\,\Psi_1 = E\Psi_1\ , \qquad (1291)
$$

$$
\hat{H}_0\Psi_2 + \frac{eB}{2mc}\,\left(\hat{L}_z - \hbar\right)\,\Psi_2 = E\Psi_2\ . \qquad (1292)
$$

Bei fehlendem Magnetfeld $(B = 0)$ sind zwei Lösungen möglich,

$$
\begin{aligned}
\Psi^{(1)}_{nlm} &= \begin{pmatrix} \Psi_{nlm} \\ 0 \end{pmatrix}\ ,\quad E = E^{(0)}_{nl}\ \text{ für }\ s_z = +\frac{\hbar}{2}\ , \\
\Psi^{(2)}_{nlm} &= \begin{pmatrix} 0 \\ \Psi_{nlm} \end{pmatrix}\ ,\quad E = E^{(0)}_{nl}\ \text{ für }\ s_z = -\frac{\hbar}{2}\ . \qquad (1293)
\end{aligned}
$$

Hierbei ist wie üblich

$$
\Psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r)\cdot Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\ , \qquad (1294)
$$

und es gilt

$$\hat{L}_z \Psi_{nlm} = \hbar m \, \Psi_{nlm} \; . \tag{1295}$$

Dies sind auch gleichzeitig die Lösungen der Gleichungen (1291) und (1292). Es resultieren aber andere Eigenwerte

$$\begin{aligned}
\Psi^{(1)}_{nlm} \; &: \; E = E^{(1)}_{nlm} = E^{(0)}_{nl} + \frac{e\hbar B}{2mc} \, (m+1) \;\; \text{für} \;\; s_z = +\frac{\hbar}{2} \; , \\
\Psi^{(2)}_{nlm} \; &: \; E = E^{(2)}_{nlm} = E^{(0)}_{nl} + \frac{e\hbar B}{2mc} \, (m-1) \;\; \text{für} \;\; s_z = -\frac{\hbar}{2} \; .
\end{aligned} \tag{1296}$$

Da wir den Term proportional zu $B^2$ im Hamilton–Operator vernachlässigt haben, wird die Wellenfunktion nicht geändert und das Atom nicht deformiert. Die Energie hängt aber von der Stellung des Spins in bezug auf das Magnetfeld ab. Die Aufspaltung der Energie der $s$–Elektronen mit $l = 0$ und $m = 0$ kommt nur infolge des Elektronenspins zustande. Durch diese Aufspaltung der Elektronniveaus im Magnetfeld, also durch den Zeeman–Effekt erhöht sich auch die Zahl der beobachtbaren Spektrallinien beträchtlich.

# Der Stark–Effekt

Wir studieren nun die Aufspaltung atomarer Spektrallinien in einem elektrischen Feld. Dieser empirische Befund wird Stark–Effekt genannt. Das Experiment zeigt, daß die Wirkung eines schwachen elektrischen Feldes auf das Wasserstoffatom und andere Atome sehr verschieden ist. Im Wasserstoffatom ist die Aufspaltung $\Delta E$ proportional zur elektrischen Feldstärke $\vec{E}$, bei allen anderen Atomen aber proportional zu $\vec{E}^{\,2}$. In starken Feldern der Größenordnung $10^5$ V/cm tritt eine zusätzliche Aufspaltung ein, die höheren Potenzen von $\vec{E}$ proportional ist. Außerdem wurde beobachtet, daß sich bei Verstärkung des Feldes die Spektrallinien verbreitern und schließlich ganz verschwinden. Wir wollen nun elektrische Feldstärken betrachten, die schwächer als $10^5$ V/cm sind.

Wir betrachten das inneratomare elektrische Feld beim Bohrschen Radius $a$,

$$|\vec{E}_0| = \frac{e}{a^2} \simeq 5.13 \cdot 10^9 \, \frac{\mathrm{V}}{\mathrm{cm}} \quad . \tag{1297}$$

Dieses Feld ist deutlich größer als das von außen angelegte elektrische Feld. Das äußere elektrische Feld können wir somit als kleine Störung betrachten. Wir betrachten ein homogenes elektrisches Feld der Stärke $|\vec{E}|$, das in $z$-Richtung zeigt:

$$\vec{E} = |\vec{E}| \, \vec{e}_z \quad . \tag{1298}$$

Die potentielle Energie des Elektrons in diesem Feld bezeichnen wir mit $U(\vec{r})$. Es ist

$$U(\vec{r}) = e \, |\vec{E}| \, z = -D_z \, |\vec{E}| \quad , \tag{1299}$$

mit dem elektrischen Moment

$$D_z = -e \, z \quad . \tag{1300}$$

Die Schrödinger–Gleichung für stationäre Zustände nimmt folgende Form an

$$-\frac{\hbar}{2m} \vec{\nabla}^{\,2} \Psi + \Big( V(r) + e \, |\vec{E}| \, z \Big) \Psi = E \, \Psi \quad . \tag{1301}$$

Hierbei ist $V(r)$ das Coulomb–Potential. Die Schrödinger–Gleichung (1301) wollen wir mit Methoden der Störungstheorie näherungsweise lösen. Spin–Effekte lassen wir zunächst unberücksichtigt.

