

Vorlesungen zur Quantenmechanik I

Prof. Dr. Gerd Rudolph

Der Autor bedankt sich bei Herrn Uwe Schaufuß für das Erstellen einer ersten \LaTeX -Version und bei Dr. Matthias Schmidt für das Korrekturlesen der vorliegenden Version.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
1.1	Das Plancksche Strahlungsgesetz	3
1.2	Der Photoelektrische Effekt	7
1.3	Der Compton-Effekt	7
1.4	Welle-Teilchen-Dualismus des Lichts	9
1.5	Bohrsches Atommodell und Sommerfeldsche Quantisierungsregeln	11
1.6	Materiewellen. Die Schrödingergleichung	13
2	Die Wellenfunktion	17
2.1	Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion	17
2.2	Das freie Teilchen im Rahmen der Wellenmechanik	18
2.2.1	Newtonsche Gleichung für die Erwartungswerte	18
2.2.2	Das Zerfließen von Wellenpaketen	19
2.2.3	Das Anfangswertproblem	21
2.2.4	Das Gaußsche Wellenpaket	22
2.3	Die Wahrscheinlichkeitsverteilung für den Impuls	22
2.4	Messungen in der QM und Heisenbergsche Unschärferelation	26
2.5	Korrespondenzprinzip und Ehrenfestsche Gleichungen	28
2.6	Die Wellenfunktion als Vektor im Hilbertraum. Reine Zustände	30
3	Observable	35
3.1	Lineare, beschränkte Operatoren im Hilbertraum	35
3.2	Erwartungswerte von Observablen	38
3.3	Streuung und allgemeine Unschärferelation	39
3.4	Spektrum und Eigenfunktionenentwicklung	42
3.4.1	Der endlich-dimensionale Fall	42
3.4.2	Der unendlich-dimensionale Fall	47
3.4.3	Verallgemeinerte Eigenfunktionen	51
3.5	Vollständige Systeme kommutierender Observabler	56
3.6	Bemerkungen zu unbeschränkten Operatoren	59
4	Eindimensionale Probleme	69
4.1	Stationäre Zustände (in beliebiger Dimension)	69
4.2	Eigenschaften stationärer Lösungen in einer Dimension	71
4.3	Der harmonische Oszillator	72
4.4	Der Potentialtopf. Gebundene Zustände	78
4.4.1	Der Potentialtopf mit endlich hohen Wänden	78
4.4.2	Der Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden	81
4.5	Streuung und Streuzustände	81

5	Der Drehimpuls	91
5.1	Gruppentheoretische Grundlagen	92
5.2	Eigenwerte und Eigenvektoren des Drehimpulses	98
5.3	Der Bahndrehimpuls	102
5.4	Der Spin	105
5.5	Addition von Drehimpulsen	109
6	Schrödingergleichung mit Zentralpotential	113
6.1	Separation der Variablen. Die Radialgleichung	114
6.2	Freies Teilchen und kugelsymmetrischer Potentialtopf	118
6.3	Das Coulomb-Potential – Gebundene Zustände des H-Atoms	122
7	Zeitentwicklung	131
7.1	Der Zeitentwicklungsoperator	131
7.2	Das Heisenberg-Bild	133
7.3	Wechselwirkungsbild und Übergangswahrscheinlichkeiten	136
8	Elemente der Streutheorie	141
8.1	Møller-Operatoren. Der Limes $t \rightarrow \pm\infty$	141
8.2	Der Streuoperator (S-Matrix)	144
8.3	Die Lippmann-Schwinger-Gleichung	147
8.4	Streuamplitude und Streuquerschnitt	151
8.5	Streuung eines Teilchens am Zentralpotential	155
8.6	Streuung am Coulomb-Potential	162

Kapitel 1

Einleitung

In diesem Kapitel behandeln wir kurz einige Erscheinungen, die eine neue, nicht-klassische Physik nahelegten.

1.1 Das Plancksche Strahlungsgesetz

Bereits im 19. Jahrhundert wurde die Spektralverteilung der Strahlung fester Körper untersucht. (Bei hohen Temperaturen wird sichtbares Licht emittiert, bei niedrigeren Temperaturen Wärmestrahlung, in beiden Fällen handelt es sich natürlich um e.-m. Strahlung.) Typische Spektralverteilungen sind in Abb. 1.1 dargestellt. Das Bild zeigt die Intensitätsverteilung in Abhängigkeit von der Wellenlänge und

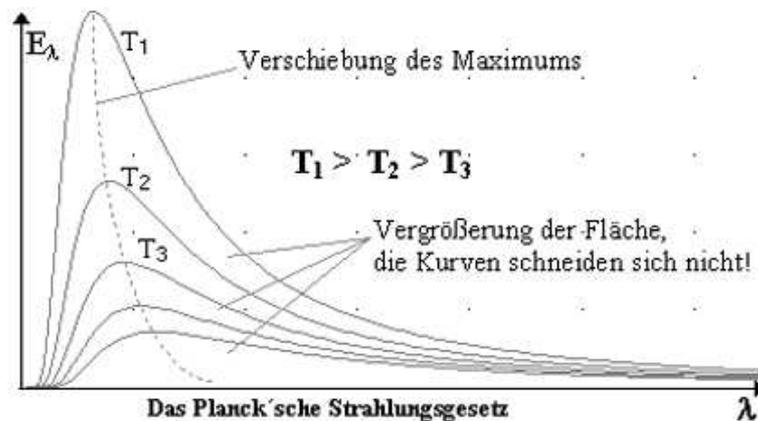


Abbildung 1.1: Typische Meßkurven der spektralen Intensitätsverteilung in der Hohlraumstrahlung bei verschiedenen Temperaturen

der Temperatur. Natürlich hängt die Spektralverteilung für reale Körper auch von deren stofflicher Beschaffenheit (Material, Farbe, Rauigkeit, etc.) ab.

Idealisierung (Kirchhoff 1859): Um die stofflichen Eigenschaften erst einmal außer Acht lassen zu können, betrachtete man einen Körper, der Strahlung ideal absorbiert und emittiert, d.h. keine Frequenz bevorzugt: den **schwarzen Strahler**.

Als modellhafte Realisierung schlug Kirchhoff einen Hohlkörper aus wärmeundurchlässigem Material, versehen mit einer kleinen Öffnung, vor. Der Körper wird auf der Temperatur T gehalten. Offensichtlich ist die Fläche des Loches ein fast idealer Absorber. Die Wände des Körpers absorbieren und emittieren

elektromagnetische Strahlung und im thermodynamischen Gleichgewicht halten sich Absorption und Emission die Waage. Die Strahlung, die aus dem Loch austritt, bezeichnen wir als schwarze Strahlung. Mit Hilfe thermodynamischer Argumente zeigte Kirchhoff, daß die Strahlung im Hohlraum homogen und isotrop ist und daß sie nicht vom Material oder von der Form und Größe des Hohlraums abhängt. (Dies wurde auch durch Experimente bestätigt.) Sie sollte nur von der **Temperatur** abhängen. Folgt man dieser Argumentation, so muß eine universelle Funktion (**Spektraldichte**) $u(\nu, T)$ existieren, so daß die **Energiedichte** $u(T)$ des e.-m. Feldes im Hohlraum gegeben ist durch

$$u(T) = \int_0^{\infty} u(\nu, T) d\nu. \quad (1.1)$$

Die **theoretische Herausforderung** bestand nun darin, diese universelle Funktion zu bestimmen.

1. Schritt (Wien 1893/94): Die Spektraldichte muß folgende Form haben:

$$u(\nu, T) = \nu^3 \cdot f\left(\frac{\nu}{T}\right), \quad (1.2)$$

wobei f eine vorläufig unbestimmte Funktion bleibt.

Folgerung 1.1

i) Daraus erhält man sofort das **Stefan-Boltzmann-Gesetz**: Mit der Substitution $x = \frac{\nu}{T}$ erhalten wir

$$u(T) = \int_0^{\infty} \nu^3 \cdot f\left(\frac{\nu}{T}\right) d\nu = T^4 \int_0^{\infty} x^3 \cdot f(x) dx,$$

und damit

$$u(T) = \frac{\alpha}{c} \cdot T^4, \quad (1.3)$$

mit $\alpha = 5,67032(12) \times 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$.

ii) Angenommen, $u(\nu, T)$ besitze eine Maximum bei $\nu = \nu_{\max}$. Dann gilt:

$$\left. \frac{du(\nu, T)}{d\nu} \right|_{\nu=\nu_{\max}} = \left\{ 3\nu^2 f\left(\frac{\nu}{T}\right) + \frac{\nu^3}{T} f'\left(\frac{\nu}{T}\right) \right\}_{\nu=\nu_{\max}} = 0,$$

d.h.:

$$\frac{\nu_{\max}}{T} = -3 \left. \frac{f\left(\frac{\nu}{T}\right)}{f'\left(\frac{\nu}{T}\right)} \right|_{\nu=\nu_{\max}} = \text{const}. \quad (1.4)$$

Dies ist das **Wiensche Verschiebungsgesetz**.

2. Schritt (Wien 1896): Mit Hilfe thermodynamischer Betrachtungen (Anwendung der Boltzmann-Gleichung für die Geschwindigkeitsverteilung in Gasen auf die Moleküle des Hohlraumkörpers, Annahme: die Wellenlänge und die Intensität der Strahlung eines Moleküls wird vollständig bestimmt durch dessen Geschwindigkeit) konnte Wien die folgende Formel nahelegen:

$$u(\nu, T) = \alpha \nu^3 e^{-\frac{b\nu}{T}}, \quad (1.5)$$

wobei α und b bestimmte Konstanten sind.

Experimente (Paschen und Wanner 1897/99) zeigten, daß (1.5) eine gute Formel für $b\nu \gg T$, also für den **hochfrequenten** Bereich (etwa $\nu \sim 10^{15} \text{ s}^{-1}$) ist. Dagegen zeigte sich eine schlechte Übereinstimmung mit Experimenten (Lummer und Pringsheim 1897) für $\nu < 10^{13} \text{ s}^{-1}$.

3. Schritt (Lord Rayleigh 1900, Jeans 1905): Eine im Rahmen der klassischen Theorie strenge Formel für $u(\nu, T)$ erhält man, wenn man das elektromagnetische Feld in einem ideal leitenden Hohlwürfel der Länge a betrachtet. Nimmt man an, daß jeder Freiheitsgrad des elektromagnetischen Feldes jede

beliebige Energie tragen kann, wobei die Wahrscheinlichkeit dafür durch die Boltzmann-Verteilung gegeben ist, dann findet man analog zum klassischen Gleichverteilungssatz für die mittlere Energie je Freiheitsgrad den Wert $k_B T$, wobei $k_B = 1,3807 \times 10^{-23}$ J/K die Boltzmann-Konstante ist. Damit ist die räumliche Energiedichte des elektromagnetischen Feldes im Frequenzintervall $(\nu, \nu + d\nu)$ gegeben durch

$$du(T) = \frac{1}{a^3} dN(\nu) k_B T, \quad (1.6)$$

wobei $dN(\nu)$ die Anzahl der Freiheitsgrade mit Frequenzen zwischen ν und $\nu + d\nu$ bezeichnet. Um $dN(\nu)$ zu berechnen, zerlegt man das \vec{E} -Feld nach ebenen Wellen:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \vec{E}_0(\vec{k}) \exp(i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)),$$

wobei die Summe über Wellenvektoren \vec{k} läuft, die $k_i a = \pi n_i$, $n_i \in \mathbb{Z}$, erfüllen, d. h., über alle Vektoren der Gestalt

$$\vec{k} = \frac{\pi}{a} \vec{n}, \quad \vec{n} \in \mathbb{Z}^3.$$

Die zu \vec{k} gehörende Frequenz ist

$$\nu(\vec{k}) = \frac{c}{2\pi} |\vec{k}| = \frac{c}{2a} |\vec{n}|.$$

Umstellen nach $|\vec{n}|$ liefert

$$|\vec{n}| = \frac{2a\nu}{c},$$

d. h., alle \vec{n} mit der Frequenz ν liegen auf einer Kugeloberfläche mit dem Radius $\frac{2a\nu}{c}$. Damit ist die Anzahl der \vec{k} , deren Frequenz $\nu(\vec{k})$ im Intervall $(\nu, \nu + d\nu)$ liegt, gleich der Anzahl der \vec{n} in der Kugelschale zwischen den Radien $\frac{2a\nu}{c}$ und $\frac{2a(\nu+d\nu)}{c} = \frac{2a\nu}{c} + d\left(\frac{2a\nu}{c}\right)$. Diese Anzahl ist offenbar gleich dem Volumen der Kugelschale, also gleich

$$4\pi \left(\frac{2a\nu}{c}\right)^2 d\left(\frac{2a\nu}{c}\right) = 32\pi \frac{a^3 \nu^2}{c^3} d\nu.$$

Für alle erlaubten \vec{k} mit $k_1, k_2, k_3 \geq 0$ ist die Amplitude $\vec{E}_0(\vec{k})$ in der Ebene senkrecht zu \vec{k} frei wählbar (für alle anderen \vec{k} ist dann $\vec{E}_0(\vec{k})$ durch die Randbedingungen bereits festgelegt). Damit gehören zu jedem dieser \vec{k} gerade 2 Freiheitsgrade. Es folgt

$$dN(\nu) = 8\pi \frac{a^3 \nu^2}{c^3} d\nu.$$

Wir setzen dies in Gleichung (1.6) ein und lesen die spektrale Dichtefunktion $u(\nu, T)$ ab:

$$u(\nu, T) = 8\pi \frac{\nu^2}{c^3} k_B T. \quad (1.7)$$

Dies ist das Rayleigh-Jeans-Gesetz. Experimente (Rubens und Kurlbaum 1901) zeigten, daß diese Formel für **kleine Frequenzen** ν eine gute Beschreibung liefert, aber für hohe Frequenzen kommt es zur sogenannten **Ultraviolett-Katastrophe**:

$$\int_0^\infty u(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi}{c^3} k_B T \int_0^\infty \nu^2 d\nu = \infty.$$

Es stand damit die Frage: Existiert eine universelle Formel, die zwischen dem Wienschen Gesetz (1.5) und dem Rayleigh-Jeans-Gesetz (1.7) interpoliert?

4. Schritt (Planck 1900): Er stellte sich die Wandatome als elektrisch geladene, lineare harmonische Oszillatoren vor. Jeder Oszillator besitzt eine bestimmte Eigenfrequenz, mit der die elektrische Ladung Schwingungen um die Gleichgewichtslage ausführt. Es liegt dann eine Wechselwirkung (Energieaustausch) zwischen diesen Oszillatoren und dem e.-m. Feld im Hohlraum vor. Nach klassischen Vorstellungen hat natürlich jeder Oszillator ein kontinuierliches Energiespektrum.

Plancksche Hypothese: Die Oszillatoren können sich nur in solchen Zuständen befinden, deren Energien ganzzahlige Vielfache eines elementaren Energiequants ϵ_0 sind:

$$E_n = n\epsilon_0, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.8)$$

d.h. die Energie kann daher auch nur in gequantelten Portionen emittiert oder absorbiert werden. Sei N die Gesamtzahl der Wandoszillatoren und $N(n)$ die Zahl der Oszillatoren mit der Energie $E_n = n\epsilon_0$, d.h.:

$$N = \sum_{n=0}^{\infty} N(n); \quad E = \sum_{n=0}^{\infty} N(n) n\epsilon_0.$$

Die mittlere Energie pro Oszillator, $\hat{\epsilon} = \frac{E}{N}$, ist dann

$$\hat{\epsilon} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} N(n) n\epsilon_0}{\sum_{n=0}^{\infty} N(n)}. \quad (1.9)$$

Nach der klassischen Boltzmann-Statistik gilt

$$N(n) \sim \exp(-\beta n\epsilon_0), \quad \beta = 1/k_B T.$$

Verwendet man dies, so ergibt sich

$$\hat{\epsilon} = -\frac{d}{d\beta} \ln \left[\underbrace{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n\epsilon_0}}_{\text{Geom. Reihe}} \right] = -\frac{d}{d\beta} \ln \left(\frac{1}{1 - e^{-\beta\epsilon_0}} \right) = \frac{\epsilon_0}{e^{\beta\epsilon_0} - 1}. \quad (1.10)$$

Jeder Wandoszillator ist aber im Gleichgewichtszustand in Resonanz mit einer stehenden e.-m. Welle. Damit können die Betrachtungen von Rayleigh-Jeans übernommen werden, es muß nur $k_B T$ durch $\hat{\epsilon}$ ersetzt werden:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{\epsilon_0}{e^{\beta\epsilon_0} - 1}.$$

Der Vergleich dieser Formel mit dem Wienschen Gesetz, siehe (1.5), ergibt:

$$\epsilon_0 = h\nu, \quad (1.11)$$

wobei h die Dimension einer Wirkung (Energie \times Zeit) haben muß.

Damit erhalten wir das **Plancksche Strahlungsgesetz**:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\beta h\nu} - 1}. \quad (1.12)$$

Aus Experimenten ergab sich für das Plancksche Wirkungsquantum $h = 6,624 \times 10^{-34}$ Js, bzw. $\hbar = h/2\pi = 1,055 \times 10^{-34}$ Js.

Das Jahr 1900 wird oft als das Geburtsjahr der Quantenmechanik bezeichnet.

Bemerkung 1.1

Betrachte eine schwingende Mode im Hohlraum als harmonischen Oszillator mit der Frequenz ν . Seine Energie ist:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \stackrel{(\omega=2\pi\nu)}{=} \frac{p^2}{2m} + 2\pi^2 m\nu^2 q^2.$$

Für jedes fixierte E beschreibt diese Gleichung eine Ellipse im Phasenraum mit den Halbachsen

$$a = \left(\frac{E}{2\pi^2 m\nu^2} \right)^{1/2} \quad \text{und} \quad b = (2Em)^{1/2}.$$

Die Fläche dieser Ellipse beträgt

$$A = \pi ab = E/\nu.$$

Angenommen, wir postulieren: Nur Ellipsen mit einem Flächeninhalt $A = nh$ sind erlaubt. Dies liefert offenbar die Plancksche Hypothese:

$$E = nh\nu. \quad (1.13)$$

Die Verallgemeinerung obiger Annahme führt zu den Sommerfeldschen Quantisierungsregeln, die im weiteren noch besprochen werden.

1.2 Der Photoelektrische Effekt

Wenn auf eine Metallplatte e.-m. Strahlung fällt, emittiert die Platte Elektronen, wobei folgendes experimentell (Herz 1887) gefunden wurde:

- i) Die **Anzahl** der emittierten Elektronen ist proportional zur **Intensität** der Strahlung.
- ii) Für jedes Metall existiert eine untere Grenzfrequenz ν_0 , so daß bei Strahlung mit $\nu < \nu_0$ keine Emission von Elektronen auftritt.
- iii) Die maximale kinetische Energie der emittierten Elektronen ist proportional zu $(\nu - \nu_0)$ und **unabhängig** von der Intensität der Strahlung.
- iv) Die Emission findet ohne Zeitverschiebung statt.

Offensichtlich sind die Punkte ii) und iii) mit der klassischen Strahlungstheorie nicht vereinbar.

Einstein (1905): Die Strahlung der Frequenz ν verhält sich bei Wechselwirkung mit dem Metall wie eine Ansammlung von Lichtquanten¹ mit der Energie $E = h\nu$. Mit dieser Idee ist der Effekt sofort erklärbar: Jedes austretende Elektron mit der kinetischen Energie $\frac{1}{2}mv^2$ hat ein Lichtquant mit der Energie $h\nu$ absorbiert und dabei die Austrittsarbeit $W_A = h\nu_0$ gebraucht, um sich aus dem Festkörper zu lösen:

$$h\nu = \frac{1}{2}mv^2 + W_A.$$

Für $\nu < \nu_0$ kann das Elektron also das Metall nicht verlassen. Eine Erhöhung der Strahlungsintensität bedeutet eine größere Zahl einfallender Lichtquanten, was eine größere Zahl emittierter Elektronen nach sich zieht. (Experimentelle Bestätigung dieses Mechanismus durch Millikan 1916.)

1.3 Der Compton-Effekt

Unter dem Compton-Effekt versteht man die Streuung kurzwelliger Röntgenstrahlen der Frequenz ν an quasifreien Elektronen (z.B. in einem Kristallgitter). Nach der klassischen Elektrodynamik regt die einfallende Lichtwelle Elektronen zu erzwungenen Schwingungen an, die dadurch Lichtwellen mit derselben Frequenz nach allen Seiten abstrahlen (Rayleigh-Streuung). Compton (1921) beobachtete zusätzlich zu der unverschobenen Rayleighstrahlung noch eine weitere Streustrahlung, deren Frequenz ν' folgende Eigenschaften besaß:

1. $\nu' \leq \nu$,
2. $\Delta\lambda = \frac{c}{\nu'} - \frac{c}{\nu}$ hängt nur vom Streuwinkel ϑ ab,
3. $\Delta\lambda$ ist unabhängig vom Streumaterial.

¹Der Begriff des Photons wurde erst 1926 von Lewis eingeführt.

Eine Erklärung dieses Verhaltens wurde 1923 von Compton auf der Grundlage der Lichtquantenhypothese gegeben. Nimmt man folgendes an:

1. die Röntgenstrahlung besteht aus Lichtquanten der Energie $h\nu$,
2. die Lichtquanten sind Teilchen und haben daher einen Impuls,
3. die Wechselwirkung der Lichtquanten mit den Elektronen findet durch elastische Stöße statt,

dann muß man den Streuprozeß als relativistischen Stoßprozeß behandeln. Da sich die Lichtquanten γ mit Lichtgeschwindigkeit bewegen, muß ihre Ruhemasse verschwinden. Ihr Impuls ergibt sich folglich aus der relativistischen Energieformel $E = \sqrt{m_0^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2}$ zu

$$\vec{p}_\gamma = \frac{h\nu}{c} \vec{n} ,$$

wobei \vec{n} der Einheitsvektor in der Bewegungsrichtung von γ ist. Wir nehmen an, daß das Elektron vor dem Stoß ruht und schreiben die relativistische Energie- und Impulsbilanz auf:

- Energiebilanz: vor dem Stoß ist die Gesamtenergie

$$E = E_\gamma + E_e = h\nu + m_e c^2 ,$$

danach

$$E' = E'_\gamma + E'_e = h\nu' + \sqrt{m_e^2 c^4 + \vec{p}'^2 c^2} .$$

Gleichsetzen liefert

$$h\nu + m_e c^2 = h\nu' + \sqrt{m_e^2 c^4 + \vec{p}'^2 c^2} . \quad (1.14)$$

- Impulsbilanz: vor dem Stoß ist der Gesamtimpuls

$$\vec{p} = \vec{p}_\gamma + \vec{p}_e = \frac{h\nu}{c} \vec{n} ,$$

danach

$$\vec{p}' = \vec{p}'_\gamma + \vec{p}'_e = \frac{h\nu'}{c} \vec{n}' + \vec{p}'_e .$$

Gleichsetzen liefert

$$\frac{h\nu}{c} \vec{n} = \frac{h\nu'}{c} \vec{n}' + \vec{p}'_e . \quad (1.15)$$

Wir stellen (1.15) nach \vec{p}'_e um und nehmen das Betragsquadrat:

$$\vec{p}'_e{}^2 = \frac{h^2}{c^2} (\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu' \cos \phi) .$$

Hier bezeichnet ϕ den Winkel zwischen \vec{n} und \vec{n}' . Gleichung (1.14) stellen wir nach der Wurzel um und quadrieren sie:

$$m_e^2 c^4 + \vec{p}'_e{}^2 c^2 = h^2 (\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu') + m_e^2 c^4 + 2h(\nu - \nu') m_e c^2 .$$

Dies liefert für $\nu - \nu'$

$$\nu - \nu' = \frac{1}{2hm_e} \vec{p}'_e{}^2 - \frac{h}{2c^2 m_e} (\nu^2 + \nu'^2 - 2\nu\nu') .$$

Wir ersetzen $\vec{p}'_e{}^2$ mit Hilfe der ersten Gleichung:

$$\nu - \nu' = \frac{h}{m_e c^2} \nu\nu' (1 - \cos \phi) .$$

Teilen wir durch $\nu\nu'$, so erhalten wir schließlich

$$\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu} = \frac{h}{m_e c^2} (1 - \cos \phi) ,$$

bzw., unter Verwendung der Wellenlängen λ, λ' ,

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \phi) .$$

Speziell für den Streuwinkel $\vartheta = 90^\circ$ ergibt sich

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c} .$$

Die Konstante $\frac{h}{m_e c}$ hat die Dimension einer Länge, sie heißt 'Compton-Wellenlänge des Elektrons'. Der experimentell bestimmte Wert ist

$$\frac{h}{m_e c} = 2.426 \cdot 10^{-12} \text{ m} .$$

1.4 Welle-Teilchen-Dualismus des Lichts

Die klassischen Experimente der Diffraktion und Interferenz schienen den Wellencharakter des Lichtes klar zu belegen. Die Entdeckung des photoelektrischen und des Compton-Effektes, bei denen das Licht seinen Teilchencharakter zeigte, führte zu einem konzeptionellen Dilemma. Hat das Licht nun Teilchen- oder Wellencharakter? Die Auflösung dieses Rätsels war erst im Rahmen der Quantenmechanik möglich. Wir betrachten die Beugung von monochromatischem Licht, das von einer punktförmigen Quelle ausgesandt wird, an einem Doppelspalt, (siehe Abb. 1.2).

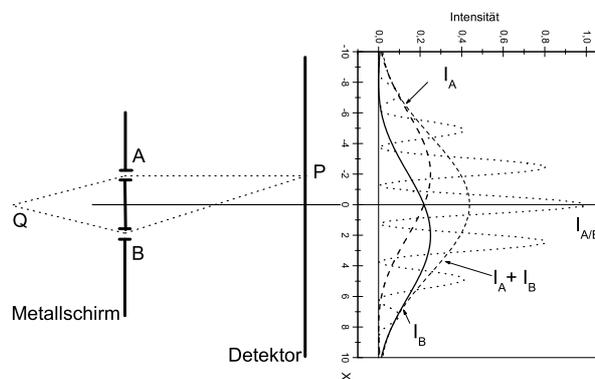


Abbildung 1.2: Skizze und Intensitätsverteilung zur Beugung am Doppelspalt: I_A : nur Spalt A ist geöffnet (Fall (1)), I_B : nur Spalt B ist geöffnet (Fall (2)) und $I_{A,B}$: beide Spalte sind geöffnet (Fall (1,2))

Dieses Interferenzphänomen findet eine sehr gute quantitative Erklärung im Rahmen der Fraunhofer'schen Beugungstheorie (kleine Beugungswinkel, d.h. kleine Abweichungen von der geometrischen Optik). Wir führen hier nur eine qualitative Diskussion durch: Wir beschreiben das Licht durch eine klassische Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$, (ψ ist irgend eine der Komponenten des \vec{E} - bzw. \vec{B} -Feldes der Maxwell-Theorie). Seien $\psi_A(P)$, $\psi_B(P)$ und $\psi_{A,B}(P) = \psi_A(P) + \psi_B(P)$ die Wellenfunktionen des Lichts (im Punkt P zum fixierten Zeitpunkt t), für die Fälle (1), (2) bzw. (1,2). Die Intensität des Lichts am Punkt P ist gegeben

durch $|\psi(P)|^2$, also für²

$$\begin{aligned} (1) \quad I_A &= |\psi_A(P)|^2 \\ (2) \quad I_B &= |\psi_B(P)|^2 \\ (1, 2) \quad I_{A,B} &= |\psi_A + \psi_B|^2 \\ &= |\psi_A|^2 + |\psi_B|^2 + \psi_A^* \psi_B + \psi_B^* \psi_A, \\ &= I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \varphi, \end{aligned}$$

wobei φ die Phasenverschiebung zwischen ψ_A und ψ_B bezeichnet. Dabei wurden nur die folgenden Sachverhalte aus der klassischen Maxwell-Theorie verwendet:

i) das Superpositionsprinzip für Lösungen, das aus der Linearität der Maxwell-Gleichungen folgt.

ii) die Energiedichte des e.-m. Feldes ist proportional zu $|\vec{E}|^2 + |\vec{B}|^2$.

Obige Formeln liefern offensichtlich die in Abb. 1.2 skizzierten Intensitätsverteilungen, insbesondere also das Interferenzbild.

Kann dieses Phänomen auch im Rahmen der Teilchenvorstellung erklärt werden?

Die Quelle emittiert Photonen mit der Energie $E = h\nu$, und zwar isotrop und mit solch niedriger Intensität, daß “unterwegs” keine Wechselwirkung zwischen den Photonen stattfindet. Nach klassischen Vorstellungen haben diese Photonen wohldefinierte Trajektorien, d.h.: Photonen, die im Punkt P registriert wurden, sind **entweder** durch Spalt A, **oder** durch Spalt B geflogen. Dies führt aber zu einem offensichtlichen **Widerspruch**: Im Falle, daß beide Spalte geöffnet sind (Fall (1,2)), gibt es Punkte auf dem Schirm, an denen **weniger** Photonen ankommen, als im Falle, daß nur ein Spalt offen ist. Damit ist das Phänomen im Rahmen klassischer Vorstellungen nicht erklärbar.

Es existieren heute experimentelle Techniken, die es erlauben, “individuelle” Photonen zu produzieren (d. h., bevor das nächste Photon erzeugt wird, hat das vorherige schon den Schirm erreicht). Damit konnte obiges Experiment wirklich ausgeführt werden, siehe P. Grangier et. al.: Phys. Rev. Lett. **54**, 418 (1985).

Man beobachtet: Das Auftreffen der einzelnen Photonen ist **zufällig**, aber nach hinreichend langer Zeit ist die **Wahrscheinlichkeitsverteilung** für das Auftreffen eines Photons gleich der Intensitätsverteilung der obigen Lichtwelle

Dies legt folgendes Postulat nahe: $|\psi(\vec{x}, t)|^2$ ist die **Wahrscheinlichkeitsdichte** dafür, daß ein Photon im Punkt \vec{x} zum Zeitpunkt t auftrifft. Wir bezeichnen ψ als **Wahrscheinlichkeitsamplitude**.

Wir erhalten damit eine Unifizierung von Wellen- und Teilchenaspekt des Lichts. Beide Aspekte sind komplementär, sie zeigen sich mehr oder weniger deutlich, in Abhängigkeit vom konkreten Experiment. Obiges Postulat wird später zu einem der Grundpostulate der Quantenmechanik erhoben. Die Größe $\psi_{A,B} = \psi_A + \psi_B$ wird im Rahmen der Quantenmechanik als **Superposition reiner Zustände** bezeichnet. Wir sagen: Das Photon geht sowohl durch A als auch durch B, es interferiert mit sich selbst.

Wir diskutieren **eine alternative Versuchsanordnung**: Wir fügen zusätzliche Detektoren hinter Spalt A und B hinzu, die feststellen, durch welchen Spalt das Photon gegangen ist, (z.B.: ein kleiner grüner Kobold in der Platte schließt mit Wahrscheinlichkeit 1/2 jeweils einen der Spalte, wir wissen aber nicht, welchen). Durch diese **zusätzliche Messung** haben wir einen veränderten Zustand der Teilchen. Das Resultat für die Intensität lautet:

$$I = I_1 + I_2,$$

die Interferenzfähigkeit der Photonen wurde also zerstört. Später werden wir diesen Zustand des Systems (mit Wahrscheinlichkeit 1/2 liegt entweder ψ_A oder ψ_B vor) als **gemischt** bezeichnet. Wir haben in diesem Falle “keine vollständige Information” über das Quantensystem.

Obige Experimente zeigen auch: Wenn das Photon durch einen Spalt fliegt, so “spürt” es auch den zweiten Spalt, obwohl das Photon nicht “wissen” kann, ob dieser geöffnet ist. Das Konzept eines **streng lokalisierten** Teilchens ist natürlich mit diesen Sachverhalten nicht vereinbar.

²bis auf einen konstanten Zahlenfaktor

Zusammenfassung:

- 1.) Die Wahrscheinlichkeit p eines Ereignisses (Meßergebnis) ist gegeben durch das Quadrat $|\psi|^2$ der Wahrscheinlichkeitsamplitude ψ .
- 2.) Kann ein Ereignis in verschiedenen, ununterscheidbaren Alternativen realisiert werden, so ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude gleich der Summe der Wahrscheinlichkeitsamplituden der Alternativen: $\psi = \sum_i \psi_i$.
- 3.) Findet ein Experiment statt, bei dem bestimmt werden kann, welche Alternative stattgefunden hat, dann ist die Wahrscheinlichkeit p des Ereignisses gleich der Summe der Wahrscheinlichkeiten dieser unterschiedlichen Alternativen $p = \sum_i p_i$.

Eine tiefere Begründung theoretischer Natur für diese Punkte gibt es nicht.

Bemerkung 1.2

1. Eine völlig analoge Analyse kann man für massive Teilchen, etwa Elektronen, durchführen. Überlegen Sie sich, was wir beobachten, wenn wir anstelle von Photonen oder Elektronen Stahlkugeln (etwa aus einem streuenden Maschinengewehr) auf einen Metallpanzer mit 2 Öffnungen feuern.
2. Feynman bezeichnet die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, daß ein Teilchen vom Punkt s startend nach x gelangt, mit $\langle x|s \rangle$. Neben der Wahrscheinlichkeitsinterpretation von $|\langle x|s \rangle|^2$, stellt er 2 weitere Regeln für das Rechnen mit Wahrscheinlichkeitsamplituden auf, die wir für das Beispiel des Doppelspaltens aufschreiben:
 - i) Es gilt

$$\langle x|s \rangle = \langle x|s \rangle_A + \langle x|s \rangle_B,$$

wobei die Indizes die beiden alternativen Wege durch A bzw. B bezeichnen.

ii) Es gilt

$$\langle x|s \rangle_A = \langle x|A \rangle \langle A|s \rangle.$$

Eine tiefere Begründung für die zweite Regel werden wir später angeben.

Wir betrachten ein komplizierteres Beispiel: Hinter den Doppelspalt setzen wir noch einen Schirm mit 3 Öffnungen, bezeichnet mit a, b und c . Dann ist die Übergangsamplitude eine Summe über 6 alternative Wege:

$$\langle x|s \rangle = \sum_{i=A,B, \alpha=a,b,c} \langle x|\alpha \rangle \langle \alpha|i \rangle \langle i|s \rangle.$$

Diese scheinbar simplen Betrachtungen sind der Ausgangspunkt für das äußerst nützliche Konzept des Feynmanschen Pfadintegrals, siehe Feynman/Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, Mc-Graw-Hill, Inc. 1965.

Die Übergangsamplitude für ein Teilchen kann natürlich sehr kompliziert sein, in Abhängigkeit davon, was das Teilchen "unterwegs erlebt". Insbesondere kann sie zeitabhängig sein. Stellen wir uns vor, eine Quelle im Punkt \vec{r}_1 produziert Teilchen mit einer bestimmten Energie, die sich von da an frei bewegen. Dann gilt (bis auf einen Zahlenfaktor)

$$\langle \vec{r}_2 | \vec{r}_1 \rangle = \frac{\exp(\frac{i}{\hbar} p r)}{r},$$

wobei p den Betrag des Teilchenimpulses und r den Abstand zwischen \vec{r}_1 und \vec{r}_2 bezeichnen.

1.5 Bohrsches Atommodell und Sommerfeldsche Quantisierungsregeln

Das Atommodell von Bohr (1913) war ein wichtiger Meilenstein auf dem Weg zur Quantenmechanik. Es erklärte unter anderem die Balmer'schen Spektrallinien-Serie des Wasserstoffatoms (1885).

Bohrs Hypothesen:

1. Ein Atom besitzt eine diskrete Menge von stationären Zuständen charakterisiert durch Energien E_1, E_2, \dots . Emission und Absorption von Strahlung findet **nicht** auf stetige Weise (wie in der klassischen ED), sondern nur als Übergang zwischen diesen stationären Zuständen statt.
2. Beim Übergang von einem stationären Zustand E_i zu einem anderen $E_j < E_i$ (oder umgekehrt) wird ein Photon mit der Energie $E = h\nu = |E_i - E_j|$ abgestrahlt (bzw. absorbiert).
3. Ein Elektron im stationären Zustand beschreibt eine Kreisbahn und bewegt sich auf dieser nach den Gesetzen der klassischen Mechanik.
4. Die stationären Zustände eines Atoms sind festgelegt durch die Forderung, daß der Bahndrehimpuls eines Elektrons ein ganzzahliges Vielfaches von $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ist.

Für das **Wasserstoffatom** erhält man daraus sofort

$$E_n = -\frac{1}{2}\mu(\alpha c)^2 \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots,$$

wobei μ die reduzierte Masse ist und

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,03604(11)}$$

die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante bezeichnet. Für die Radien der Orbits ergibt sich

$$a_n = \frac{\hbar}{\mu(Z\alpha c)} n^2$$

und als Übergangsfrequenzen erhalten wir:

$$\nu_{n,m} = \frac{\mu(Z\alpha c)^2}{4\pi\hbar} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right); \quad m > n$$

Wir diskutieren eine wichtige Verallgemeinerung dieses Konzeptes: die Quantisierungsregeln von Sommerfeld/Wilson/Ishiwara (1915). Dazu betrachten wir ein klassisches integrables System mit Phasenraum P , $\dim P = 2n$, und n Bewegungskonstanten $\{H_i\}$, für die gilt:

- i) $\{H_i, H_j\} = 0$, d.h. die H_i sind in Involution.
- ii) Die Gradienten $\{dH_i\}$ sind linear unabhängig.

Sei die Niveaufläche

$$\Sigma_C := \left\{ (q, p) \in P : H_i(q, p) = C_i, i = 1, \dots, n \right\},$$

kompakt und zusammenhängend. Dann besagt ein Satz von Arnold, daß Σ_C die Struktur eines n -dimensionalen Torus besitzt,

$$\Sigma_C \cong T^n = \underbrace{S^1 \times S^1 \times \dots \times S^1}_n.$$

Es existieren an diese geometrischen Verhältnisse angepaßte Koordinaten im Phasenraum, die sogenannten Wirkungs- und Winkelkoordinaten (I_j, φ^j) :

$$I_j(C_1, \dots, C_n) := \oint_{\gamma_j} p_i(q, C) dq^i,$$

wobei γ_j eine geschlossene Kurve auf der j -ten Komponente des Torus T^n ist. Wir drücken die C_j durch die Wirkungsvariablen I_j aus und definieren, für einen beliebig gewählten Punkt q_0 ,

$$S(q, I) := \int_{q_0}^q p_i(q, I) dq^i .$$

Wir setzen

$$\varphi^j := \frac{\partial S}{\partial I_j} .$$

S ist die erzeugende Funktion einer kanonischen Transformation von den Koordinaten (p_j, q^j) zu den Wirkungs- und Winkelkoordinaten (I_j, φ^j) . Die Hamiltonfunktion ist nach dieser Transformation gegeben durch $H = H(I_1, \dots, I_n)$ und die Hamiltonsche Gleichungen haben die folgende Form:

$$\begin{aligned} \dot{\varphi}^j &= \frac{\partial H}{\partial I_j} = \omega^j , \\ \dot{I}_j &= \frac{\partial H}{\partial \varphi^j} = 0 . \end{aligned}$$

Dabei sind die ω^j charakteristische Frequenzen des Systems, (die entweder rational abhängig oder rational unabhängig sein können.) Die Integration des obigen Systems ist trivial und wir erhalten:

$$\varphi^j(t) = \omega^j t + \varphi^j(0) , \quad I_j(t) = I_j(0) .$$

Wir können nun die **Sommerfeldsche Quantisierungsregel** formulieren: Die Werte der Wirkungsvariablen sind quantisiert,

$$I_j = n_j h , \tag{1.16}$$

wobei die n_j ganze positive Zahlen sind. Die Bohrsche Quantisierungsbedingung ist offenbar ein Spezialfall dieses Postulates, denn aus $\int_0^{2\pi} d\varphi L = nh$ folgt $L = n\hbar$. Die Anwendung dieses Konzepts auf das Wasserstoffatom wird in den Übungen diskutiert. Man erhält für Energie und Drehimpuls

$$E_n = -\frac{1}{2}\mu(2\alpha c)^2 \frac{1}{n^2} , \quad L = n_\psi \hbar , \quad L_z = m\hbar$$

und für die Exzentrizität sowie die große und die kleine Halbachse der Trajektorie

$$\epsilon = \sqrt{1 - \frac{n_\psi^2}{n^2}} , \quad a = \frac{\hbar}{\mu(2\alpha c)} , \quad b = a \frac{n_\psi}{n} ,$$

wobei

$$n = n_r + n_\Theta + n_\phi , \quad n_\psi = n_\Theta + n_\phi , \quad |m| = n_\phi \leq n_\psi$$

und

$$I_r = n_r h , \quad I_\Theta = n_\Theta h , \quad I_\phi = n_\phi h .$$

1.6 Materiewellen. Die Schrödingergleichung

In Abschnitt 1.4 haben wir die Welle-Teilchen-Dualität von Licht behandelt. Gibt es einen solchen Dualismus auch für andere Materie, hat z.B. ein Elektron Wellencharakter?

L. de Broglie (1923): Die Bewegung eines Körpers mit dem Impuls p wird begleitet von einer Materiewelle mit der Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p} . \tag{1.17}$$

Die experimentelle Bestätigung dieser Aussage erfolgte durch Davisson/Gerner (1927) bei der Untersuchung der Beugung von Elektronen (mit $E \sim 54 \text{ eV}$) am Nickelkristall. Man fand die Wellenlänge $\lambda_{\text{exp.}} \cong 1,65 \text{ \AA}$, aus Gleichung (1.18) erhält man dagegen $\lambda_{\text{theor.}} = 1,67 \text{ \AA}$. Auch Präzisionsmessungen mit (einzelnen) Neutronen am Doppelspalt lieferten eine Bestätigung obiger These, vgl. J. Summhammer et. al., Phys. Lett. A **90**, 110 (1982).

Fundamentale Frage: Gibt es eine Gleichung, die diese Materiewellen beschreibt?

E. Schrödinger (1926): Wir betrachten ein Teilchen mit Masse m im (nicht explizit zeitabhängigen) Potential V . Die zugehörige klassische Hamilton–Jacobi–Gleichung hat die Gestalt

$$\frac{\partial S(\vec{x}, t)}{\partial t} = -H\left(\vec{x}, \frac{\partial S(\vec{x}, t)}{\partial \vec{x}}\right). \quad (1.18)$$

Mit $\vec{p} = \frac{\partial S}{\partial \vec{x}} \equiv \nabla S$ ergibt sich

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V = 0. \quad (1.19)$$

Damit ist eine Separation der Variablen möglich,

$$S(\vec{x}, t) = W(\vec{x}) - Et.$$

Einsetzen diese Zerlegung in (1.19) liefert:

$$|\nabla W| = |\vec{p}| = \sqrt{2m(E - V)}.$$

Geometrische Interpretation: Die Niveaulfläche $W(\vec{x}) = \text{const}$ ist eine feste 2-dimensionale Fläche (**Wellenfront**) im Konfigurationsraum \mathbb{R}^3 , über die sich die Flächen $S(\vec{x}, t) = \text{const}$ mit der Zeit hinweg schieben (siehe Abb. 1.3).