Wir wollen das Gesamtpotential in $z$-Richtung studieren.

Die Abbildung zeigt das Gesamtpotential

$$W = V(r) + U(z) = V(r) + e \, |\vec{E}| \, z \quad . \tag{1302}$$

Eingetragen sind auch die beiden einzelnen Potentiale. Ferner ist qualitativ die energetische Lage eines gebundenen Zustands mit der Energie $E$ angegeben. Ein Elektron in diesem Zustand kann durch die linke Potentialbarriere durchtunneln und somit zu einem Kontinuumszustand werden. Streng betrachtet gibt es in einem homogenen elektrischen Feld keine gebundenen Zustände. Zunächst müssen wir uns die Methoden der Störungstheorie erarbeiten, um eine Änderung der Energie eines atomaren gebundenen Zustands zu ermitteln.

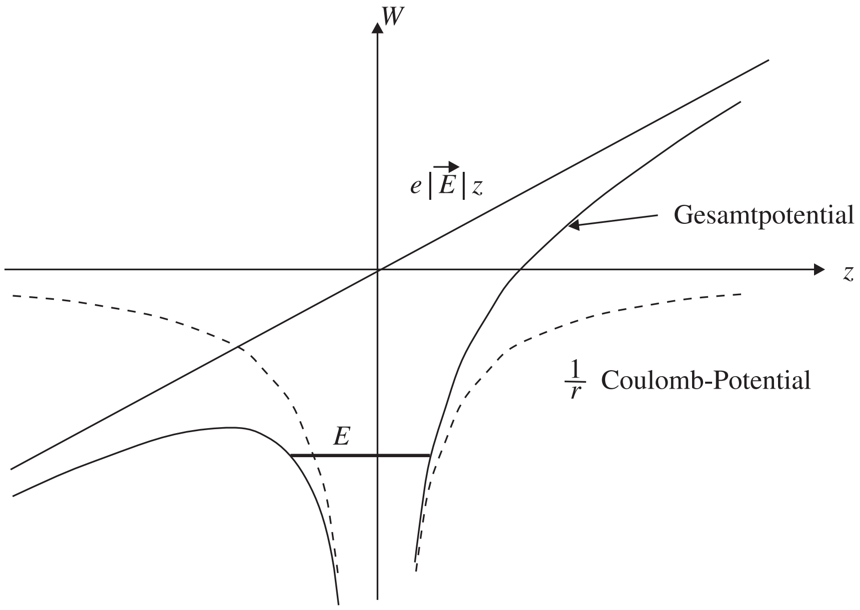


Abbildung 28: Summenpotential aus dem $1/r$-Coulomb–Potential und aus dem Potential des homogenen elektrischen Feldes. Das Gesamtpotential ist asymmetrisch. Eingezeichnet ist die energetische Lage eines gebundenen Zustands. Es besteht eine endliche Tunnelwahrscheinlichkeit für das Durchtunneln durch die linke Barriere.

# Zeitunabhängige Störungstheorie

Wir betrachten die Schrödinger–Störungstheorie. Man geht dabei von der Möglichkeit aus, den Hamilton–Operator zerlegen zu können in

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad . \tag{1303}$$

Hierbei wird angenommen, daß sich das Eigenwertproblem zu $\hat{H}_0$ streng lösen läßt. Die Störung $\hat{H}_1$ soll nur eine kleine Korrektur darstellen. Für das volle Problem

$$\hat{H} \left|\Psi_n\right\rangle = E_n \left|\Psi_n\right\rangle \tag{1304}$$

wollen wir eine möglichst gute Approximation finden. Wir verwenden wieder die Dirac–Schreibweise. In einem ersten Schritt werden wir das ungestörte Problem

$$\hat{H}_0^{(0)} \left|\Psi_n^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)} \left|\Psi_n^{(0)}\right\rangle \tag{1305}$$

exakt lösen. Die Eigenzustände des hermiteschen Operators $\hat{H}_0$ stellen ein vollständiges Orthogonalsystem dar

$$\langle \Psi_n^{(0)} | \Psi_m^{(0)} \rangle = \delta(n,m) \quad . \tag{1306}$$

Hierbei ist

$$\delta(n,m) = \begin{cases} \delta_{nm} & \text{für gebundene Zustände} \\ \delta(\vec{p}_n - \vec{p}_m) & \text{für Kontinuumszustände.} \end{cases} \tag{1307}$$