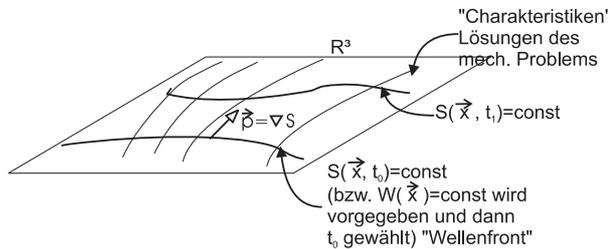


Abbildung 1.3: Wellenfront der Wirkungsfunktion

Man kann dies noch besser veranschaulichen: In der ‘Raum–Zeit’ $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}$ ist die Niveaulfläche $S(\vec{x}, t) \equiv W(\vec{x}) - Et = \text{const}$ eine feste 3-dimensionale Fläche. Für jede Wahl eines Zeitpunktes t wird aus dieser eine 2-dimensionale Fläche herausgeschnitten. Die Projektion dieser 2-dimensionalen Flächen auf den Konfigurationsraum \mathbb{R}^3 liefert die Bewegung der Wellenfront als Funktion der Zeit, (siehe Abb. 1.4). Sei $t \mapsto \gamma(t) = (\vec{x}(t), t) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^1$ eine Kurve auf der Niveaulfläche und $t \mapsto \tilde{\gamma}(t) = (\vec{x}(t)) \in \mathbb{R}^3$ deren Projektion auf den \mathbb{R}^3 . Da $W(\vec{x}) - Et = c$ gilt, folgt:

$$\nabla W \cdot \frac{d\vec{x}}{dt} = E, \quad \text{bzw.} \quad \frac{\nabla W}{|\nabla W|} \cdot \frac{d\vec{x}}{dt} = \frac{E}{|\nabla W|}.$$

Dies ist offensichtlich die Projektion des Geschwindigkeitsvektors der Kurve $\tilde{\gamma}$ auf den zur Wellenfront senkrechten Einheitsvektor, also die **Phasengeschwindigkeit der Wellenfront**:

$$v(\vec{x}) = \frac{E}{|\nabla W|}(\vec{x}) = \frac{E}{\sqrt{2m(E - V(\vec{x}))}}. \quad (1.20)$$

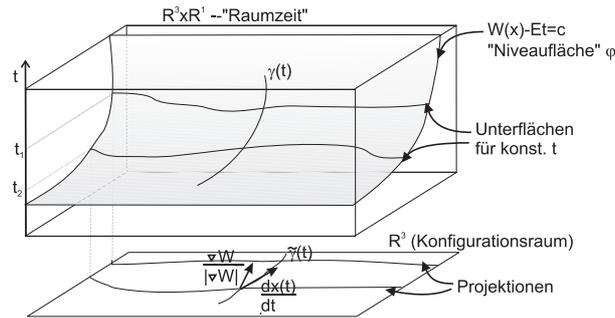


Abbildung 1.4: Wellenfront im Raum-Zeit-Bild

Schrödinger postulierte: Zur obigen Welle gehört eine Wellenfunktion

$$\psi(\vec{x}, t) = A(\vec{x}) e^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{x}, t)} = A(\vec{x}) e^{\frac{i}{\hbar} (W(\vec{x}) - Et)}, \quad (1.21)$$

mit einer noch zu bestimmenden Amplitude $A(\vec{x})$.

Damit erhalten wir die **Frequenz** der Welle zu $\omega = 2\pi\nu = E/\hbar$ und die **Wellenlänge**:

$$\lambda(\vec{x}) = \frac{v(\vec{x})}{\nu} = \frac{E}{\sqrt{2m(E-V)}} \frac{\hbar}{E} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-V)}} = \frac{\hbar}{|\vec{p}|},$$

in Übereinstimmung mit der de Broglieschen Hypothese.

Für die Bestimmung der **Gruppengeschwindigkeit** u ist zunächst die Dispersionsrelation $\omega = \omega(k)$ zu finden. Mit $\omega = 2\pi\nu$ und $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ ergibt sich aus obiger Formel für die Wellenlänge

$$2m(\hbar\omega - V) = \hbar^2 k^2,$$

und damit

$$\omega(k) = \frac{\hbar}{2m} k^2 + \frac{V}{\hbar}. \quad (1.22)$$

Die Gruppengeschwindigkeit ist also

$$u = \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k_0} = \frac{\hbar}{m} k_0 = \sqrt{\frac{2}{m} (E_0 - V)}.$$

Wenn wir nun für E_0 die Energie $\frac{1}{2}mv_T^2 + V$ des klassischen Teilchens einsetzen, so erhalten

$$u = v_T = \frac{p_0}{m},$$

d.h. die Gruppengeschwindigkeit ist gleich der Teilchengeschwindigkeit. Dies legt die Folgerung nahe: Das Konzept des "Punktteilchens" stellt nur eine gewisse klassische Approximation dar, genau genommen hat man es mit Materiewellenpaketen zu tun, die sich mit obiger Gruppengeschwindigkeit bewegen. Da man für makroskopische Objekte $\lambda \sim 10^{-34} m$ erhält, ist diese Approximation erlaubt.

Für die Wellenfunktion ψ wird nun die folgende **Wellengleichung** postuliert:

$$\Delta\psi(\vec{x}, t) - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(\vec{x}, t) = 0.$$

Mit (1.20) und (1.21) gilt

$$v^2 = \frac{E^2}{2m(E-V)} \quad \text{und} \quad \psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$$

und damit

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{x}) + V\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}). \quad (1.23)$$

Dies ist die **Schrödingergleichung** für stationäre Zustände. Wegen (1.21) gilt:

$$E\psi(\vec{x}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t).$$

Damit erhalten wir die **zeitabhängige Schrödingergleichung**:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x})\psi(\vec{x}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t). \quad (1.24)$$

Die Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung auf ein System von N Teilchen lautet:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, t) = \left\{ -\sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_j}\Delta_j + V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, t) \right\} \Psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, t). \quad (1.25)$$

Wir bemerken, daß man (1.25) aus der klassischen Hamiltonfunktion

$$H = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2m_j}p_j^2 + V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, t)$$

durch die Ersetzungsvorschrift

$$\begin{aligned} \vec{p}_j &\rightarrow -i\hbar\nabla_j \\ H &\rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{x}_j &\rightarrow \text{Multiplikation mit } \vec{x}_j. \end{aligned}$$

erhält. Diese Vorschrift wird später noch genauer kommentiert. Im nächsten Kapitel werden wir uns u.a. mit der physikalischen Interpretation der Wellenfunktion befassen.

Kapitel 2

Die Wellenfunktion

2.1 Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion

Wir multiplizieren die Schrödingergleichung für die Wellenfunktion ψ mit ψ^* ,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi \psi^*,$$

die Schrödingergleichung für die Wellenfunktion ψ^* dagegen mit ψ ,

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi^* \psi,$$

und bilden die Differenz dieser beiden Gleichungen:

$$i\hbar \frac{\partial(\psi^* \psi)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) = \nabla \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \right).$$

Bezeichnen wir

$$\varrho(\vec{x}, t) := \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) \equiv |\psi(\vec{x}, t)|^2 \quad (2.1)$$

$$\vec{j}(\vec{x}, t) := \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*), \quad (2.2)$$

so folgt aus obiger Rechnung eine **Kontinuitätsgleichung** für diese Größen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho(\vec{x}, t) + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0. \quad (2.3)$$

Da eine solche Gleichung aus der klassischen Maxwell-Theorie bekannt ist, nahm Schrödinger an, $e\varrho$ sei als Ladungsdichte des mit der Wellenfunktion ψ assoziierten Teilchens zu interpretieren. Dies ließ sich aber mit dem Verhalten von Wellenpaketen, wie in den nächsten Abschnitten diskutiert, nicht vereinbaren.

Max Born postulierte 1926: $\psi(\vec{x}, t)$ beschreibt eine Wahrscheinlichkeitswelle und $|\psi(\vec{x}, t)|^2$ ist die **Wahrscheinlichkeitsdichte** dafür, daß sich das Teilchen zum Zeitpunkt t am Punkt \vec{x} befindet. Damit beschreibt

$$P_D(t) = \int_{D \subset \mathbb{R}^3} d^3x \varrho(\vec{x}, t) \quad (2.4)$$

die **Wahrscheinlichkeit**, daß sich das Teilchen zum Zeitpunkt t im Raumgebiet D befindet. Die Größe $\vec{j}(\vec{x}, t)$ bezeichnen wir als **Wahrscheinlichkeitsstromdichte**. Dies ist sinnvoll, denn die Integration der Kontinuitätsgleichung über ein Raumgebiet D liefert unter Verwendung des Gaußschen Satzes:

$$\frac{d}{dt} \int_D d^3x \psi^* \psi = -\frac{\hbar}{2mi} \int_{\partial D} d\vec{S} \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*),$$

also

$$\frac{d}{dt}P_D(t) = - \int_{\partial D} d\vec{S} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t), \quad (2.5)$$

d.h., die Änderung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit in D ist gleich dem negativen Fluß des Wahrscheinlichkeitsstromes durch den Rand ∂D . Da die Wahrscheinlichkeit, daß sich das Teilchen irgendwo im Raum befindet, gleich 1 sein muß, müssen wir die folgende **Normierungsbedingung** fordern:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \varrho(\vec{x}, t) = 1. \quad (2.6)$$

Damit muß ψ im Unendlichen hinreichend schnell verschwinden.

Bemerkung 2.1

- i) Aus (2.3) und (2.6) folgt, daß \vec{j} im Unendlichen hinreichend schnell verschwinden muß: Dazu integrieren wir über eine Kugel K_R mit Radius R und Oberfläche S_R^2 ,

$$\frac{d}{dt} \int_{K_R} d^3x \varrho(\vec{x}, t) + \int_{S_R^2} d\vec{S} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0.$$

Daraus erhalten wir

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{S_R^2} d\vec{S} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0,$$

also $\vec{j} \rightarrow 0$ für $R \rightarrow \infty$.

- ii) Die obige Wahrscheinlichkeitsinterpretation hat natürlich nur Sinn, wenn ein konkretes Ereignis im Rahmen einer großen Zahl ähnlicher Ereignisse (Experimente unter gleichen Bedingungen) betrachtet werden kann. D.h., ein einzelnes Elektron im Spaltversuch ist Element eines statistischen Ensembles. Alle Elektronen dieses Ensembles werden durch die gleiche Wellenfunktion beschrieben!

2.2 Das freie Teilchen im Rahmen der Wellenmechanik

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns mit der freien Schrödingergleichung

$$i\hbar \partial_t \psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x}, t). \quad (2.7)$$

2.2.1 Newtonsche Gleichung für die Erwartungswerte

Wir definieren den **statistischen Mittelwert** des Teilchenortes zum Zeitpunkt t :

$$\langle \vec{x} \rangle := \int d^3x \vec{x} \varrho(\vec{x}, t). \quad (2.8)$$

Unter Verwendung der Kontinuitätsgleichung erhalten wir:

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{x} \rangle = \int d^3x \vec{x} \partial_t \varrho(\vec{x}, t) = - \int d^3x \vec{x} \nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = \int d^3x \vec{j}(\vec{x}, t). \quad (2.9)$$

Im letzten Schritt wurde partiell integriert und verwendet, daß für alle i

$$\int d^3x \nabla \cdot (x^i \vec{j}(\vec{x}, t)) = 0$$

gilt, (denn \vec{j} verschwindet im Unendlichen). Wir zeigen, daß

$$\frac{d}{dt} \int d^3x \vec{j}(\vec{x}, t) = 0 \quad (2.10)$$

gilt. Unter Verwendung der Schrödinger-Gleichung finden wir zunächst:

$$\begin{aligned}
\partial_t j_k &= \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \partial_k \partial_t \psi + \partial_t \psi^* \partial_k \psi - \partial_k \psi^* \partial_t \psi - (\partial_k \partial_t \psi^*) \psi) \\
&= \left(\frac{\hbar}{2m} \right)^2 \{ \psi^* \partial_k (\Delta \psi) - \Delta \psi^* \partial_k \psi - \partial_k \psi^* \Delta \psi + \partial_k (\Delta \psi^*) \cdot \psi \} \\
&= \left(\frac{\hbar}{2m} \right)^2 \{ (\psi^* \Delta (\partial_k \psi) - (\partial_k \psi) \Delta \psi^*) + (\psi \Delta (\partial_k \psi^*) - (\partial_k \psi^*) \Delta \psi) \} \\
&= \left(\frac{\hbar}{2m} \right)^2 \nabla \cdot (\psi^* \nabla (\partial_k \psi) - (\partial_k \psi) \nabla \psi^* + \psi \nabla (\partial_k \psi^*) - (\partial_k \psi^*) \nabla \psi). \tag{2.11}
\end{aligned}$$

Nun folgt (2.10) durch Integration dieser Gleichung über den ganzen Raum und unter Verwendung der Tatsache, daß die Wellenfunktion (und ihre partiellen Ableitungen) im Unendlichen verschwinden. Wir bezeichnen

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{x} \rangle = \langle \vec{v} \rangle \tag{2.12}$$

und nennen $\langle \vec{v} \rangle$ mittlere Geschwindigkeit. (Eine tiefere Begründung für diese Bezeichnung wird im weiteren nachgeliefert.) Aus obiger Rechnung haben wir

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \vec{x} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \vec{v} \rangle = 0, \tag{2.13}$$

also gilt für ein freies Teilchen in Analogie zur klassischen Mechanik:

$$\langle \vec{x} \rangle(t) = \langle \vec{v} \rangle \cdot t + \langle \vec{x} \rangle(0). \tag{2.14}$$

Max Born: Die Bewegung der Teilchen vollzieht sich nach Gesetzen der Wahrscheinlichkeitstheorie, aber die Wahrscheinlichkeit selbst bewegt sich nach deterministischen Gesetzen.

2.2.2 Das Zerfließen von Wellenpaketen

Zur genaueren Untersuchung der zeitlichen Evolution der Wahrscheinlichkeitsverteilung untersucht man Momente des Wahrscheinlichkeitsmaßes. Wir beschränken uns auf die **mittlere quadratische Schwankung**:

$$(\Delta \vec{x})^2 = \int d^3x \psi^* (\vec{x} - \langle \vec{x} \rangle)^2 \psi = \int d^3x (\vec{x} - \langle \vec{x} \rangle)^2 \varrho(\vec{x}, t), \tag{2.15}$$

Diese mißt die Abweichung vom Mittelwert des Ortes, d.h., sie beschreibt die Unschärfe der Ortsmessung. Wir bemerken, daß diese Größe natürlich von ψ abhängt. Genau genommen müssten wir also $\Delta_\psi \vec{x}$ schreiben. Wir berechnen unter Verwendung von (2.6) und (2.8)

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} (\Delta \vec{x})^2 &= - \int d^3x 2 (\vec{x} - \langle \vec{x} \rangle) \frac{d}{dt} \langle \vec{x} \rangle \varrho(\vec{x}, t) + \int d^3x (\vec{x} - \langle \vec{x} \rangle)^2 \frac{\partial}{\partial t} \varrho(\vec{x}, t) \\
&= -2 \langle \vec{v} \rangle \underbrace{\left(\int d^3x \vec{x} \varrho(\vec{x}, t) - \langle \vec{x} \rangle \int d^3x \varrho(\vec{x}, t) \right)}_{=0} - \int d^3x (\vec{x} - \langle \vec{x} \rangle)^2 \nabla \cdot \vec{j} \\
&= 2 \int d^3x (\vec{x} - \langle \vec{x} \rangle) \vec{j},
\end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt wieder partiell integriert wurde. Wir erhalten

$$\frac{d}{dt} (\Delta \vec{x})^2 = 2 \int d^3x \vec{x} \cdot \vec{j} - 2 \langle \vec{x} \rangle \langle \vec{v} \rangle. \tag{2.16}$$

Wir untersuchen wieder die zweite zeitliche Ableitung dieser Größe. Dazu berechnen wir zunächst unter Verwendung von (2.11):

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int d^3x \vec{x} \cdot \vec{j} &= \int d^3x \vec{x} \cdot \partial_t \vec{j} \\
&= \left(\frac{\hbar}{2m} \right)^2 \int d^3x x^i \nabla \cdot (\psi^* \nabla \partial_i \psi - (\nabla \psi^*) \partial_i \psi - (\partial_t \psi^*) \nabla \psi + (\partial_i \nabla \psi^*) \psi) \\
&= - \left(\frac{\hbar}{2m} \right)^2 \int d^3x (\partial^k x^i) \{ \psi^* \partial_k \partial_i \psi - \partial_k \psi^* \partial_i \psi - \partial_i \psi^* \partial_k \psi + (\partial_i \partial_k \psi^*) \psi \} \\
&= - \left(\frac{\hbar}{2m} \right)^2 \int d^3x (\psi^* \Delta \psi - (\nabla \psi^*) \cdot \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \cdot \nabla \psi + (\Delta \psi^*) \psi) \\
&= \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \int d^3x (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi).
\end{aligned}$$

Dabei wurde wieder mehrfach partiell integriert. Setzen wir diese Teilrechnung in (2.16) ein und verwenden wir (2.13), so folgt:

$$\begin{aligned}
\frac{d^2}{dt^2} (\Delta \vec{x})^2 &= 2 \int d^3x \vec{x} \cdot \partial_t \vec{j} - 2 \frac{d}{dt} \langle \vec{x} \rangle \langle \vec{v} \rangle - 2 \langle \vec{x} \rangle \frac{d}{dt} \langle \vec{v} \rangle \\
&= 2 \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \int d^3x (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi) - 2 \langle \vec{v} \rangle^2.
\end{aligned}$$

Wir führen die folgende Bezeichnung ein:

$$\left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \int d^3x (\nabla \psi^*) (\nabla \psi) - \langle \vec{v} \rangle^2 \equiv (\Delta \vec{v})^2. \quad (2.17)$$

Es handelt sich hier tatsächlich um die mittlere quadratische Schwankung der Geschwindigkeit. Dies wird aus den Betrachtungen der nächsten Abschnitte klar werden. Man kann zeigen, vgl. Hausaufgabe Nr. 5, daß $(\Delta \vec{v})^2$ für das freie Teilchens eine Bewegungskonstante ist,

$$\frac{d}{dt} (\Delta \vec{v})^2 = 0.$$

Verwenden wir diesen Sachverhalt, so folgt:

$$(\Delta \vec{x})^2(t) = (\Delta \vec{v})^2(t - t_1)^2 + (\Delta \vec{x})^2(t_1) \quad (2.18)$$

Folgerung: Die ‘‘räumliche Ausdehnung’’ der Wellenfunktion eines freien Teilchens (gemessen durch die mittlere quadratische Schwankung) wächst von einem bestimmten Zeitpunkt $t = t_1$ (der von ψ abhängt) an, (siehe Abb. 2.1). Man sagt, daß das Wellenpaket ‘‘zerfließt’’. Überlegen Sie sich, ob die Tatsache,

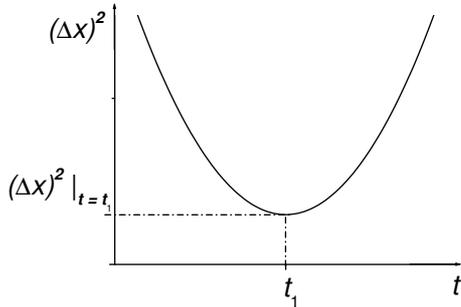


Abbildung 2.1: Das Verhalten der mittleren quadratischen Abweichung in der Zeit.

daß ein Wellenpaket offensichtlich zunächst eine Zeit lang seine räumliche Ausdehnung verringern kann, mit der Schrödinger-Gleichung vereinbar ist. (Untersuchen Sie das Verhalten der Schrödinger-Gleichung unter Zeitumkehr.)