Die Normierung für Kontinuumszustände können wir auch transformieren

$$\delta(\vec{p}_n - \vec{p}_m) \to \delta(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) \quad . \tag{1308}$$

Die Vollständigkeit wird ausgedrückt durch

$$1 = \sum\!\!\!\!\!\!\int_n |\Psi_n^{(0)}\rangle\langle\Psi_n^{(0)}| \quad . \tag{1309}$$

Im folgenden untersuchen wir die Energieänderung eines Zustands aus dem diskreten Spektrum von $\hat{H}_0$ aufgrund der Störung $\hat{H}_1$. Die Eigenzustände von $\hat{H}$ sind nur bis auf einen beliebigen konstanten Faktor festgelegt. Wir vereinbaren die folgende zweckmäßige Normierung

$$\langle\Psi_n^{(0)}|\Psi_n\rangle = 1 \quad . \tag{1310}$$

Das Konzept der Schrödingerschen Störungstheorie basiert auf der Idee, die Störung $\hat{H}_1$ mit Hilfe eines reellen Parameters $0 \leq \lambda \leq 1$ einzuschalten

$$\hat{H}_1 \to \lambda\,\hat{H}_1 \quad . \tag{1311}$$

Für $\lambda \to 0$ folgt natürlich

$$E_n \to E_n^{(0)} \quad \text{und} \quad |\Psi_n\rangle \to |\Psi_n^{(0)}\rangle \quad . \tag{1312}$$

Bei dem Parameter $\lambda$ kann es sich in einigen Fällen auch um eine physikalische Größe wie der Kopplungskonstante handeln. Beispielsweise kann in atomphysikalischen Rechnungen oder in Berechnungen quantenelektrodynamischer Effekte die Kopplungskonstante die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante $\alpha \simeq 1/137$ sein. Wir werden die Energien $E_n$ und die Wellenfunktion $|\Psi_n\rangle$ als Potenzreihe in $\lambda$ ansetzen. Zum Schluß setzen wir wieder $\lambda = 1$.
Wir betrachten zunächst den Fall, daß wir nicht entartete Niveaus vorliegen haben. Wir schreiben dann formal die folgenden Entwicklungen auf

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda\,E_n^{(1)} + \lambda^2\,E_n^{(2)} + \ldots \quad , \tag{1313}$$

$$|\Psi_n\rangle = |\Psi_n^{(0)}\rangle + \lambda\,|\Psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2\,|\Psi_n^{(2)}\rangle + \ldots \quad . \tag{1314}$$

Aufgrund der speziellen Normierung (1310) folgt

$$\lambda\,\langle\Psi_n^{(0)}|\Psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2\,\langle\Psi_n^{(0)}|\Psi_n^{(2)}\rangle + \ldots = 0 \quad . \tag{1315}$$

Dies wiederum impliziert

$$\langle\Psi_n^{(0)}|\Psi_n^{(j)}\rangle = \delta_{0j} \quad . \tag{1316}$$

Mit dem Ansatz (1313) und (1314) studieren wir nun die stationäre Eigenwertgleichung

$$\begin{aligned}\hat{H}\,|\Psi_n\rangle &= \hat{H}_0\,|\Psi_n^{(0)}\rangle + \lambda\left(\hat{H}_1\,|\Psi_n^{(0)}\rangle + \hat{H}_0\,|\Psi_n^{(1)}\rangle\right)\\ &\quad +\lambda^2\left(\hat{H}_1\,|\Psi_n^{(1)}\rangle + \hat{H}_0\,|\Psi_n^{(2)}\rangle\right) + \ldots\\ &= \hat{H}_0\,|\Psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{p=1}^{\infty}\lambda^p\left(\hat{H}_1\,|\Psi_n^{(p-1)}\rangle + \hat{H}_0\,|\Psi_n^{(p)}\rangle\right) \quad . \end{aligned} \tag{1317}$$

Ferner gilt

$$\begin{aligned}E_n\,|\Psi_n\rangle &= E_n^{(0)}\,|\Psi_n^{(0)}\rangle + \lambda\left(E_n^{(1)}\,|\Psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)}\,|\Psi_n^{(1)}\rangle\right)\\ &\quad +\lambda^2\left(E_n^{(2)}\,|\Psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(1)}\,|\Psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(0)}\,|\Psi_n^{(2)}\rangle\right) + \ldots\\ &= E_n^{(0)}\,|\Psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{p=1}^{\infty}\lambda^p\left(\sum_{j=0}^{p} E_n^{(j)}\,|\Psi_n^{(p-j)}\rangle\right) \quad . \end{aligned} \tag{1318}$$