2.2.3 Das Anfangswertproblem

Wir erinnern uns an die Definition der **Fouriertransformation**:

$$\mathcal{F}\psi \equiv \tilde{\psi}(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \psi(\vec{x}, t) \quad (2.19)$$

$$\mathcal{F}^{-1}\tilde{\psi} \equiv \psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \tilde{\psi}(\vec{p}, t), \quad (2.20)$$

und an die **Fourierdarstellung der δ -Distribution**:

$$\delta(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} \\ \delta(\vec{p} - \vec{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3x e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{x}}.$$

Durch Einsetzen der Fouriertransformierten (2.19) in die freie Schrödingergleichung (2.7) erhalten wir:

$$i\hbar \partial_t \tilde{\psi}(\vec{p}, t) = \frac{\vec{p}^2}{2m} \tilde{\psi}(\vec{p}, t).$$

Die Integration dieser Gleichung liefert:

$$\tilde{\psi}(\vec{p}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}t} \tilde{\psi}(\vec{p}, 0), \quad (2.21)$$

also

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}t} \tilde{\psi}(\vec{p}, 0).$$

Dies ist eine Superposition (Wellenpaket) von ebenen monochromatischen Wellen der Form $e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{x} - \frac{\vec{p}^2}{2m}t)}$. Wir bemerken, daß diese einzelnen ebenen Wellen nicht normierbar sind. Das Einsetzen der Fourierdarstellung

$$\tilde{\psi}(\vec{p}, 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x' e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}'} \psi(\vec{x}', 0)$$

liefert schließlich:

$$\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \int d^3x' e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}t} \psi(\vec{x}', 0).$$

Wir erhalten also das folgende Resultat:

$$\psi(\vec{x}, t) = \int d^3x' G(\vec{x} - \vec{x}', t) \psi(\vec{x}', 0), \quad (2.22)$$

wobei

$$G(\vec{x} - \vec{x}', t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\vec{p}^2}{2m}t} \quad (2.23)$$

den **Propagator** bzw. die **Greensche Funktion** des freien Teilchens bezeichnet. Offensichtlich erfüllt der Propagator die folgende Anfangsbedingung:

$$G(\vec{x} - \vec{x}', t)|_{t=0} = \delta(\vec{x} - \vec{x}'), \quad (2.24)$$

d.h.: ψ beschreibt eine "elementare Welle", ausgesandt zum Zeitpunkt $t = 0$ vom Punkt \vec{x}' . Man kann G explizit berechnen:

$$G(\vec{x} - \vec{x}', t) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{im(\vec{x} - \vec{x}')^2}{2\hbar t}\right). \quad (2.25)$$

(Hinweis: Gehen Sie über zu Kugelkoordinaten und führen Sie zunächst die Integration über die Winkelkoordinaten aus. Es entsteht ein Integral vom Typ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx x e^{-i(ax^2+2bx)} = -\frac{b}{a} \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{i\frac{b^2}{a}} e^{-i\frac{\pi}{4}}.$$

Diese Formel können Sie unter Verwendung des bekannten Fresnelschen Integrals beweisen.)

2.2.4 Das Gaußsche Wellenpaket

Das Gaußsche Wellenpaket entsteht durch die folgende Wahl des Profils zum Zeitpunkt $t = 0$:

$$\psi(\vec{x}, 0) = N e^{\frac{1}{2} \vec{x} M \vec{x}},$$

wobei N eine Normierungskonstante und M eine Matrix bezeichnen. Als einfachstes Beispiel können wir $M_{ij} = \frac{1}{l^2} \delta_{ij}$ wählen. Dabei ist l die charakteristische Ausdehnung der Gaußverteilung. Dieser Fall wird im Seminar ausführlich diskutiert. Man erhält:

$$\psi(\vec{x}, t) = N \left(1 + \frac{i\hbar t}{ml^2} \right)^{-3/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(l^2 + \frac{i\hbar t}{m} \right)^{-1} \vec{x}^2 \right]$$

und

$$\varrho(\vec{x}, t) = |N|^2 \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 l^4} \right)^{-3/2} \exp \left[-\left(l^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 l^2} \right)^{-1} \vec{x}^2 \right],$$

d.h., die charakteristische Ausdehnung des Wellenpaketes wächst mit der Zeit,

$$l(t) = \sqrt{l^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 l^2}} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \infty.$$

Das Wellenpaket ‐zerfließt‐ im Sinne der vorher geführten abstrakteren Diskussion der mittleren quadratischen Schwankung des Ortes.

2.3 Die Wahrscheinlichkeitsverteilung für den Impuls eines Teilchens

Frage: Existiert – genauso wie für die Ortsmessung – eine Wahrscheinlichkeitsamplitude $\phi(\vec{p})$, so daß $|\phi(\vec{p})|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Messung des Impulses \vec{p} ist?¹

Idee: Wir führen eine Impulsmessung durch, die auf einer Ortsmessung beruht. Zunächst demonstrieren wir die Grundidee der Einfachheit wegen in einer Dimension, siehe Abb. 2.2.

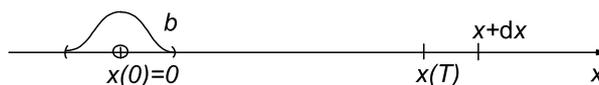


Abbildung 2.2: Impulsmessung in einer Dimension

Das Teilchen sei durch ein Wellenpaket $\psi(x, t)$ beschrieben, welches zum Zeitpunkt $t = 0$ am Ort $x(0) = 0$ mit charakteristischer Ausdehnung b lokalisiert sei. Es mögen vom Zeitpunkt $t = 0$ an keine Kräfte auf das Teilchen wirken. Wir beobachten, wie weit das Teilchen in der Zeit $t = T$ geflogen ist. Befindet es sich zum Zeitpunkt T im Intervall $(x, x + dx)$, so hat es die Geschwindigkeit $v = \frac{x}{T}$ und damit den Impuls $p = m \frac{x}{T}$. Diese Messung ist natürlich mit dem Fehler $\pm mb/T$ behaftet. Wir sehen, daß die Messung umso besser wird, je länger wir warten. Die Wahrscheinlichkeit $P(p) dp$, daß der Impuls zwischen p und $p + dp$ liegt, ist dann gegeben durch die Ortswahrscheinlichkeit $P(x) dx$.

Wir realisieren diese Idee in drei Dimensionen. Zu diesem Zwecke betrachten wir eine Kugel mit Radius R , auf deren Oberfläche Detektoren sitzen, die feststellen, wo das Teilchen den Rand der Kugel durchstoßen hat. Zum Zeitpunkt $t = 0$ sei das Teilchen im Raumgebiet V mit mittlerer Ausdehnung L lokalisiert und

¹Dies erscheint in den meisten Büchern als Postulat, siehe aber z. B. Feynmann/Hibbs für den eindimensionalen Fall.

von diesem Zeitpunkt an seien wieder alle wirkenden Kräfte ausgeschaltet. An die Stelle der klassischen Trajektorien tritt natürlich die Wahrscheinlichkeitsstromdichte der Wellenfunktion des Teilchens. Wir werden den Wahrscheinlichkeitsfluß durch ein Oberflächenelement ΔS berechnen. ΔS ist charakterisiert durch das entsprechende Raumwinkelelement $\Delta\Omega$ und durch den Einheitsvektor \vec{n} auf dem Kugelrand. Die geometrischen Verhältnisse werden durch Abb. 2.3 verdeutlicht.

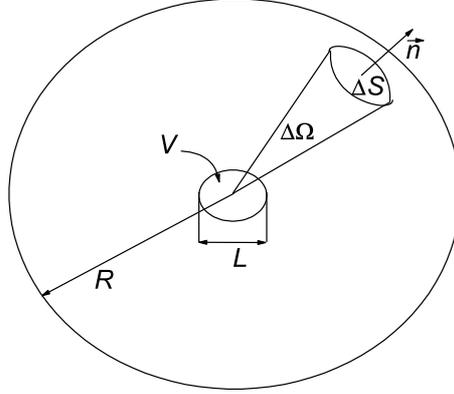


Abbildung 2.3: Impulsmessung im dreidimensionalen Fall

Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Teilchen in der Zeit zwischen t_1 und t_2 durch das Oberflächenelement ΔS fliegt, ist gegeben durch:

$$P(\Delta S, t_1, t_2) = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\Delta S} dS \vec{n} \cdot \vec{j}(\vec{n}R, t). \quad (2.26)$$

Es ist also zunächst $\vec{j}(\vec{n}R, t)$ für das freie Teilchen auf der Kugeloberfläche zu berechnen. Wir setzen dazu

$$\psi(\vec{x}, t) = \int d^3x' G(\vec{x} - \vec{x}', t) \psi(\vec{x}', 0) \quad \text{mit} \quad G(\vec{x} - \vec{x}', t) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t} \right)^{3/2} e^{\frac{im}{\hbar t}(\vec{x} - \vec{x}')^2}$$

in die Formel

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla_x \psi - (\nabla_x \psi^*) \psi)$$

für die Wahrscheinlichkeitsstromdichte ein. Dies ergibt

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \int d^3x' d^3x'' \{ & G^*(\vec{x} - \vec{x}', t) \nabla_x G(\vec{x} - \vec{x}'', t) \\ & - G(\vec{x} - \vec{x}'', t) \nabla_x G^*(\vec{x} - \vec{x}', t) \} \psi^*(\vec{x}') \psi(\vec{x}''), \end{aligned}$$

wobei $\psi(\cdot) = \psi(\cdot, 0)$ gesetzt wurde. Einsetzen der konkreten Gestalt von $G(\vec{x} - \vec{x}', t)$ liefert

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{x}, t) &= \frac{\hbar}{2mi} \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^3 \int d^3x' d^3x'' \left\{ \frac{im}{\hbar t} (\vec{x} - \vec{x}'') e^{\frac{im}{2\hbar t}(-(\vec{x}-\vec{x}')^2 + (\vec{x}-\vec{x}'')^2)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{im}{\hbar t} (\vec{x} - \vec{x}') e^{-\frac{im}{2\hbar t}((\vec{x}-\vec{x}'')^2 - (\vec{x}-\vec{x}')^2)} \right\} \psi^*(\vec{x}') \psi(\vec{x}'') \\ &= \frac{1}{t} \vec{x} \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^3 \int d^3x' d^3x'' e^{\frac{im}{\hbar t}(\vec{x}''^2 - \vec{x}'^2 + 2\vec{x}(\vec{x}' - \vec{x}''))} \psi_0^*(\vec{x}') \psi_0(\vec{x}'') \\ &\quad - \frac{1}{2t} \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^3 \int d^3x' d^3x'' (\vec{x}' + \vec{x}'') e^{\frac{im}{\hbar t}(\vec{x}''^2 - \vec{x}'^2 + 2\vec{x}(\vec{x}' - \vec{x}''))} \psi^*(\vec{x}') \psi(\vec{x}'') \end{aligned}$$

und mit $\vec{x} \equiv R\vec{n}$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \vec{j}(R\vec{n}, t) &= \frac{R}{t} \vec{n} \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^3 \left| \int d^3x' e^{-\frac{im}{\hbar t} R\vec{n} \cdot \vec{x}'} e^{\frac{im}{2\hbar t} \vec{x}'^2} \psi(\vec{x}') \right|^2 \\ &\quad - \frac{R}{2t} \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^3 \int d^3x' d^3x'' \frac{\vec{x}' + \vec{x}''}{R} e^{\frac{im}{2\hbar t} (\vec{x}''^2 - \vec{x}'^2 + 2\vec{x}' \cdot \vec{x}'')} \psi^*(\vec{x}') \psi(\vec{x}'') \end{aligned}$$

Wir betrachten den Grenzfall $R \rightarrow \infty$, $t \rightarrow \infty$ (da alle Kräfte ausgeschaltet sind, gilt $\frac{R}{t} = \text{const}$): Der Term $\frac{\vec{x}' + \vec{x}''}{R}$ im 2. Integral ist von der Größenordnung $\frac{L}{R}$, deshalb kann das zweite Integral im Vergleich zum ersten vernachlässigt werden. Da $t \rightarrow \infty$ und $|\vec{x}'| \sim L$ gilt, folgt $\frac{im}{2\hbar t} \vec{x}'^2 \rightarrow 0$. Unter Verwendung von (2.19) erhalten wir

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{n}R, t) &= \frac{R}{t} \vec{n} \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^3 \left| \int_V d^3x' e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{mR}{t} \vec{n} \cdot \vec{x}'} \psi(\vec{x}') \right|^2 \\ &= \frac{R}{t} \vec{n} \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^3 |\tilde{\psi}\left(\frac{mR\vec{n}}{t}\right)|^2 (2\pi\hbar)^{3/2} \quad (2.27) \end{aligned}$$

Nun setzen wir (2.27) in (2.26) ein und führen eine Variablentransformation $t \rightarrow v = R/t$ durch. Die Integrationsgrenzen bezeichnen wir wie folgt: $v_1 = R/t_2$ und $v_2 = R/t_1$.² Mit $dS = R^2 d\Omega$ und $dt = -\frac{t^2}{R} dv$ gilt

$$\begin{aligned} P(\Delta S, v_1, v_2) &= \int_{v_1}^{v_2} \frac{t^2}{R} dv \int_{\Delta S} d\Omega R^2 \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^3 \frac{R}{t} (2\pi\hbar)^3 |\tilde{\psi}(m\vec{v})|^2 \\ &= \int_{v_1}^{v_2} dv \int_{\Delta S} d\Omega v^2 m^3 |\tilde{\psi}(m\vec{v})|^2 \\ &= \int_{p_1}^{p_2} p^2 dp \int_{\Delta S} d\Omega |\tilde{\psi}(\vec{p})|^2 \end{aligned}$$

und beim Übergang zu kartesischen Koordinaten (D_p – Gebiet im Impulsraum)

$$P = \int_{D_p} d^3p |\tilde{\psi}(\vec{p})|^2. \quad (2.28)$$

Folgerung 2.1

- 1.) Wir haben gezeigt, daß

$$\varrho_p(\vec{p}) = |\tilde{\psi}(\vec{p})|^2$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Messung des Impulses \vec{p} ist, wenn das Teilchen zum Zeitpunkt $t = 0$ durch die Wellenfunktion $\psi(\vec{x})$ beschrieben wird. Die analoge Aussage gilt natürlich für jeden Zeitpunkt.

- 2.) Die Parsevalsche Identität sichert automatisch die Normierung der Fouriertransformierten:

$$1 = \int d^3x |\psi(\vec{x})|^2 = \int d^3p |\tilde{\psi}(\vec{p})|^2.$$

- 3.) Der statistische Mittelwert des Impulsvektors ist

$$\langle \vec{p} \rangle = \int d^3p \vec{p} \tilde{\psi}^*(\vec{p}) \tilde{\psi}(\vec{p}). \quad (2.29)$$

²Diese Bezeichnung ist sinnvoll, denn für $t_1 < t_2$ gilt $1/t_1 > 1/t_2$ und damit auch $v_2 = R/t_1 > v_1 = R/t_2$

Mit

$$\begin{aligned}\psi(\vec{x}, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) \quad \text{und} \\ \frac{\hbar}{i}\nabla\psi(\vec{x}, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \, \vec{p} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \tilde{\psi}(\vec{p}, t)\end{aligned}$$

bekommen wir

$$\begin{aligned}& \int d^3x \, \psi^*(\vec{x}, t) \frac{\hbar}{i}\nabla\psi(\vec{x}, t) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3x \int d^3p \int d^3p' \, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{x}} \tilde{\psi}^*(\vec{p}', t) \vec{p} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) \\ &= \int d^3p \int d^3p' \, \vec{p} \tilde{\psi}^*(\vec{p}', t) \tilde{\psi}(\vec{p}, t) \int \frac{d^3x}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{x}} \\ &= \int d^3p \, \vec{p} \tilde{\psi}^*(\vec{p}, t) \tilde{\psi}(\vec{p}, t) \equiv \langle \vec{p} \rangle(t).\end{aligned}$$

Wir sehen, daß \vec{p} im Ortsraum durch den Differentialoperator

$$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla \tag{2.30}$$

repräsentiert wird. Außerdem folgt aus obiger Rechnung:

$$\begin{aligned}\langle \vec{p} \rangle(t) &= \frac{\hbar}{i} \int d^3x \, \psi^*(\vec{x}, t) \nabla_x \psi(\vec{x}, t) \\ &= \frac{\hbar}{2i} \int d^3x \, (\psi^*(\nabla\psi) - (\nabla\psi^*)\psi) \\ &= m \int d^3x \, \vec{j}(\vec{x}, t) \\ &= m\langle \vec{v} \rangle.\end{aligned}$$

Dies liefert eine tiefere Begründung für die in Abschnitt 2.2.1 nahegelegte Interpretation von $\langle \vec{v} \rangle$ als statistischen Mittelwert der Geschwindigkeit.

4.) Die mittlere kinetische Energie des Teilchens ist

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{\vec{p}^2}{2m} \right\rangle &= \frac{1}{2m} \int d^3p \, \vec{p} \tilde{\psi}^*(\vec{p}, t) \vec{p} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \, \nabla\psi^* \nabla\psi.\end{aligned}$$

Aus der Definition (2.17),

$$(\Delta\vec{v})^2 = \frac{\hbar^2}{m^2} \int d^3x \, \nabla\psi^* \nabla\psi - \langle \vec{v} \rangle^2,$$

folgt damit

$$(\Delta\vec{v})^2 = \frac{1}{m^2} (\langle \vec{p}^2 \rangle - \langle \vec{p} \rangle^2) = \frac{1}{m^2} (\Delta\vec{p})^2. \tag{2.31}$$

Dies unterstützt die in Abschnitt 2.2.2 für das freie Teilchen gegebene physikalische Interpretation von $(\Delta\vec{v})^2$ als mittlere quadratische Schwankung der Geschwindigkeit. Wir sehen: Das Wellenpaket zerfließt umso schneller, je größer die Dispersion des Impulses ist.

- 5.) Zur Unterstützung der Interpretation der Größe E in der Schrödingergleichung (1.23) betrachten wir diese für das freie Teilchen,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi.$$

Fouriertransformation dieser Gleichung liefert

$$\frac{\vec{p}^2}{2m}\tilde{\psi}(\vec{p}) = E\tilde{\psi}(\vec{p}),$$

also ist E in diesem Falle identisch mit der kinetischen Energie des Teilchens.

- 6.) Genaue Informationen über den Impuls des Teilchens erhält man vermöge obiger Meßvorschrift erst für $R \rightarrow \infty, t \rightarrow \infty$. In diesem Limes geht die Information über die Lage des Teilchens in Impulsrichtung offensichtlich völlig verloren. Dies ist Ausdruck der Orts-Impuls-Unschärferelation, der wir uns nun zuwenden.

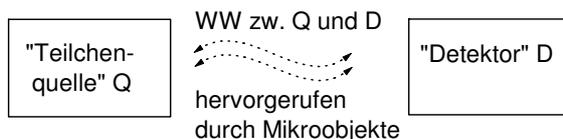
2.4 Messungen in der Quantenmechanik und Heisenbergsche Unschärferelation

erste Bemerkungen zu dieser Problematik

Das Problem: Jede Messung erfolgt mit makroskopischen Meßgeräten, wird also mit Hilfe klassischer physikalischer Begriffe ausgewertet (Fotoplatten, Geigerzähler, Wilsonsche Gaskammer, ...). D. h.:

- 1.) In diesem Sinne ist die Aufgabe der QM die Beschreibung makroskopischer Erscheinungen, die durch Mikroobjekte verursacht werden.
- 2.) Es liegt stets eine Wechselwirkung des Meßgerätes mit den Mikroobjekten vor, die **nicht vernachlässigt** werden kann. Mitunter ist diese Wechselwirkung drastisch, z.B. kann beim Messen der Energie eines Photons das Photon durch ein Elektron absorbiert werden und dadurch verschwinden.
- 3.) Nicht Einzelexperimente, sondern eine ganze Serie von Experimenten unter den gleichen Versuchsbedingungen sind nötig, damit die statistischen Daten mit den theoretischen Vorhersagen verglichen werden können. Die Mikroobjekte werden aber "individuell" erzeugt und beobachtet.

Schema eines Experiments:



Sowohl die Teilchenquelle als auch der Detektor sind makroskopische Geräte, z.B. könnte die Teilchenquelle eine Glühkathode sein, deren Elektronen durch ein e.-m. Feld beschleunigt wurden. Wir ordnen der Quelle eine Wellenfunktion ψ zu, die die von ihr emittierten Teilchen charakterisiert, z.B. ein Wellenpaket mit der für das Gerät charakteristischen Impulsverteilung. Der Detektor wird durch gewisse physikalische Größen beschrieben die gemessen werden (später nennen wir diese "Observable"), z.B. Orts- oder Impulsmessung, d.h. $A = \vec{x}, \vec{p}, \dots$ zum Zeitpunkt t . Jedes Einzelexperiment liefert ein Meßergebnis. Der statistische Mittelwert der Meßergebnisse ist

$$\langle A \rangle = \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) A \psi(\vec{x}, t). \quad (2.32)$$

Später werden wir diese Betrachtungen vertiefen. Zunächst konzentrieren wir uns auf die Diskussion einer charakteristischen Eigenschaft von Messungen in der Quantenmechanik: Gewisse physikalische Größen können nicht gleichzeitig beliebig scharf gemessen werden.

Die Orts–Impuls–Unschärferelation (Heisenberg 1927): Heisenberg schlug das folgende Gedankenexperiment vor: Ein Elektron wird durch ein Mikroskop mit Öffnungswinkel ϵ beobachtet. Das Licht, mit dem das Elektron bestrahlt wird, habe die Wellenlänge λ . Dann erlaubt das Auflösungsvermögen des Mikroskops, die Lage des Elektrons in x -Richtung mit einer Genauigkeit von

$$\Delta x = \frac{\lambda}{\sin \epsilon} \quad (2.33)$$

zu bestimmen, (Fraunhofersche Beugungstheorie, siehe H. Römer: “Theoretische Optik”).

Das Photon, das bei der Beobachtung am Elektron gestreut wird, liefert einen Impulsübertrag der Größenordnung

$$p \sim \frac{\hbar}{\lambda}$$

an das Elektron. Dieser Übertrag ist aber **nicht genau** bekannt, denn die Richtung des Photons ist nur im Rahmen des Strahlenbündels, das in das Mikroskop zurückgelangt, bestimmt. Die Ungenauigkeit der Projektion des Impulses auf die x -Richtung ist

$$\Delta p_x \sim \frac{\hbar}{\lambda} \sin \epsilon.$$

Also gilt:

$$\Delta x \Delta p_x \sim \hbar, \quad (2.34)$$

d.h.: Ort und Impuls sind gleichzeitig nicht genau bestimmbar.

Wir identifizieren nun Δx und Δp_x mit den mittleren quadratischen Schwankungen und analysieren das Produkt $\Delta x \Delta p_x$. Es gilt:

$$\Delta x = \left\{ \int d^3x (x - \langle x \rangle)^2 \psi^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}) \right\}^{1/2}$$

$$\Delta p_x = \left\{ \int d^3p (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \tilde{\psi}^*(\vec{p}) \tilde{\psi}(\vec{p}) \right\}^{1/2}$$

mit

$$\langle x \rangle = \int d^3x x \psi^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}),$$

$$\langle p_x \rangle = \int d^3p p_x \tilde{\psi}^*(\vec{p}) \tilde{\psi}(\vec{p}) = \int d^3x \psi^*(\vec{x}) \frac{\hbar}{i} \partial_x \psi(\vec{x}).$$

Wir betrachten die folgende quadratische Form:

$$Q(\alpha) = \int d^3x | (p_x - \langle p_x \rangle - i\alpha(x - \langle x \rangle)) \psi(\vec{x}) |^2,$$

wobei α ein beliebiger reeller Parameter ist. Offenbar gilt für alle α :

$$Q(\alpha) \geq 0.$$

Ausmultiplizieren liefert:

$$\begin{aligned}
Q(\alpha) &= \int d^3x \left(-\frac{\hbar}{i} \partial_x \psi^* - \langle p_x \rangle \psi^* + i\alpha(x - \langle x \rangle) \psi^* \right) \\
&\quad \times \left(\frac{\hbar}{i} \partial_x \psi - \langle p_x \rangle \psi - i\alpha(x - \langle x \rangle) \psi \right) \\
&= \alpha^2 \int d^3x (x - \langle x \rangle)^2 \psi^* \psi + \alpha \hbar \int d^3x (x - \langle x \rangle) (\psi^* \partial_x \psi + \partial_x \psi^* \psi) \\
&\quad + \int d^3x \left(-\frac{\hbar}{i} \partial_x \psi^* - \langle p_x \rangle \psi^* \right) \left(\frac{\hbar}{i} \partial_x \psi - \langle p_x \rangle \psi \right) \\
&= \alpha^2 (\Delta x)^2 - \alpha \hbar \int d^3x \partial_x (x - \langle x \rangle) \psi^* \psi + (\Delta p_x)^2 \\
&= \alpha^2 (\Delta x)^2 - \alpha \hbar + (\Delta p_x)^2.
\end{aligned}$$

Wegen $Q(\alpha) \geq 0$ folgt:

$$\alpha^2 - \alpha \frac{\hbar}{(\Delta x)^2} + \frac{(\Delta p_x)^2}{(\Delta x)^2} \geq 0,$$

also

$$\frac{(\Delta p_x)^2}{(\Delta x)^2} - \left(\frac{\hbar}{2(\Delta x)^2} \right)^2 \geq 0$$

für alle α . Dies liefert die **Heisenbergsche Unschärferelation**:

$$(\Delta p_x)(\Delta x) \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.35)$$

Analoge Relationen gelten natürlich für die y - und z -Komponente von Ort und Impuls.

Wenn $Q(\alpha) = 0$ ist, gilt

$$\frac{\hbar}{i} \partial_x \psi(\vec{x}) = (\langle p_x \rangle + i\alpha(x - \langle x \rangle)) \psi(\vec{x})$$

und damit

$$\psi(\vec{x}) \sim \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \langle p_x \rangle x - \frac{\alpha}{2\hbar} (x - \langle x \rangle)^2 \right\}$$

d.h.: die minimale Unbestimmtheit wird durch eine Gaußsche Verteilung realisiert. Der Parameter α ist in dieser Formel natürlich durch die mittlere quadratische Schwankung des Ortes bzw. die mittlere quadratische Schwankung des Impulses ausdrückbar. Man findet

$$\alpha = \frac{2(\Delta p_x)^2}{\hbar} = \frac{\hbar}{2(\Delta x)^2}.$$

Damit erhält man eine 1-1-Beziehung zwischen 4-Tupeln $(\langle p_x \rangle, \langle x \rangle, \Delta p_x, \Delta x)$, die der Relation

$$(\Delta p_x)(\Delta x) = \frac{\hbar}{2} \quad (2.36)$$

genügen, und Wellenfunktionen der obigen Gestalt.

2.5 Das Korrespondenzprinzip und die Ehrenfestschen Gleichungen

Das Korrespondenzprinzip: Die QM macht für Prozesse, deren "typische Wirkung" viel größer ist als \hbar keine wesentlich anderen Aussagen als die klassische Mechanik, (z.B.: Elektronenstrahl mit einer Breite, die viel größer ist als die de Brogliesche Wellenlänge λ).

Wir präzisieren dies: Man fragt sich, ob und unter welchen Bedingungen die statistischen Mittelwerte von Ort und Impuls (für ein Wellenpaket ψ) in guter Näherung als klassische Observable aufgefaßt werden können. Dies scheint offenbar nur sinnvoll zu sein, wenn die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

1. Die Bewegungsgleichungen für die statistischen Mittelwerte haben die Gestalt der Newtonschen Gleichungen.
2. Die mittleren quadratischen Schwankungen des Wellenpaketes ψ sind klein im Vergleich zu den Abmessungen des Systems (zumindest in einem bestimmten Zeitintervall).

Wir diskutieren zunächst den ersten Punkt: Für ein freies Teilchen hatten wir bereits gezeigt:

$$\frac{d}{dt}\langle\vec{x}\rangle = \frac{1}{m}\langle\vec{p}\rangle.$$

Der Leser überzeugt sich leicht davon, daß dies auch für ein Teilchen unter dem Einfluß einer Potentialkraft gilt. Wir berechnen die zeitliche Ableitung des Impuls-Mittelwertes unter Verwendung der Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\vec{p}\rangle &= \frac{d}{dt} \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\vec{x}, t) \\ &= \int d^3x \left\{ \partial_t \psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \psi + \psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \partial_t \psi \right\}, \\ &= \int d^3x \left\{ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi^* \nabla \psi - \psi^* \nabla \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi \right\} \\ &= \int d^3x \left\{ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* \right) \nabla \psi - \psi^* \nabla \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \right) - \psi^* (\nabla V) \psi \right\}. \end{aligned}$$

Nach partieller Integration verschwinden die ersten beiden Terme, so daß folgt:

$$\frac{d}{dt}\langle\vec{p}\rangle = - \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) (\nabla V(\vec{x}, t)) \psi(\vec{x}, t) \equiv \langle\vec{F}(\vec{x}, t)\rangle.$$

Wir erhalten also (für ein Teilchen unter dem Einfluß einer Potentialkraft):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle\vec{x}\rangle &= \frac{1}{m}\langle\vec{p}\rangle, \\ \frac{d}{dt}\langle\vec{p}\rangle &= \langle\vec{F}(\vec{x}, t)\rangle. \end{aligned} \tag{2.37}$$

Dies sind die **Gleichungen von P. Ehrenfest (1927)**. Wir bemerken, daß im allgemeinen

$$\langle\vec{F}(\vec{x}, t)\rangle \neq \vec{F}(\langle\vec{x}\rangle, t),$$

gilt. Gleichheit gilt nur, wenn \vec{F} linear von \vec{x} abhängt, z.B. im Falle des harmonischen Oszillators. Unter welchen weiteren Umständen gilt in guter Näherung $\frac{d}{dt}\langle\vec{p}\rangle = \vec{F}(\langle\vec{x}\rangle, t)$? Um dies zu klären, entwickeln

wir das Kraftfeld in der Umgebung des Punktes $\langle \vec{x} \rangle$ in eine Taylor-Reihe:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{F}(\vec{x}, t) \rangle &= \int d^3x \psi^* \vec{F}(\vec{x}, t) \psi \\
&= \int d^3x \psi^* \left\{ \vec{F}(\langle \vec{x} \rangle, t) + \frac{\partial \vec{F}}{\partial x^i} \Big|_{x^i=\langle x^i \rangle} (x^i - \langle x^i \rangle) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \vec{F}}{\partial x^i \partial x^j} \Big|_{x^i=\langle x^i \rangle} (x^i - \langle x^i \rangle)(x^j - \langle x^j \rangle) + \dots \right\} \psi \\
&= \vec{F}(\langle \vec{x} \rangle, t) + \frac{\partial \vec{F}}{\partial x^i} \Big|_{x^i=\langle x^i \rangle} \underbrace{\int d^3x \psi^* (x^i - \langle x^i \rangle) \psi}_{=0} \\
&\quad + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \vec{F}}{\partial x^i \partial x^j} \Big|_{\vec{x}=\langle \vec{x} \rangle} \int d^3x \psi^* (x^i - \langle x^i \rangle)(x^j - \langle x^j \rangle) \psi + \dots \\
&= \vec{F}(\langle \vec{x} \rangle, t) + \frac{1}{2} \underbrace{\langle (x^i - \langle x^i \rangle)(x^j - \langle x^j \rangle) \rangle}_{\sim l^2} \underbrace{\frac{\partial^2 \vec{F}}{\partial x^i \partial x^j} \Big|_{x^i=\langle x^i \rangle}}_{\sim 1/L^2} + \dots
\end{aligned}$$

Dabei ist l die charakteristische Ausdehnung des Wellenpaketes und L die charakteristische Ausdehnung des Systems, (die ‘‘Geschwindigkeit’’ der rumlichen nderung von \vec{F}). Dann verhalt sich der quadratische Term wie $(\frac{l}{L})^2$ und die restlichen Terme sind abschatzbar durch hohere Potenzen dieses Quotienten. D.h., fur $\frac{l}{L} \ll 1$ gilt in guter Naherung:

$$\langle \vec{F}(\vec{x}, t) \rangle = \vec{F}(\langle \vec{x} \rangle, t).$$

Da die Wellenfunktion zerfliet, wird irgendwann $l \sim L$ gelten, so da obige Bedingung verletzt wird. Wir hatten dies schon fruher fur den Fall des Gauschen Wellenpaketes gesehen. Fur dessen charakteristische Ausdehnung gilt

$$l(t) = \sqrt{l^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 l^2}} \rightarrow \infty$$

fur $t \rightarrow \infty$, vgl. Abschnitt 2.2.4. Wir bemerken: Nur fur $\hbar \rightarrow 0$ bleibt $l(t) \sim l$ fur alle Zeiten. Diesen Grenzwert nennt man den ‘‘klassischen Limes’’. Wir machen dazu nur die folgende heuristische Bemerkung: Setzt man den Ansatz

$$\psi(\vec{x}, t) = N \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\vec{x}, t)\right)$$

in die Schrodingergleichung ein, so ergibt sich

$$\frac{\partial}{\partial t} S + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V - \frac{i\hbar}{2m} \Delta S = 0.$$

Wir sehen, da wir im Grenzwert $\hbar \rightarrow 0$ die Hamilton-Jacobi-Gleichung fur die klassische Wirkungsfunktion erhalten.

Fur eine tiefere Diskussion des klassischen Limes verweisen wir auf Galindo/Pascual S. 117.

2.6 Die Wellenfunktion als Vektor im Hilbertraum. Reine Zustande

Aus der bisherigen Diskussion ergeben sich folgende Eigenschaften der Wellenfunktion:

- i) Sowohl aus theoretischen Gründen (Linearität der Schrödinger-Gleichung) als auch aus experimentellen Gründen (vgl. mit der Diskussion des Doppelspaltexperiments) ist mit ψ_1 und ψ_2 auch $\alpha\psi_1 + \beta\psi_2$ eine Wellenfunktion. Wir nennen dies das (naive) **Superpositionsprinzip**. Im Rahmen der Diskussion der **Superauswahlregeln** kommen wir auf das Superpositionsprinzip zurück.
- ii) Aus der Normierungsbedingung (2.6),

$$\int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) = 1,$$

folgt: ψ muß quadratintegabel sein, dann kann ψ so normiert werden, daß die obige Bedingung gilt.

D.h., die Wellenfunktionen bilden einen linearen Raum und müssen quadratintegabel sein. Damit wird das folgende mathematisches Modell nahegelegt: Bezeichnen wir

$$\psi(t)(\vec{x}) := \psi(\vec{x}, t),$$

so ist, für jedes t , $\psi(t)$ ein Element des Hilbertraums der quadratintegablen Funktionen³ auf dem \mathbb{R}^3 mit dem Lebesgue-Maß d^3x :

$$\psi(t) \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \equiv \mathcal{H}.$$

Die mathematische Struktur von \mathcal{H} :

- i) Seien $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}$ und $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$. Dann ist auch $\alpha\psi_1 + \beta\psi_2 \in \mathcal{H}$, d.h.: \mathcal{H} ist ein komplexer Vektorraum.
- ii) Wir haben ein natürliches Skalarprodukt in \mathcal{H} : Für $\phi, \psi \in \mathcal{H}$ definieren wir

$$\langle \phi | \psi \rangle := \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \phi^*(\vec{x}) \psi(\vec{x}). \quad (2.38)$$

Dies ist tatsächlich ein Skalarprodukt, denn es gilt:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \alpha\psi_1 + \beta\psi_2 \rangle &= \alpha \langle \phi | \psi_1 \rangle + \beta \langle \phi | \psi_2 \rangle, \\ \langle \phi | \psi \rangle^* &= \langle \psi | \phi \rangle, \\ \langle \phi | \phi \rangle &\geq 0, \quad \langle \phi | \phi \rangle = 0 \Rightarrow \phi = 0. \end{aligned} \quad (2.39)$$

- iii) \mathcal{H} ist vollständig im Sinne der Norm $\|\psi\| = \langle \psi | \psi \rangle^{1/2}$, d.h. jede Cauchy-Folge konvergiert in \mathcal{H} im Sinne der Norm $\|\cdot\|$.

Damit ist $\mathcal{H} \equiv L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ in der Tat ein Hilbertraum.

Bemerkung 2.2

- (i) Eine physikalische Interpretation hat nur die Funktion $\psi^*\psi$. Insbesondere sind ψ und $e^{i\alpha}\psi$, $\alpha \in \mathbb{R}$, physikalisch äquivalent, da die Transformation $\psi \rightarrow e^{i\alpha}\psi$ die Funktion $\psi^*\psi$ invariant läßt. Die durch diese Transformationen definierten Äquivalenzklassen in \mathcal{H} heißen **Strahlen** in \mathcal{H} . Da für Wellenfunktionen außerdem $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ gilt, sind die physikalisch relevanten Äquivalenzklassen $\{\psi(t)\}$ **Einheitsstrahlen im Hilbertraum**. Wir nennen diese Größen **reine Zustände**.
- (ii) Nicht immer ist der Hilbertraum der Zustände identisch mit dem $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$, aber der Zustandsraum soll immer ein Hilbertraum sein.

³Genauer gesagt, sind Elemente des Raumes Klassen von Funktionen, die sich nur auf einer Menge vom Maß Null unterscheiden

Da wir es, wie eben bemerkt, mit verschiedenen Zustandsräumen zu tun haben werden, geben wir die abstrakte Definition des Hilbertraums an:

Definition 2.1 Ein komplexer Vektorraum \mathcal{H} heißt **Prähilbertraum**, falls eine Abbildung

$$\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$$

mit den folgenden Eigenschaften existiert

$$\begin{aligned} \langle \phi | \alpha\psi_1 + \beta\psi_2 \rangle &= \alpha\langle \phi | \psi_1 \rangle + \beta\langle \phi | \psi_2 \rangle, \\ \langle \phi | \psi \rangle^* &= \langle \psi | \phi \rangle, \\ \langle \phi | \phi \rangle &\geq 0, \quad \langle \phi | \phi \rangle = 0 \Rightarrow \phi = 0, \end{aligned}$$

für beliebige $\phi, \psi \in \mathcal{H}$ und $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$. Die Abbildung $\langle \cdot | \cdot \rangle$ heißt **Skalarprodukt**.

Sei \mathcal{H} ein Prähilbertraum. Man zeigt leicht, vgl. Hausaufgabe Nr. 9:

i) Es gilt die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung

$$|\langle \psi | \phi \rangle|^2 \leq \langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle \quad (2.40)$$

für beliebige $\psi, \phi \in \mathcal{H}$.

ii) Die Abbildung $\mathcal{H} \ni \psi \mapsto \|\psi\| \in \mathbb{R}$, definiert durch

$$\|\psi\| := \langle \psi | \psi \rangle^{\frac{1}{2}} \quad (2.41)$$

ist eine Norm in \mathcal{H} .

Damit hat man natürlich eine Metrik

$$d(\phi, \psi) = \langle \phi - \psi | \phi - \psi \rangle^{\frac{1}{2}} \quad (2.42)$$

und die aus der Theorie der metrischen Räume bekannten Begriffe von Konvergenz, Vollständigkeit und Dichtheit sind hier anwendbar.

Definition 2.2 Ein Prähilbertraum $(\mathcal{H}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$, der in der natürlichen Norm (2.41) vollständig ist, heißt **Hilbertraum**.

Wir beschränken uns im weiteren auf **separable** Hilberträume, (solche, für die eine abzählbare dichte Untermenge existiert).

Definition 2.3 Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum. Eine Familie $\{e_\lambda\}_{\lambda \in \Lambda}$ von Vektoren \mathcal{H} heißt **vollständiges Orthonormalsystem** oder **orthonormale Basis**, falls gilt:

$$i) \langle e_\lambda | e_{\lambda'} \rangle = \delta_{\lambda\lambda'},$$

ii) Gilt $\langle \psi | e_\lambda \rangle = 0$ für alle λ , so folgt $\psi = 0$.

Wir bemerken, daß ein System von orthonormalen Vektoren zwangsläufig linear unabhängig ist. Man verschafft sich aus einer beliebigen Familie von linear unabhängigen Vektoren ein Orthonormalsystem durch die sogenannte Schmidtsche Orthonormierungsprozedur.

Satz 2.1 Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum.

i) Jedes Orthonormalsystem in \mathcal{H} kann zu einer orthonormalen Basis vervollständigt werden.

ii) Sei $\{e_\lambda\}_{\lambda \in \Lambda}$ eine orthonormale Basis. Dann gilt für jeden Vektor $\psi \in \mathcal{H}$

$$\psi = \sum_{\lambda \in \Lambda} \langle e_\lambda | \psi \rangle e_\lambda \quad (\text{normkonvergente Summe}), \quad (2.43)$$

und

$$\|\psi\|^2 = \sum_{\lambda \in \Lambda} |\langle e_\lambda | \psi \rangle|^2. \quad (2.44)$$

Sei, umgekehrt, $\sum_{\lambda \in \Lambda} |c_\lambda|^2 < \infty$, $c_\lambda \in \mathbb{C}$, dann konvergiert $\sum_{\lambda \in \Lambda} c_\lambda e_\lambda$ zu einem Vektor in \mathcal{H} .

Für separable Hilberträume ist Λ identisch mit der Menge \mathbb{N} der natürlichen Zahlen (oder einer Unter-
menge von \mathbb{N}), d.h. im separablen Hilbertraum existiert eine **abzählbare** orthonormale Basis.

Beispiele:

i) Der \mathbb{C}^n mit dem Skalarprodukt

$$\langle x | y \rangle = \sum_{k=1}^n x_k^* y_k \equiv x^\dagger y.$$

Dabei bedeutet $x^\dagger = x^{*T}$ die Hermitesche Konjugation (komplexe Konjugation und Transposition).
Offensichtlich ist die Standardbasis

$$(e_1 = (1, 0, \dots, 0), e_2 = (0, 1, \dots, 0), \dots, e_n = (0, 0, \dots, 1))$$

eine orthonormale Basis im Sinne der obigen Definition. Es gilt

$$x = x^i e_i \equiv \sum_{i=1}^n x^i e_i,$$

für jeden Vektor $x \in \mathbb{C}^n$.

Man zeigt: Alle endlichdimensionalen Hilberträume sind zu \mathbb{C}^n isomorph.

ii) Der Raum l^2 der komplexwertigen Folgen $x = \{x_k\}_{k=1}^\infty$, mit der Eigenschaft

$$\sum_{k=1}^\infty |x_k|^2 < \infty.$$

Das Skalarprodukt in l^2 ist definiert durch

$$\langle x | y \rangle = \sum_{k=1}^\infty x_k^* y_k$$

und die Vektoren

$$(e_1 = (1, 0, \dots), e_2 = (0, 1, \dots), \dots)$$

bilden eine orthonormale Basis. Damit ist der l^2 separabel.

Man zeigt: Alle unendlich-dimensionalen separablen Hilberträume sind zum l^2 isomorph. (Die Be-
weisidee: Sei \mathcal{H} ein separabler Hilbertraum mit Orthonormalbasis e_n . Wir definieren die Abbildung

$$\mathcal{H} \ni \psi \mapsto \{ \langle e_n | \psi \rangle \} \in l^2$$

Man zeigt leicht, daß diese Abbildung wohldefiniert und surjektiv ist und daß sie das Skalarprodukt
invariant läßt.)

- iii) Der Raum $L^2(\Omega, dx)$, der quadratintegralen Funktionen auf der (meßbaren) Teilmenge $\Omega \subseteq \mathbb{R}$, versehen mit dem Lebesgue-Maß dx . Für jedes $\psi \in L^2(\Omega, dx)$ muß gelten

$$\int_{\Omega} dx |\psi|^2 < \infty.$$

Wichtige Beispiele aus dieser Klasse sind:

- a) der $L^2([0, 2\pi], dx)$, mit der Orthonormalbasis

$$\{e_n(x)\} = \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{inx} \right\}.$$

- b) der $L^2(\mathbb{R}^1, dx)$ mit der Orthonormalbasis

$$e_n(x) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n! \pi^{1/2}}} e^{\frac{1}{2}x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \equiv \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n! \pi^{1/2}}} e^{\frac{1}{2}x^2} H_n(x), \quad (2.45)$$

wobei $H_n(x)$ die Hermiteschen Polynome sind.