Durch Sortieren nach Potenzen von $\lambda$ ergeben sich die verschiedenen Ordnungen der Schrödingerschen Störungstheorie. Für $p \geq 1$ folgt aus den letzten beiden Gleichungen

$$\hat{H}_1\,|\Psi_n^{(p-1)}\rangle + \hat{H}_0\,|\Psi_n^{(p)}\rangle = \sum_{j=0}^{p} E_n^{(j)}\,|\Psi_n^{(p-j)}\rangle \quad . \tag{1319}$$

Wir multiplizieren diesen Ausdruck von links mit bem bra–Zustand $\langle\psi_n^{(0)}|$. Ferner ist

$$\langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}_0|\psi_n^{(p)}\rangle = E_n^{(0)}\,\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(p)}\rangle = 0 \quad \text{für } p \geq 1 \quad . \tag{1320}$$

Damit verbleibt für die Energiekorrektur

$$E_n^{(p)} = \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}_1|\psi_n^{(p-1)}\rangle \quad . \tag{1321}$$

Wir wollen nun auch die Zustandskorrektur ausrechnen. Dazu multiplizieren wir (1319) von links mit $\langle\Psi_m^{(0)}|$, wobei $m \neq n$ sein soll

$$\begin{aligned}\langle\Psi_m^{(0)}|(\hat{H}_0 - E_n^{(0)})\,|\Psi_n^{(p)}\rangle &= (E_m^{(0)} - E_n^{(0)})\,\langle\Psi_m^{(0)}|\Psi_n^{(p)}\rangle\\ &= -\langle\Psi_m^{(0)}|\hat{H}_1\,|\Psi_n^{(p-1)}\rangle + \sum_{j=1}^{p} E_n^{(j)}\,\langle\Psi_m^{(0)}|\Psi_n^{(p-j)}\rangle \quad . \end{aligned} \tag{1322}$$

Nach Voraussetzung ist das Niveau $E_n^{(0)}$ nicht entartet. Wir können also die letzte Gleichung durch die Energiedifferenz $(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})$ dividieren. Ferner nutzen wir noch die Vollständigkeit der ungestörten Eigenzustände aus,

$$|\Psi_n^{(p)}\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_m |\Psi_m^{(0)}\rangle\langle\Psi_m^{(0)}|\Psi_n^{(p)}\rangle \quad . \tag{1323}$$

Wegen (1316) ist hier der Term für $m = n$ gleich Null für $p \geq 1$. Damit bekommen wir als Zustandskorrektur

$$
\begin{aligned}
|\Psi_n^{(p)}\rangle &= \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{m\,(m\neq n)} |\Psi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle \Psi_m^{(0)}|\hat{H}_1\,|\Psi_n^{(p-1)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \\
&\quad - \sum_{j=1}^{p} E_n^{(j)} \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{m\,(m\neq n)} |\Psi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle \Psi_m^{(0)}|\Psi_n^{(p-j)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad . \qquad (1324)
\end{aligned}
$$

Wir spezialisieren jetzt unsere allgemeinen Studien auf die Störungstheorie in erster Ordnung ($p = 1$) für die Energien und Zustände. Es folgt

$$
\begin{aligned}
E_n^{(1)} &= \langle \Psi_n^{(0)}|\hat{H}_1\,|\Psi_n^{(0)}\rangle \quad , \qquad (1325) \\
|\Psi_n^{(1)}\rangle &= \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{m\,(m\neq n)} |\Psi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle \Psi_m^{(0)}|\hat{H}_1\,|\Psi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad , \qquad (1326)
\end{aligned}
$$

und es ist

$$
\begin{aligned}
E_n &\simeq E_n^{(0)} + E_n^{(1)} \quad , \qquad (1327) \\
|\Psi_n\rangle &\simeq |\Psi_n^{(0)}\rangle + |\Psi_n^{(1)}\rangle \quad . \qquad (1328)
\end{aligned}
$$

Der Erwartungswert des Störperators $\hat{H}_1$ im ungestörten Eigenzustand $|\Psi_n^{(0)}\rangle$ liefert also bereits die Energiekorrektur erster Ordnung.

Wir betrachten anschließend noch die Energiekorrektur in Störungstheorie in zweiter Ordnung ($p = 2$). Es folgt

$$
E_n^{(2)} = \sum\!\!\!\!\!\!\!\int_{m\,(m\neq n)} \frac{|\langle \Psi_m^{(0)}|\hat{H}_1\,|\Psi_n^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad . \qquad (1329)
$$

Als approximatives Kriterium für die Gültigkeit der Störungstheorie sollte die Störung $\hat{H}_1$ möglichst klein sein und der Niveauabstand möglichst groß sein.