- iv) Der zu Beginn des Abschnittes bereits diskutierte Raum $L^2(\mathbb{R}^n, d^n x)$.

Der Diracsche Bra-Ket-Formalismus: Wir schreiben für den Vektor ψ im weiteren oft $|\psi\rangle$ und nennen ihn dann **Ket-Vektor**. Sei $\mathcal{H}^* \equiv L(\mathcal{H}, \mathbb{C})$ der Raum der stetigen linearen Funktionale auf \mathcal{H} . Elemente aus \mathcal{H}^* heißen **Bra-Vektoren**, wir schreiben für sie $\langle\phi|$. Wir erinnern den Leser an den

Satz 2.2 (Riesz/Frechet) Für jedes lineare, stetige Funktional l auf einem Hilbertraum \mathcal{H} existiert ein eindeutig bestimmtes Element $\phi \in \mathcal{H}$, so daß für alle $\psi \in \mathcal{H}$ gilt:

$$l(\psi) = \langle\phi|\psi\rangle.$$

D.h., die Abbildung $\langle\phi| : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ ist definiert durch $\langle\phi|(\psi) := \langle\phi|\psi\rangle$. Die gleiche Bezeichnungsweise verwenden wir auch für die Basiselemente e_n . Wir schreiben $|e_n\rangle$ und mit (2.43) erhalten wir:

$$|\psi\rangle = \sum_k \langle e_k|\psi\rangle |e_k\rangle \equiv \sum_k |e_k\rangle \langle e_k|\psi\rangle. \quad (2.46)$$

Wir fassen diese Diskussion zusammen:

Postulat I: Ein quantenmechanisches System wird beschrieben durch einen separablen Hilbertraum \mathcal{H} . Ein reiner Zustand des Systems wird, zu einem Zeitpunkt t , beschrieben durch einen Einheitsstrahl $\{|\psi(t)\rangle\}$ in \mathcal{H} .

Für eine Vertiefung der in diesem Abschnitt behandelten mathematischen Sachverhalte verweisen wir den Leser auf *M.Reed, B. Simon, "Methods of Modern Mathematical Physics", Teil I, Acad. Press.*

Kapitel 3

Observable

In den letzten Kapiteln sahen wir, daß in der Ortsdarstellung der Ort \vec{x} durch den Multiplikationsoperator \vec{x} , der Impuls \vec{p} durch den Differentialoperator $\frac{\hbar}{i}\nabla$ und der Hamiltonian durch $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$ repräsentiert wurden. Diese Operatoren wirken auf die Wellenfunktion ψ .

Fassen wir nun $\psi(t)$ als Vektor im Hilbertraum \mathcal{H} auf, so sind die obigen Operatoren **lineare** Operatoren in \mathcal{H} . Sehr oft sind solche Operatoren **unbeschränkt**, doch zunächst behandeln wir der Einfachheit wegen:

3.1 Lineare, beschränkte Operatoren im Hilbertraum

Definition 3.1 Sei $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein linearer Operator, d.h.:

$$\hat{A}(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha\hat{A}\psi_1 + \beta\hat{A}\psi_2,$$

für beliebige $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$. \hat{A} heißt **beschränkt**, falls eine reelle Konstante $C \geq 0$ existiert, so daß für alle $\psi \in \mathcal{H}$ gilt

$$\|\hat{A}\psi\| \leq C\|\psi\|. \quad (3.1)$$

Bemerkung 3.1

Ist \hat{A} beschränkt, so ist \hat{A} **stetig** und umgekehrt.

Beweis: Sei \hat{A} beschränkt. Wir betrachten eine beliebige, gegen Null konvergierende Folge $\{\psi_n\}$, $\psi_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$. Dann gilt $\|\hat{A}\psi_n\| \leq C\|\psi_n\| \rightarrow 0$, und damit auch $\hat{A}\psi_n \rightarrow 0$.

Sei, umgekehrt, \hat{A} stetig. Angenommen, \hat{A} ist nicht beschränkt. Dann existiert für jedes n ein Vektor ψ_n mit:

$$\|\hat{A}\psi_n\| > n\|\psi_n\|.$$

Für $\phi_n := \frac{\psi_n}{n\|\psi_n\|}$ haben wir

$$\|\hat{A}\phi_n\| = \frac{1}{n\|\psi_n\|} \|\hat{A}\psi_n\| > 1.$$

Aber $\|\phi_n\| = \frac{1}{n}$, d.h.: $\phi_n \rightarrow 0$. Dies ist ein Widerspruch. \square

Wir bezeichnen die Menge aller linearen beschränkten Operatoren in \mathcal{H} mit $\mathbf{B}(\mathcal{H})$ und diskutieren im weiteren die Struktur dieser Menge:

- (i) Offensichtlich ist die Linearkombination von linearen, beschränkten Operatoren wieder ein linearer beschränkter Operator, d.h. $\mathbf{B}(\mathcal{H})$ ist ein komplexer Vektorraum.

- (ii) Die kleinste Konstante C , für die (3.1) gilt, nennen wir die **Norm** von \hat{A} und bezeichnen sie mit $\|\hat{A}\|$. Man zeigt: $\|\cdot\|$ hat tatsächlich alle Eigenschaften einer Norm und $\mathbf{B}(\mathcal{H})$ ist vollständig in dieser Norm. Damit ist $(\mathbf{B}(\mathcal{H}), +, \|\cdot\|)$ ein **Banachraum**. Aus der Definition der Norm folgt $\|\hat{A}\psi\| \leq \|\hat{A}\| \|\psi\|$, also

$$\left\| \frac{\hat{A}\psi}{\|\psi\|} \right\| \leq \|\hat{A}\|.$$

Damit erhalten wir eine äquivalente Definition der Norm:

$$\|\hat{A}\| = \sup_{\psi \in \mathcal{H}, \|\psi\|=1} \|\hat{A}\psi\|. \quad (3.2)$$

- (iii) Offenbar gilt

$$\|\hat{A} \cdot \hat{B}\| \leq \|\hat{A}\| \cdot \|\hat{B}\|.$$

Daraus folgt: Sind $\hat{A}, \hat{B} \in \mathbf{B}(\mathcal{H})$, dann ist auch $\hat{A} \cdot \hat{B} \in \mathbf{B}(\mathcal{H})$, d.h.: $(\mathbf{B}(\mathcal{H}), +, \|\cdot\|, \cdot)$ ist eine **Banachalgebra**. Wir bemerken: i.a. ist $\hat{A} \cdot \hat{B} \neq \hat{B} \cdot \hat{A}$.

Definition 3.2 Seien $\hat{A}, \hat{B} \in \mathbf{B}(\mathcal{H})$. Der **Kommutator** der Operatoren \hat{A} und \hat{B} ist definiert durch

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A} \cdot \hat{B} - \hat{B} \cdot \hat{A}.$$

- iv) **Satz 3.1** Sei $\hat{A} \in \mathbf{B}(\mathcal{H})$. Dann existiert genau ein Operator $\hat{A}^\dagger \in \mathbf{B}(\mathcal{H})$, so daß gilt:

$$\langle \phi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \phi | \psi \rangle \quad \forall \phi, \psi \in \mathcal{H}. \quad (3.3)$$

(Dieser Satz ist eine einfache Konsequenz des Satzes von Riesz.) Die Operation \dagger heißt Hermitesche Konjugation und \hat{A}^\dagger heißt zu \hat{A} **adjungierter Operator**.

Beispiel: Wir betrachten das Beispiel $\mathcal{H} = (\mathbb{C}^n, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ aus Abschnitt 2.6. Sei $A \in \mathbf{B}(\mathcal{H})$ und bezeichne A_{mn} die Matrix von A bezüglich der Standardbasis $\{e_n\}$ in \mathbb{C}^n . Dann gilt:

$$A_{nm} \equiv \langle e_n | \hat{A} e_m \rangle = \langle \hat{A}^\dagger e_n | e_m \rangle = \langle e_m | \hat{A}^\dagger e_n \rangle^* = (\hat{A}^\dagger)_{mn}^*,$$

also

$$(\hat{A}^\dagger)_{mn} = A_{nm}^*.$$

Wir sehen, daß \dagger in diesem Falle identisch mit der Operation der Hermiteschen Konjugation von Matrizen ist.

Der \dagger -Operator hat die folgenden Eigenschaften, vgl. Hausaufgabe Nr. 11:

$$\begin{aligned} \hat{A}^{\dagger\dagger} &= \hat{A} && - \text{involutiv} \\ \|\hat{A}^\dagger\| &= \|\hat{A}\| && - \text{isometrisch} \\ (\hat{B} \cdot \hat{A})^\dagger &= \hat{A}^\dagger \cdot \hat{B}^\dagger && - \text{antimultiplikativ} \\ (\lambda \hat{A} + \mu \hat{B})^\dagger &= \lambda^* \hat{A}^\dagger + \mu^* \hat{B}^\dagger, \quad \lambda, \mu \in \mathbb{C} && - \text{antilinear} \\ \|\hat{A}^\dagger \hat{A}\| &= \|\hat{A}\|^2 && - C^*\text{-Eigenschaft.} \end{aligned}$$

- (v) Wir fassen zusammen:

$$(\mathbf{B}(\mathcal{H}), +, \cdot, \|\cdot\|, \mathbf{1}, \dagger)$$

hat die Struktur einer Banachschen $*$ -Algebra mit Einselement und obige C^* -Eigenschaft macht aus $\mathbf{B}(\mathcal{H})$ eine **C^* -Algebra mit $\mathbf{1}$** . Dies ist das mathematische Standardmodell für eine **Observablen-Algebra**.

Wichtige Klassen von Operatoren:i) **Selbstadjungierte Operatoren:**

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger.$$

Beispiel: für $(\mathbb{C}^n, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ folgt: $(\hat{A}^\dagger)_{mn} = \hat{A}_{nm}^* = \hat{A}_{mn}$, also ist \hat{A} eine Hermitesche Matrix.

ii) **Positive Operatoren:**

$$\langle \psi | \hat{A} \psi \rangle \geq 0 \quad \forall \psi \in \mathcal{H}.$$

Man zeigt: Jeder positive Operator ist selbstadjungiert. Auf dem \mathbb{C}^n entsprechen die positiven Operatoren den positiv definiten Matrizen.

iii) **Unitäre Operatoren:**

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \mathbf{1} \quad \text{und} \quad \hat{U} \hat{U}^\dagger = \mathbf{1},$$

d.h. unitäre Operatoren erhalten das Skalarprodukt (und damit auch die Norm) und sind Vektorraum-Isomorphismen. Ihre Operatornorm ist 1. Man zeigt: Ist U beschränkt und erfüllt U die Bedingung $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$, dann ist U unitär. Dies liefert eine äquivalente Charakterisierung von unitären Operatoren. Auf dem \mathbb{C}^n entsprechen die unitären Operatoren den unitären Matrizen.

iv) **Projektionsoperatoren:**

Sei $F \subset \mathcal{H}$ ein abgeschlossener Teilraum des Hilbertraumes \mathcal{H} und sei

$$F^\perp := \{\psi \in \mathcal{H} : \langle \phi | \psi \rangle = 0, \quad \text{für alle } \phi \in F\}$$

der zu F orthogonale Teilraum. Jeder Vektor $\psi \in \mathcal{H}$ hat eine eindeutige Zerlegung

$$\psi = \psi_{\parallel} + \psi_{\perp},$$

mit $\psi_{\parallel} \in F$ und $\psi_{\perp} \in F^\perp$. Wir definieren den linearen Operator $\hat{P}_F : \mathcal{H} \rightarrow F$ durch

$$\hat{P}_F \psi := \psi_{\parallel}.$$

P_F heißt **orthogonaler Projektor** auf den Teilraum F . Offensichtlich ist \hat{P}_F beschränkt: Da $\langle \psi_{\parallel} | \psi_{\perp} \rangle = 0$ gilt, folgt

$$\langle \psi | \psi \rangle = \|\psi\|^2 = \|\psi_{\parallel}\|^2 + \|\psi_{\perp}\|^2,$$

also $\|\psi_{\parallel}\|^2 = \|\hat{P}_F \psi\|^2 \leq \|\psi\|^2$. Mit $\|\hat{P}_F \psi\| \leq \|\hat{P}_F\| \|\psi\|$ erhalten wir

$$\|\hat{P}_F\| \leq 1.$$

Man zeigt: P_F ist selbstadjungiert, idempotent und positiv,

$$\hat{P}_F^\dagger = \hat{P}_F, \quad \hat{P}_F^2 = \hat{P}_F, \quad \hat{P}_F \geq 0.$$

Umgekehrt ist jeder lineare, beschränkte, selbstadjungierte und idempotente Operator P orthogonaler Projektor auf einem Teilraum $F \subseteq \mathcal{H}$. Weitere wichtige Eigenschaften von orthogonalen Projektoren sind in Hausaufgabe Nr. 12 zusammengefaßt.

3.2 Erwartungswerte von Observablen

Wir können jedem $\hat{A} \in \mathbf{B}(\mathcal{H})$, für jeden gewählten Zustand $\psi \in \mathcal{H}$, die folgende (i. a. komplexe) Zahl zuordnen:

$$\hat{A} \mapsto \langle \hat{A} \rangle_\psi := \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle. \quad (3.4)$$

Wir bemerken, daß $\langle \hat{A} \rangle_\psi$ genau dann **reell** ist, wenn \hat{A} selbstadjungiert ist:

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi^* = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle^* = \langle \hat{A} \psi | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A} \rangle_\psi.$$

Ist \hat{A} selbstadjungiert, dann nennen wir $\langle \hat{A} \rangle_\psi$ den **Erwartungswert** der Observablen \hat{A} im Zustand ψ . Wir bemerken, daß $\langle \hat{A} \rangle_\psi$ nur vom reinen Zustand, definiert durch ψ , abhängt, also invariant unter der Transformation $\psi \mapsto e^{i\alpha} \psi$ ist.

Beispiel:

- (i) Es seien $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$, $D \subset \mathbb{R}^3$ eine beliebige (meßbare) Untermenge und \hat{E}_D der **Projektor der Ortsmessung**, definiert durch:

$$\hat{E}_D \psi(\vec{x}, t) := \chi(\vec{x}) \psi(\vec{x}, t), \quad (3.5)$$

wobei $\chi(\vec{x})$ die charakteristische Funktion von D ist,

$$\chi(\vec{x}) = \begin{cases} 0 & \vec{x} \notin D \\ 1 & \vec{x} \in D \end{cases}$$

Offensichtlich ist \hat{E}_D ein orthogonaler Projektor. Überprüfen Sie dies! Wir berechnen den Erwartungswert von \hat{E}_D im Zustand ψ :

$$\begin{aligned} \langle \hat{E}_D \rangle_\psi &= \langle \psi | \hat{E}_D \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \chi(\vec{x}) \psi(\vec{x}, t) \\ &= \int_D d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2. \end{aligned}$$

Wir sehen, daß der Erwartungswert des Projektors der Ortsmessung gleich der Wahrscheinlichkeit ist, daß sich das Teilchen im Gebiet D befindet.

- (ii) Allgemeiner, sei $f(\hat{\vec{x}})$ ein beschränkter Multiplikationsoperator, (z.B. habe die Funktion f kompakten Träger). Dann gilt:

$$\langle f(\hat{\vec{x}}) \rangle_\psi = \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) f(\vec{x}) \psi(\vec{x}, t), \quad (3.6)$$

d.h.: der Erwartungswert des Operators $f(\hat{\vec{x}})$ fällt zusammen mit dem statistischen Mittelwert der Funktion $f(\vec{x})$.

Achtung: $\hat{\vec{x}}$ selbst kann man vorläufig noch nicht einsetzen, da $\hat{\vec{x}}$ ein unbeschränkter Operator ist. Dazu kommen wir später.

Diese Betrachtungen legen folgende Postulate nahe:

Postulat II: Jede physikalische Größe (Observable) eines quantenmechanischen Systems wird durch einen linearen, selbstadjungierten Operator auf dem Hilbertraum dieses Systems beschrieben.

Postulat III: Sei ein quantenmechanisches System im reinen Zustand, der durch $\psi \in \mathcal{H}$ repräsentiert wird. Führt man an dem System die Messung einer Observablen \hat{A} sehr oft aus (und ist das System vor jeder Messung im Zustand ψ), so ist der Mittelwert der Meßergebnisse gegeben durch den Erwartungswert von \hat{A} :

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle \quad (3.7)$$

Achtung: Zunächst gilt noch die Einschränkung auf **beschränkte** Operatoren, diese wird aber später aufgehoben.

Bemerkung 3.2

- (i) Wir betonen, daß der Erwartungswert **nicht** etwa der mit größter Wahrscheinlichkeit zu erwartende Meßwert ist. Es kann sogar sein, daß dieser Wert nie gemessen wird, dazu später mehr.
- (ii) Offensichtlich ist der Operator $\hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$, definiert durch

$$\hat{P}_\psi|\phi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle,$$

genau der Projektor auf den eindimensionalen Unterraum, aufgespannt durch ψ . Sei $|\phi\rangle$ ein Vektor aus dem orthogonalen Komplement von $|\psi\rangle$, dann gilt:

$$\begin{aligned}\hat{P}_\psi|\phi\rangle &= |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = 0 \\ \hat{P}_\psi|\psi\rangle &= |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle = |\psi\rangle.\end{aligned}$$

D. h. , die Messung der Observablen \hat{P}_ψ entspricht der Frage: “Ist das System im reinen Zustand $|\psi\rangle$?” Als Antwort erhalten wir entweder ein “Ja” (Eigenwert 1) oder ein “Nein” (Eigenwert 0). \hat{P}_ψ heißt **statistischer Operator** des reinen Zustandes ψ . Der tiefere Grund dieser Terminologie: Sei $\{e_k\}$ eine beliebige orthonormierte Basis in \mathcal{H} . Dann gilt

$$\sum_k \hat{P}_k \equiv \sum_k |e_k\rangle\langle e_k| = \mathbf{1},$$

denn $|e_i\rangle = \sum_k |e_k\rangle\langle e_k|e_i\rangle$. Damit folgt:

$$\langle\psi|\hat{A}\psi\rangle = \sum_k \langle\psi|\hat{A}e_k\rangle\langle e_k|\psi\rangle = \sum_k \langle e_k|\psi\rangle\langle\psi|\hat{A}e_k\rangle = \sum_k \langle e_k|\hat{P}_\psi\hat{A}e_k\rangle.$$

Bezeichnen wir, wie im endlich-dimensionalen Fall, $\text{Tr}\hat{B} = \sum_k \langle e_k|\hat{B}e_k\rangle$ (Spur von \hat{B}), so ergibt sich:

$$\langle\psi|\hat{A}\psi\rangle = \langle\hat{A}\rangle_\psi = \text{Tr}(\hat{P}_\psi\hat{A}). \quad (3.8)$$

Später wird diese Formel auf natürliche Weise auf **gemischte Zustände** verallgemeinert.

- (iii) Wir berechnen den Erwartungswert von \hat{P}_ψ im Zustand $|\phi\rangle$:

$$\langle\hat{P}_\psi\rangle_\phi = \langle\phi|\hat{P}_\psi\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = |\langle\psi|\phi\rangle|^2.$$

Dies ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß sich das System nach der Messung im Zustand $|\psi\rangle$ befindet, wenn es vorher im Zustand $|\phi\rangle$ war. Deshalb nennen wir diese Größe auch **Übergangswahrscheinlichkeit**.

Wir werden später, insbesondere im Rahmen der Diskussion der **Zeitentwicklung**, auf die Berechnung solcher Übergangswahrscheinlichkeiten eingehen.

3.3 Streuung einer Observablen und Unschärferelation

Wir verallgemeinern den Begriff der (für Ort und Impuls bereits eingeführten) mittleren quadratischen Schwankung:

Definition 3.3 Die **Streuung** $\Delta_\psi\hat{A}$ einer Observablen \hat{A} ist definiert als die quadratische Abweichung vom Mittelwert $\langle\hat{A}\rangle_\psi$ der Meßergebnisse:

$$(\Delta_\psi\hat{A})^2 := \langle\psi|(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle_\psi)^2|\psi\rangle \equiv \|(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle_\psi)\psi\|^2. \quad (3.9)$$

$(\Delta_\psi \hat{A})$ beschreibt die “Unschärfe” einer Messung, in Analogie zur Interpretation der mittleren quadratischen Schwankung von Ort oder Impuls. Wir berechnen:

$$\begin{aligned} \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\psi)^2 | \psi \rangle &= \langle \psi | (\hat{A}^2 - 2\langle \hat{A} \rangle_\psi \hat{A} + \langle \hat{A} \rangle_\psi^2) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - 2\langle \hat{A} \rangle_\psi^2 + \langle \hat{A} \rangle_\psi^2 \\ &= \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2, \end{aligned}$$

d.h. es gilt:

$$(\Delta_\psi \hat{A})^2 \equiv \langle \hat{A}^2 \rangle_\psi - \langle \hat{A} \rangle_\psi^2. \quad (3.10)$$

Seien \hat{A} und \hat{B} Observable. Wir definieren $\hat{A}' = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\psi \cdot \mathbf{1}$ und $\hat{B}' = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle_\psi \cdot \mathbf{1}$ und betrachten folgende quadratische Form in der reellen Variablen λ :

$$\begin{aligned} Q(\lambda) &= \|(\hat{A}' + i\lambda \hat{B}')\psi\|^2 \\ &= \langle \psi | (\hat{A}' - i\lambda \hat{B}')(\hat{A}' + i\lambda \hat{B}') | \psi \rangle \\ &= \lambda^2 \langle \psi | \hat{B}'^2 | \psi \rangle + \lambda \langle \psi | i[\hat{A}', \hat{B}'] | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A}'^2 | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Offenbar gilt

$$Q(\lambda) \geq 0.$$

Aus $[\hat{A}', \hat{B}'] = [\hat{A}, \hat{B}]$ folgt

$$Q(\lambda) = \lambda^2 (\Delta_\psi \hat{B})^2 + \lambda \langle \psi | i[\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle + (\Delta_\psi \hat{A})^2 \geq 0,$$

für alle $\lambda \in \mathbb{R}$. Außerdem bemerken wir, daß $\langle \psi | i[\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle$ reell ist, denn $(i[\hat{A}, \hat{B}])^\dagger = i[\hat{A}, \hat{B}]$. Daraus folgern wir wieder, wie in Abschnitt 2.4,

$$\langle \psi | i[\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle^2 - 4(\Delta_\psi \hat{B})^2 (\Delta_\psi \hat{A})^2 \leq 0,$$

also

$$(\Delta_\psi \hat{A})(\Delta_\psi \hat{B}) \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | i[\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|. \quad (3.11)$$

Dies ist die **allgemeine Unschärferelation** für beschränkte, selbstadjungierte Operatoren.

Wir sehen, daß es i. a. unmöglich ist, zwei Observable \hat{A} und \hat{B} , die nicht kommutieren, gleichzeitig genau zu messen.

Achtung: Es kann trotz der Annahme $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ Zustände (gemeinsame Eigenfunktionen) geben, in denen beide Observable exakt meßbar sind. Nur darf kein vollständiges Orthonormalsystem aus solchen Zuständen gebildet werden können, denn dann würden die Operatoren vertauschen, siehe später.¹

Wir fragen uns, ob aus (3.11) die früher hergeleitete **Orts–Impuls–Unschärferelation** folgt. Dazu müssen wir für einen Moment das Gebiet der beschränkten Operatoren verlassen, denn \hat{x} und \hat{p} sind **unbeschränkt**. Eine exakte mathematische Definition dieser Operatoren wird in Abschnitt 3.5 gegeben. Wir berechnen in der Ortsdarstellung

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j]\psi = \left(x_i \frac{\hbar}{i} \partial_j - \frac{\hbar}{i} \partial_j x_i \right) \psi = \frac{\hbar}{i} \left\{ x_i \partial_j \psi - \frac{\partial x_i}{\partial x_j} \psi - x_i \partial_j \psi \right\} = -\frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \psi,$$

wobei $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3) \subset L^2(\mathbb{R}^3)$ genommen wird². D.h.:

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \mathbf{1}. \quad (3.12)$$

¹Ein tiefere Diskussion findet man bei J. v. Neumann, Abschnitt III.4.

² $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ ist der Schwartzraum. Er ist dicht in $L^2(\mathbb{R}^3)$ und \hat{x} und \hat{p} sind auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ wesentlich selbstadjungiert, siehe Abschnitt 3.5

Hierbei steht $\mathbf{1}$ für die Identität auf dem Raum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$. Dies sind die **Heisenbergschen Vertauschungsrelationen**. Setzen wir (3.12) in (3.11) ein, so erhalten wir in der Tat die Heisenbergsche Unschärferelation:

$$(\Delta_\psi \hat{x}_i)(\Delta_\psi \hat{p}_j) \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{ij}.$$

Bemerkung 3.3

- (i) Wir fassen (3.12) als abstrakte Relation auf und fragen, ob man diese durch endlich-dimensionale Operatoren, d.h. Matrizen in einem endlich-dimensionalen Hilbertraum, realisieren kann. Wenn (3.12) durch auf dem \mathbb{C}^n wirkende Matrizen realisierbar wäre, würde gelten:

$$0 = \text{Tr}(x_i p_j) - \text{Tr}(p_j x_i) = i\hbar \delta_{ij} n.$$

Dies ist offenbar ein Widerspruch, die Antwort lautet also "nein".

- (ii) Man zeigt, vgl. Hausaufgabe Nr. 13, daß die Heisenbergsche Vertauschungsrelation (3.12) **nicht** durch beschränkte, lineare Operatoren \hat{x} und \hat{p} realisiert werden kann. (Dazu nimmt man an, die Relation sei durch beschränkte Operatoren realisiert und führt diese Annahme ad absurdum. Hierzu zeigt man die Identität:

$$\hat{x}^n \hat{p} - \hat{p} \hat{x}^n = ni\hbar \hat{x}^{n-1}$$

und betrachtet die Norm der Operatoren auf beiden Seiten der Gleichung.)

- (iii) Wir sehen, daß man die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen nur mit Hilfe von unbeschränkten Operatoren erfüllen kann. Damit treten Fragen nach dem Definitionsbereich auf, siehe später. Insbesondere muß man definieren, was es heißt, daß zwei unbeschränkte Operatoren kommutieren. Aus diesen Gründen ist es sinnvoll zu fragen, ob eine "Umformulierung" von (3.12) mit Hilfe von beschränkten Operatoren existiert, so daß man daraus (3.12) (durch Differenzieren) wiederfindet. Eine solche Formulierung gelingt mit Hilfe der sogenannten Weyl-Operatoren:

$$\hat{x} \rightarrow \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{s} \cdot \hat{x}\right) \quad \text{und} \quad \hat{p} \rightarrow \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \hat{p}\right), \quad \vec{r}, \vec{s} \in \mathbb{R}^3.$$

Für diese gelten die **Weyl-Relationen**:

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \hat{p}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{s} \cdot \hat{x}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \hat{p}\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} (\hat{x} + \vec{r}) \vec{s}\right),$$

vgl. W. Thirring Abschnitt 3.1.

- (iv) Wir bemerken, daß für das Observablenpaar von Ort und Impuls die klassische Poissonklammer laut (3.12) in den quantenmechanischen Kommutator (dividiert durch $i\hbar$) übergeht. Dies wird in manchen Lehrbüchern als "**Diracsche Quantisierungsvorschrift**" auf beliebige Observablenpaare verallgemeinert, ist aber **falsch**. Hausaufgabe Nr. 14 soll dies illustrieren: Wir betrachten den Raum \mathcal{L} der reellen Linearkombinationen der Operatoren $\mathbf{1}, \hat{x}, \hat{p}, \hat{x}^2, \hat{p}^2$ und $\frac{1}{2}(\hat{x} \cdot \hat{p} + \hat{p} \cdot \hat{x})$, wobei \hat{x} und \hat{p} die Heisenbergsche Vertauschungsrelation (3.12) erfüllen sollen. Indem man (\hat{x}, \hat{p}) durch das klassische Variablenpaar (x, p) ersetzt, erhält man aus jedem $A \in \mathcal{L}$ ein (höchstens) quadratisches Polynom P^{cl} in den klassischen Variablen.

a) Man zeigt, daß für $A, B \in \mathcal{L}$ gilt: $\frac{i}{\hbar}[A, B] \in \mathcal{L}$.

b) Man zeigt:

$$\frac{i}{\hbar}[A, B]^{cl} = \{A^{cl}, B^{cl}\},$$

wobei $\{\cdot, \cdot\}$ die klassische Poissonklammer bezeichnet.

c) Man findet Beispiele, für die diese Formel versagt.

(Das Problem soll auf rein algebraischem Niveau, d.h. unter Ausblendung von Bereichsfragen für unbeschränkte Operatoren, betrachtet werden.) Diese Aufgabe illustriert ein bekanntes Theorem von van Hove, dem zufolge die kanonische Quantisierung nicht für beliebige Funktionen auf dem Phasenraum gilt.

Abschließend fragen wir uns, wann die Streuung einer Observablen Null ist, d.h., wann diese **“scharf”** gemessen wird? Dazu muß gelten:

$$(\Delta_\psi \hat{A})^2 = \|(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)\psi\|^2 = 0,$$

also $(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)\psi = 0$, bzw.

$$\hat{A}\psi = \langle \hat{A} \rangle_\psi \psi. \quad (3.13)$$

D.h., befindet sich das System in einem Eigenzustand des Operators \hat{A} , so ist eine **exakte Messung** (ohne Streuung) möglich.

Aber: Ist \mathcal{H} ein unendlich-dimensionaler Hilbertraum, dann spannen die Eigenvektoren eines Operators \hat{A} im Sinne von (3.13) den Hilbertraum \mathcal{H} i.a. nicht auf. Um dies genauer zu verstehen, müssen wir uns mit dem Begriff des Spektrums selbstadjungierter Operatoren befassen. Dieser Problematik wenden wir uns jetzt zu.

3.4 Das Spektrum beschränkter selbstadjungierter Operatoren und Eigenfunktionenentwicklung

Unsere Strategie ist es, zunächst den aus der linearen Algebra bekannten Spektralsatz für Hermitesche Matrizen so umzuformulieren, daß er sich auf natürliche Weise auf den Fall von selbstadjungierten Operatoren im unendlich-dimensionalen Hilbertraum übertragen lässt. Nur der Begriff des Spektrums wird bei diesem Übergang komplizierter. Unter Verwendung des Spektralsatzes werden wir in der Lage sein, Postulat III tiefer zu verstehen.

Die in diesem Abschnitt nicht gelieferten Beweise mathematischer Sachverhalte kann man bei Reed/Simon finden.

3.4.1 Der endlich-dimensionale Fall

Sei $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$, versehen mit dem natürlichen Skalarprodukt $\langle x | y \rangle = x^\dagger y$, und sei $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein linearer Operator. Dann ist

$$\hat{A}x = \lambda x \quad (3.14)$$

das Eigenwertproblem für \hat{A} , mit λ als Eigenwert (EW) und x als Eigenvektor (EV).

Sei \hat{A} selbstadjungiert.³ Dann gilt

$$\lambda \|x\|^2 = \langle x | \hat{A}x \rangle = \langle \hat{A}x | x \rangle = \langle x | \hat{A}x \rangle^* = \lambda^* \|x\|^2,$$

also $\lambda = \lambda^*$. D.h.: selbstadjungierte lineare Operatoren haben **reelle Eigenwerte**. Aus dem Algebra-Kurs ist bekannt, daß die Eigenwerte durch Lösen der charakteristischen Gleichung

$$\det(\hat{A} - \lambda \mathbf{1}) = 0 \quad (3.15)$$

bestimmt werden. Wir bemerken: Gleichung (3.15) ist äquivalent zu der Aussage, daß $A - \lambda \mathbf{1}$ nicht invertierbar ist.

³in einer Basis, wie wir wissen, repräsentiert durch eine Hermitesche Matrix.

Definition 3.4 Die Menge

$$\sigma(\hat{A}) := \{\lambda \in \mathbb{R}^1 : (A - \lambda \mathbf{1}) \text{ ist nicht invertierbar}\}$$

heißt **Spektrum** des selbstadjungierten linearen Operators \hat{A} .

Wir sehen, daß für den Fall $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$ das **Spektrum** $\sigma(\hat{A})$ mit der Menge der Eigenwerte von \hat{A} identisch ist.

Satz 3.2 (1. Version des Spektralsatzes) Sei $(\mathcal{H} = \mathbb{C}^n, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ und $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein linearer selbstadjungierter Operator. Dann gilt

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{\lambda \in \sigma(\hat{A})} \mathcal{H}_\lambda, \quad (3.16)$$

wobei $\mathcal{H}_\lambda = \{x \in \mathcal{H} : (\hat{A} - \lambda \mathbf{1})x = 0\}$ der Eigenraum von \hat{A} zum Eigenwert λ ist. Insbesondere existiert eine **orthonormale Basis** in \mathcal{H} , gebildet aus den Eigenvektoren von \hat{A} .

Im allgemeinen ist ein Eigenwert λ entartet. Dann gilt natürlich $\dim \mathcal{H}_\lambda > 1$. Man nennt die Dimension $m_\lambda = \dim \mathcal{H}_\lambda$ die Vielfachheit des Eigenwertes λ und schreibt mitunter genauer

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{\lambda \in \sigma(\hat{A})} \mathcal{H}_\lambda^{m_\lambda}.$$

Nach Konstruktion sind die Eigenräume \mathcal{H}_λ invariant unter \hat{A} und \hat{A} wirkt auf ihnen durch skalare Multiplikation mit λ . Bezeichnen wir den orthogonalen Projektor auf \mathcal{H}_λ mit \hat{P}_λ , dann gilt wegen (3.16)

$$\sum_{\lambda} \hat{P}_\lambda = \mathbf{1}. \quad (3.17)$$

Es folgt

$$\hat{A}x = \hat{A} \left(\sum_{\lambda} \hat{P}_\lambda x \right) = \sum_{\lambda} \hat{A} \hat{P}_\lambda x = \sum_{\lambda} \lambda \hat{P}_\lambda x,$$

für beliebige $x \in \mathcal{H}$. Damit erhalten wir

$$\hat{A} = \sum_{\lambda} \lambda \hat{P}_\lambda. \quad (3.18)$$

Dies ist die **Spektraldarstellung** von \hat{A} .

Im weiteren werden wir oft eine orthonormale Basis von Eigenvektoren wählen und diese folgendermaßen bezeichnen:

$$\{|\lambda; \alpha\rangle\}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, m_\lambda.$$

Dann gilt für alle $x \in \mathcal{H}$:

$$|x\rangle = \sum_{\lambda, \alpha} |\lambda; \alpha\rangle \langle \lambda; \alpha | x \rangle. \quad (3.19)$$

Dies ist die **Eigenfunktionenentwicklung** von $x \in \mathcal{H}$ bezüglich \hat{A} . Wir bezeichnen $x_{\lambda, \alpha} = \langle \lambda; \alpha | x \rangle$. Dann gilt:

$$\hat{P}_\lambda |x\rangle = \sum_{\alpha} x_{\lambda, \alpha} |\lambda; \alpha\rangle.$$

Damit erhalten wir

$$\hat{A} |x\rangle = \sum_{\lambda} \lambda \hat{P}_\lambda |x\rangle = \sum_{\lambda, \alpha} x_{\lambda, \alpha} \lambda |\lambda; \alpha\rangle.$$

Im weiteren bezeichnen wir die Eigenwerte von \hat{A} mit λ_i , wobei

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n$$

gelten soll. Wir werten **Postulat III** mit Hilfe der Spektralzerlegung aus:

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle = \sum_i \lambda_i \langle \psi | \hat{P}_{\lambda_i} \psi \rangle = \sum_i \lambda_i \|\hat{P}_{\lambda_i} \psi\|^2.$$

Da $\sum_i \hat{P}_{\lambda_i} = \mathbf{1}$ gilt, ist $\sum_i \langle \psi | \hat{P}_{\lambda_i} \psi \rangle = 1$. Da \hat{P}_{λ_i} ein Projektor ist, gilt auch $\sum_i \|\hat{P}_{\lambda_i} \psi\|^2 = 1$, d.h.: $\left\{ \|\hat{P}_{\lambda_i} \psi\|^2 \right\}_{\lambda_i \in \sigma(\hat{A})}$ ist eine **Wahrscheinlichkeitsverteilung**. Die Gleichung

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \sum_i \lambda_i \|\hat{P}_{\lambda_i} \psi\|^2 \quad (3.20)$$

besagt:

1. Es werden die Eigenwerte von \hat{A} gemessen.
2. Der Eigenwert λ_i wird mit der Wahrscheinlichkeit $\|\hat{P}_{\lambda_i} \psi\|^2$ gemessen.
3. Ist das System im Eigenzustand ψ , dann wird der Eigenwert λ , der zu ψ gehört, gemessen.

Definition 3.5 Sei \hat{A} ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$. Wir definieren für alle $\lambda \in \mathbb{R}$

$$\hat{E}_\lambda := \sum_{\substack{\lambda_i \leq \lambda \\ \lambda_i \in \sigma(\hat{A})}} \hat{P}_{\lambda_i}. \quad (3.21)$$

Die Familie $\{\hat{E}_\lambda\}$ von linearen Operatoren heißt **Spektralschar** von \hat{A} .

Offensichtlich hat die Spektralschar folgende Eigenschaften:

Bemerkung 3.4

- i) Als Summe von orthogonalen Projektoren auf paarweise zueinander orthogonale Teilräume ist \hat{E}_λ für jedes λ ein orthogonaler Projektor.
- ii) Es gilt $\hat{E}_\lambda \leq \hat{E}_\mu$, falls $\lambda \leq \mu$, vgl Hausaufgabe Nr. 12.
- iii) Für genügend kleine λ (λ kleiner als der kleinste Eigenwert) ist $\hat{E}_\lambda = 0$. Für genügend große λ (λ größer als der größte Eigenwert) ist $\hat{E}_\lambda = \mathbf{1}$. Wir schreiben

$$\text{s-lim}_{\lambda \rightarrow -\infty} \hat{E}_\lambda = 0 \quad \text{und} \quad \text{s-lim}_{\lambda \rightarrow \infty} \hat{E}_\lambda = \mathbf{1}. \quad (3.22)$$

Dabei bezeichnet s-lim den sogenannten starken Limes: Eine Folge \hat{A}_i von Operatoren konvergiert im starken Sinne gegen \hat{A} , falls $\|\hat{A}_i x - \hat{A} x\| \rightarrow 0$ für alle $x \in \mathcal{H}$ gilt.

- iv) \hat{E}_λ ist (als Funktion von λ) fast überall konstant, nur an den Punkten $\lambda = \lambda_i$ gibt es Sprungstellen. \hat{E}_λ ist aber von **rechts stetig**:

$$\text{s-lim}_{\varepsilon \rightarrow 0} \hat{E}_{\lambda+\varepsilon} = \hat{E}_\lambda \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}.$$

Bemerkung 3.5

- (i) Die zugehörige **Spektralfunktion** ist definiert durch

$$\sigma_\psi(\lambda) := \langle \psi | \hat{E}_\lambda \psi \rangle \equiv \|\hat{E}_\lambda \psi\|^2, \quad \psi \in \mathcal{H}, \|\psi\| = 1.$$

Offensichtlich ist σ_ψ nicht-negativ und monoton wachsend. Sie hat Sprungstellen bei $\lambda = \lambda_i$ und ist von rechts stetig (siehe Abb. 3.1).

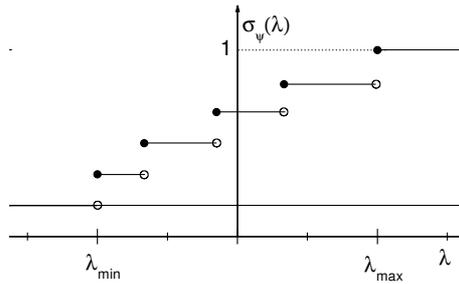


Abbildung 3.1: Die Spektralfunktion $\sigma_\psi(\lambda)$

(ii) Eng verknüpft mit der Spektralzerlegung ist der **Funktionalkalkül** für Operatoren auf \mathcal{H} . Man zeigt, daß die folgende Definition für eine beliebige reell-wertige Borelfunktion sinnvoll ist:

$$f(\hat{A}) := \sum_{\lambda} f(\lambda) \hat{P}_{\lambda}.$$

Wir nennen $f(\hat{A})$ **Operatorfunktion** von \hat{A} definiert durch f .

(iii) Wir drücken \hat{A} durch seine Spektralschar aus:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{A} \psi \rangle &= \sum_i \lambda_i \langle \phi | \hat{P}_{\lambda_i} \psi \rangle = \sum_i \int d\lambda \lambda \delta(\lambda - \lambda_i) \langle \phi | \hat{P}_{\lambda_i} \psi \rangle \\ &= \int d\lambda \lambda \sum_i \delta(\lambda - \lambda_i) \langle \phi | \hat{P}_{\lambda_i} \psi \rangle = \int d\lambda \lambda \frac{d}{d\lambda} \left\{ \sum_i \Theta(\lambda - \lambda_i) \langle \phi | \hat{P}_{\lambda_i} \psi \rangle \right\} \\ &= \int d\lambda \lambda \frac{d}{d\lambda} \langle \phi | \hat{E}_{\lambda} \psi \rangle. \end{aligned}$$

Wir schreiben dafür symbolisch:

$$\hat{A} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\hat{E}_{\lambda}. \tag{3.23}$$

Aus Bemerkung 3.4 ist klar, daß sich dieses Integral über das Spektrum $\sigma(\hat{A})$ erstreckt.

Damit können wir den Spektralsatz folgendermaßen formulieren:

Satz 3.3 (2. Version des Sepktralsatzes) Sei $(\mathcal{H} = \mathbb{C}^n, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ und \hat{A} ein linearer selbstadjungierter Operator in \mathcal{H} . Dann existiert eine (eindeutig bestimmte) Spektralschar $\{\hat{E}_{\lambda}\}$, $\lambda \in \mathbb{R}$, so daß

$$\hat{A} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\hat{E}_{\lambda}.$$

gilt. Umgekehrt definiert jede Spektralschar auf \mathcal{H} einen beschränkten, selbstadjungierten Operator.

Definition 3.6 Sei \hat{A} ein selbstadjungierter Operator in $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$ und sei $\{\hat{E}_{\lambda}\}$ seine Spektralschar. Für jedes Intervall $\Delta =]\lambda, \lambda'] \subset \mathbb{R}^1$ definieren wir den folgenden Projektor:

$$\hat{E}(\Delta) := \hat{E}_{\lambda} - \hat{E}_{\lambda'} = \sum_{\lambda < \lambda_i \leq \lambda'} \hat{P}_{\lambda_i}. \tag{3.24}$$

Die Familie $\{\hat{E}(\Delta)\}$ heißt **projektorwertiges Maß** oder **Spektralmaß** des Operators \hat{A} .

Die Definition (3.24) kann man natürlich auf beliebige Borelmengen ausdehnen, die Details führen wir hier nicht aus. Wir sehen aus (3.24), daß

$$\hat{E}(\Delta) = \chi_{\Delta}(\hat{A}) \quad (3.25)$$

gilt. Dabei bezeichnet χ_{Δ} die charakteristische Funktion von Δ . Ist das Spektralmaß gegeben, so rekonstruieren wir natürlich die zugehörige Spektralschar:

$$\hat{E}_{\lambda} = \hat{E}([-\infty, \lambda]). \quad (3.26)$$

Bemerkung 3.6

Die Familie $\{\hat{E}(\Delta)\}$ hat folgende Eigenschaften:

- (i) Für jedes Δ ist $\hat{E}(\Delta)$ ein orthogonaler Projektor.
- (ii) Es gilt $\hat{E}(\emptyset) = 0$ und es existiert ein (hinreichend großes) Δ_0 , so daß $\hat{E}(\Delta_0) = \mathbf{1}$ gilt. Wir wählen Δ_0 so, daß das gesamte Spektrum in Δ_0 liegt. Dies liefert nach (3.21):

$$\hat{E}(\Delta_0) = \sum_{\lambda_i \in \sigma(\hat{A})} \hat{P}_{\lambda_i} = \mathbf{1}.$$

- (iii) Sei $\Delta = \bigcup_{n=1}^N \Delta_n$ mit $\Delta_n \cap \Delta_m = \emptyset$, für alle $n \neq m$. Dann gilt

$$\hat{E}(\Delta) = \sum_{n=1}^N \hat{E}(\Delta_n). \quad (3.27)$$

Diese Gleichung bleibt auch richtig für $N \rightarrow \infty$, also für eine immer feinere Einteilung des Intervalls.

- (iv) Offenbar gilt für beliebige Paare (Δ_1, Δ_2) von Borelmengen:

$$\hat{E}_{\Delta_1 \cap \Delta_2} = \hat{E}_{\Delta_1} \cdot \hat{E}_{\Delta_2}. \quad (3.28)$$

Damit erhalten wir noch eine andere Version des Spektralsatzes:

Satz 3.4 (3. Version des Spektralsatzes) *Zu jedem selbstadjungierten Operator im endlich-dimensionalen Hilbertraum gehört ein (eindeutig definiertes) projektorwertiges Maß und, umgekehrt, definiert jedes projektorwertige Maß eindeutig einen selbstadjungierten Operator.*

Wir werten **Postulat III** in Termen des projektorwertigen Maßes aus: Es gilt, für $\Delta =]\lambda, \lambda']$,

$$\|\hat{E}(\Delta)\psi\|^2 = \sum_{\lambda < \lambda_i \leq \lambda'} \|\hat{P}_{\lambda_i}\psi\|^2. \quad (3.29)$$

Dies ist offenbar die Wahrscheinlichkeit dafür, daß \hat{A} im Zustand $|\psi\rangle$ Werte aus dem Intervall Δ annimmt. Liegt das Intervall außerhalb des Spektrums, so ist diese Wahrscheinlichkeit Null.

Beispiel: Sei $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, der Hilbertraum für den Spin des Elektrons (siehe später). Der Spinoperator ist definiert durch

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma},$$

wobei $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ die Pauli-Matrizen bezeichnet. Wir betrachten als Operator \hat{A} die z -Komponente des Spins

$$\hat{A} \equiv \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

- a) Die Eigenwerte: $\det(\hat{S}_z - \lambda \mathbf{1}) = 0$, also $\lambda_{1,2} = \pm \hbar/2$.
 b) die zugehörigen Eigenvektoren: $e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $e_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.
 c) Ein beliebiger normierter Vektor in dieser Basis: $\psi = z_1 e_1 + z_2 e_2$, mit $|z_1|^2 + |z_2|^2 = 1$. Also gilt

$$\mathbb{C}^2 = V_1 \oplus V_2, \quad V_{1,2} = \{\mathbb{C} \cdot e_{1,2}\}.$$

- d) Die Spektraldarstellung von \hat{S}_z :

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \hat{P}_1 + \left(-\frac{\hbar}{2}\right) \hat{P}_2 \quad \text{mit} \quad \hat{P}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \hat{P}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

- e) Der Erwartungswert im Zustand $\psi = z_1 e_1 + z_2 e_2$:

$$\langle \hat{S}_z \rangle_\psi = (z_1^*, z_2^*) \left\{ \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (|z_1|^2 - |z_2|^2).$$

Dieser liegt i.a. nicht im Spektrum, außer für den Fall, dass ψ Eigenvektor ist:

$$\langle \hat{S}_z \rangle_\psi = \begin{cases} \frac{\hbar}{2} & \text{für } \psi = e_1 \\ -\frac{\hbar}{2} & \text{für } \psi = e_2. \end{cases}$$

3.4.2 Der unendlich-dimensionale Fall

Sei nun $(\mathcal{H}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ ein unendlich-dimensionaler Hilbertraum und \hat{A} ein beschränkter selbstadjungierter Operator. Dann überträgt sich der Spektralsatz sinngemäß, **aber** der Begriff des Spektrums ist komplizierter. Wir diskutieren also zunächst die Verallgemeinerung dieses Begriffs.

Definition 3.7 Sei \hat{A} ein (nicht unbedingt selbstadjungierter) beschränkter Operator in \mathcal{H} .

1. Die **Resolventenmenge** $\varrho(\hat{A})$ des Operators \hat{A} ist genau die Menge der komplexen Zahlen λ , für die der Operator $\lambda \mathbf{1} - \hat{A}$ bijektiv ist und ein beschränktes Inverses besitzt. Der Operator

$$R_\lambda(\hat{A}) = (\lambda \mathbf{1} - \hat{A})^{-1}$$

heißt **Resolvente** von \hat{A} .

2. Das **Spektrum** von \hat{A} ist definiert durch

$$\sigma(\hat{A}) := \mathbb{C} \setminus \varrho(\hat{A}). \quad (3.30)$$

3. Die Zahl λ heißt **Eigenwert** von \hat{A} zum **Eigenvektor** $\psi \in \mathcal{H}$, falls gilt

$$\hat{A} \psi = \lambda \psi.$$

Man zeigt, daß die Resolventenmenge offen ist. Außerdem gilt für beschränkte Operatoren: Ein bijektiver Operator besitzt automatisch ein beschränktes Inverses, d.h. in diesem Fall ist die entsprechende Forderung in der obigen Definition redundant.

Satz 3.5 Sei \hat{A} ein beschränkter, selbstadjungierter Operator. Dann gilt:

1. $\sigma(\hat{A}) \subset \mathbb{R}^1$.
2. $\sup_{\lambda \in \sigma(\hat{A})} |\lambda| = \|\hat{A}\|$.

3. *Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal.*

Aus Definition 3.7 lesen wir ab, daß für $\lambda \in \sigma(\hat{A})$ folgende Fälle unterschieden werden können:

- a) Sei $\lambda \mathbf{1} - \hat{A}$ nicht **injektiv**, also ein Operator mit nichttrivalem Kern, d.h. es existiert ein Vektor $\psi \in \mathcal{H}$ mit $(\lambda \mathbf{1} - \hat{A})\psi = 0$. Damit ist λ ein Eigenwert von \hat{A} .
- b) Sei $\lambda \mathbf{1} - \hat{A}$ zwar **injektiv**, aber nicht **surjektiv**. Solche λ gehören zum Spektrum, sind aber keine Eigenwerte.

Definition 3.8 Die Menge aller Eigenwerte von \hat{A} heißt **Punktspektrum** von \hat{A} und wird mit $\sigma_p(\hat{A}) \subset \sigma(\hat{A})$ bezeichnet.

Beispiel: Sei $\mathcal{H} = L^2([0, 1], d\mu)$. Wir betrachten den Multiplikationsoperator \hat{x} für verschiedene Maße $d\mu$:

- a) Sei $\mu(x) = \sum_{i=1}^n \delta(x - \lambda_i)$ (Summe von Dirac-Maßen). Dann ist das Skalarprodukt gegeben durch:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \sum_i \int dx \delta(x - \lambda_i) \psi^*(x) \phi(x) = \sum_{i=1}^n \psi^*(\lambda_i) \phi(\lambda_i).$$

Offenbar wird durch die Wahl des Maßes vermöge der Abbildung

$$\psi \mapsto (\psi(\lambda_1), \dots, \psi(\lambda_n))$$

der Hilbertraum $\mathcal{H} = L^2([0, 1], d\mu)$ mit dem endlich-dimensionalen Hilbertraum $(\mathbb{C}^n, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ (isometrisch) identifiziert. Wir betrachten den Multiplikationsoperator \hat{x} auf $\mathcal{H} = L^2([0, 1], d\mu)$. Sein Erwartungswert ist

$$\langle \psi | \hat{x} \phi \rangle = \sum_i \int dx \delta(x - \lambda_i) x \psi^*(x) \phi(x) = \sum_{i=1}^n \psi^*(\lambda_i) \lambda_i \phi(\lambda_i).$$

Unter obigem Isomorphismus wird \hat{x} also folgendermaßen repräsentiert:

$$\hat{x}\psi \mapsto (\lambda_1 \psi(\lambda_1), \dots, \lambda_n \psi(\lambda_n)),$$

d.h. \hat{x} wirkt im \mathbb{C}^n als diagonale Hermitesche $n \times n$ -Matrix mit Eigenwerten $\{\lambda_i\}$. Der Multiplikationsoperator \hat{x} hat also in diesem Falle ein **reines Punktspektrum**.

- b) Wir wählen das Lebesgue-Maß μ_L auf $[0, 1]$. Dann ist das Skalarprodukt gegeben durch:

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int dx \psi^*(x) \phi(x).$$

Betrachten wir nun das Eigenwertproblem von \hat{x} , $(x - \lambda)\psi(x) = 0$, so ergibt sich $\psi(x) = 0$, für alle Punkte $x \neq \lambda$. Da ein Punkt das Maß Null hat, folgt $\psi = 0$. Es existiert also kein nichttrivialer Eigenvektor und damit ist das Punktspektrum von \hat{x} leer. Der Operator $\hat{x} - \lambda \mathbf{1}$ ist zwar auf seinem Bild invertierbar, aber **nicht surjektiv**. Man überzeugt sich leicht davon, daß für jedes $\lambda \in [0, 1]$ Funktionen ψ existieren, so daß $x \rightarrow \frac{1}{x - \lambda} \psi(x)$ nicht quadratintegrierbar ist. Damit haben wir in diesem Falle ein **rein kontinuierliches Spektrum**,

$$\sigma(\hat{x}) \equiv \sigma_c(\hat{x}) = [0, 1].$$

- c) Wir wählen $\mu(x) = \mu_L(x) + \delta(x - x_0)$, also eine "Überlagerung" der beiden bereits diskutierten Fälle. Dann erhält man ein kontinuierliches Spektrum mit eingelagertem Punktspektrum (bestehend aus $x = x_0$).

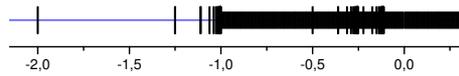


Abbildung 3.2: Im Bereich $[-2, -1)$ gibt es unendlich viele isolierte Eigenwerte, im Bereich $[-1, 0)$ sind unendlich viele EW eingelagert in das kontinuierliche Spektrum $[-1, \infty)$.

Der Begriff des kontinuierlichen Spektrums wird im weiteren noch präzisiert.

Bemerkung 3.7

Beispiel c) tritt in physikalisch relevanten Anwendungen auf, z.B. beim Heliumatom, siehe 2. Semester und Abb. 3.2.

Es zeigt sich, daß sich die im letzten Abschnitt angegebenen Versionen des **Spektralsatzes** auf den unendlich-dimensionalen Fall sinngemäß übertragen: Zunächst beweist man, daß das Diagonalisieren von Hermiteschen Matrizen verallgemeinerbar ist:

Satz 3.6 (1. Version des Spektralsatzes)⁴ Sei \hat{A} ein beschränkter, selbstadjungierter Operator im Hilbertraum \mathcal{H} . Dann existiert ein Raum M mit endlichem Maß $d\lambda$, eine meßbare, fast überall beschränkte Funktion $M \ni \lambda \mapsto a(\lambda) \in \mathbb{R}$ und ein unitärer Operator $\hat{F} : \mathcal{H} \rightarrow L^2(M, d\lambda)$, so daß gilt:

$$\left(\hat{F} \hat{A} \hat{F}^{-1} f \right) (\lambda) = a(\lambda) f(\lambda). \quad (3.31)$$

Bemerkung 3.8

Der Raum $(M, d\lambda)$ ist nicht kanonisch gegeben, man kann ihn auf verschiedene Weisen wählen. Er kann aber immer als Vereinigung von n Kopien des \mathbb{R}^1 realisiert werden, $n = 1, 2, \dots$ oder ∞ . Hat \hat{A} ein rein diskretes Spektrum, so überträgt sich auch die Eigenfunktionenentwicklung (3.19). Liegt dagegen ein kontinuierliches Spektrum vor, so gilt eine solche Entwicklung nur noch in einem verallgemeinerten Sinne. Damit befassen wir uns im nächsten Abschnitt.

Um zur 2. Version des Spektralsatzes zu kommen, erhebt man nun die in Bemerkung 3.6 gefundenen Eigenschaften des Spektralmaßes zu Axiomen und definiert damit diesen Begriff im allgemeinen Fall:

Definition 3.9 Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum. Eine Familie $\{\hat{E}(\Delta)\}$ von orthogonalen Projektoren, wobei $\Delta \subset \mathbb{R}^1$ alle Borelmengen durchläuft, heißt projektorwertiges Maß, falls gilt

(i) $\hat{E}(\emptyset) = 0$ und es existiert eine Borelmenge Δ_0 , so daß $\hat{E}(\Delta_0) = \mathbf{1}$ gilt.

(ii) Sei $\Delta = \bigcup_{n=1}^{\infty} \Delta_n$ mit $\Delta_n \cap \Delta_m = \emptyset$, für alle $n \neq m$. Dann gilt

$$\hat{E}(\Delta) = s - \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \hat{E}(\Delta_n). \quad (3.32)$$

Die Eigenschaft iv) aus Bemerkung 3.6 kann man aus dieser Definition beweisen. Wie im endlich-dimensionalen Fall hat man eine eindeutige Beziehung zwischen Spektralmaß und Spektralschar, vgl.(3.24) und (3.26). Für vorgegebenes Spektralmaß setzt man also wieder

$$\hat{E}_\lambda = \hat{E}([-\infty, \lambda]). \quad (3.33)$$

Man zeigt, daß die so definierte Familie $\{\hat{E}_\lambda\}$ tatsächlich alle Eigenschaften aus Bemerkung 3.4 hat. Nun beweist man

⁴siehe [Reed/Simon], Bd. I, Satz VII.3 und Folgerung

Satz 3.7 (2. bzw. 3. Version des Spektralsatzes)⁵

Sei $\hat{A} \in \mathbf{B}(\mathcal{H})$ selbstadjungiert. Dann existiert ein eindeutig definiertes Spektralmaß $\{\hat{E}(\Delta)\}$, so daß

$$\hat{A} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, d\hat{E}_{\lambda}. \quad (3.34)$$

gilt. Umgekehrt definiert jedes Spektralmaß eindeutig einen selbstadjungierten, beschränkten Operator in \mathcal{H} .

Bemerkung 3.9

(i) Natürlich erstreckt sich das Integral (3.34) wieder über das Spektrum,

$$\hat{A} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, d\hat{E}_{\lambda} = \int_{\sigma(\hat{A})} \lambda \, d\hat{E}_{\lambda},$$

und ist wie in Bemerkung 3.5 (iii) zu verstehen. Für alle $\phi, \psi \in \mathcal{H}$ gilt:

$$\langle \phi | \hat{A} \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, d\langle \phi | \hat{E}_{\lambda} \psi \rangle.$$

(ii) Insbesondere gilt:

$$\langle \hat{A} \rangle_{\psi} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, d\langle \psi | \hat{E}_{\lambda} \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, d\|\hat{E}_{\lambda} \psi\|^2,$$

aber aus Punkt i) der Definition 3.9 folgt

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\|\hat{E}_{\lambda} \psi\|^2 = 1,$$

d. h.: $\{\hat{E}_{\lambda}\}$ beschreibt wieder eine Wahrscheinlichkeitsverteilung, nur ist das Maß nun i. a. etwas komplizierter. Die Aussage, daß die Meßwerte der Observablen \hat{A} im Spektrum $\sigma(\hat{A})$ liegen, bleibt also im unendlich-dimensionalen Falle richtig. Für ein Intervall $\Delta = (\lambda, \lambda')$ ergibt sich natürlich

$$\|\hat{E}(\Delta) \psi\|^2 = \int_{\lambda}^{\lambda'} d\|\hat{E}_{\lambda} \psi\|^2. \quad (3.35)$$

Dies ist wieder die Wahrscheinlichkeit dafür, daß der Meßwert der Observablen \hat{A} im Intervall Δ liegt, vgl. mit (3.29).

Zum Abschluß dieses Abschnittes machen wir einige Bemerkungen zu verschiedenen Einteilungen des Spektrums. Wie bereits unter Punkt ii) obiger Bemerkung festgestellt, wird mit der Spektralschar E_{λ} , wie im Endlichdimensionalen, eine Familie von Spektralmaßen μ_{ψ} assoziiert:

$$d\mu_{\psi}(\lambda) := d\|E_{\lambda} \psi\|^2, \quad \psi \in \mathcal{H}.$$

Wie jedes Maß auf \mathbb{R} kann man μ_{ψ} eindeutig in

$$\mu_{\psi} = \mu_{\psi}^p + \mu_{\psi}^{ac} + \mu_{\psi}^{sing} \quad (3.36)$$

zerlegen, wobei μ_{ψ}^p ein Punktmaß, μ_{ψ}^{ac} absolutstetig bezüglich des Lebesgue-Maßes und μ_{ψ}^{sing} singulär ist. Man definiert

$$\mathcal{H}_p := \{\psi \in \mathcal{H} : \mu_{\psi} = \mu_{\psi}^p\}, \quad \mathcal{H}_{ac} := \{\psi \in \mathcal{H} : \mu_{\psi} = \mu_{\psi}^{ac}\}, \quad \mathcal{H}_{sing} := \{\psi \in \mathcal{H} : \mu_{\psi} = \mu_{\psi}^{sing}\}.$$

⁵siehe [Reed/Simon], Bd. I, Satz VII.8

Dann gilt

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_p \oplus \mathcal{H}_{ac} \oplus \mathcal{H}_{sing} \equiv \mathcal{H}_p \oplus \mathcal{H}_{cont} ,$$

wobei jeder einzelne Summand unter \hat{A} invariant ist. Nun definiert man

$$\sigma_{ac}(\hat{A}) := \sigma(\hat{A}|_{\mathcal{H}_{ac}}) , \quad \sigma_{sing}(\hat{A}) := \sigma(\hat{A}|_{\mathcal{H}_{sing}}) , \quad \sigma_{cont}(\hat{A}) := \sigma(\hat{A}|_{\mathcal{H}_{cont}}) .$$

$\sigma_{cont}(\hat{A})$ heißt **kontinuierliches Spektrum** und seine Anteile $\sigma_{ac}(\hat{A})$ und $\sigma_{sing}(\hat{A})$ heißen **absolutstetiges** und **singuläres Spektrum**. Man kann zeigen, daß

$$\sigma_{cont}(\hat{A}) = \sigma_{ac}(\hat{A}) \cup \sigma_{sing}(\hat{A}) , \quad \sigma(\hat{A}) = \overline{\sigma_P(\hat{A})} \cup \sigma_{cont}(\hat{A})$$

gilt.

Bemerkung 3.10

Das kontinuierliche Spektrum und das Punktspektrum sind nicht notwendig disjunkt, wie obiges Beispiel c) zeigt. Man beachte, daß bei manchen Autoren das Punktspektrum aus dem kontinuierlichen Spektrum herausgenommen wird. Dann wäre im Beispiel c) $[0, x_0[\cup]x_0, 1]$ der kontinuierliche Anteil. Die Anteile $\delta(x - x_0)$ und μ_L in Beispiel c) entsprechen den Komponenten μ_ψ^p und μ_ψ^{ac} in der Zerlegung (3.36).

Die Spektralfamilie liefert noch eine andere, sehr natürliche Einteilung des Spektrums in die (disjunkte) Vereinigung von **diskretem** und **essentiellem** Spektrum:

$$\sigma(\hat{A}) = \sigma_{\text{diskret}}(\hat{A}) \cup \sigma_{\text{ess}}(\hat{A}) .$$

Diese beiden Teilmengen sind folgendermaßen definiert:

$$\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(\hat{A}) \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \hat{E}(\Delta) , \Delta = (\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon) , \\ \text{ist unendlich-dimensional} \quad \forall \varepsilon \end{array} \right\}$$

$$\lambda \in \sigma_{\text{diskret}}(\hat{A}) \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \exists \varepsilon > 0 , \text{ so daß } \hat{E}(\Delta) , \Delta = (\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon) , \\ \text{endlich-dimensional ist.} \end{array} \right\} .$$

Man zeigt:

Satz 3.8 $\sigma_{\text{diskret}}(\hat{A})$ ist genau die Menge der **isolierten** Eigenwerte von \hat{A} mit endlicher Multiplizität. Insbesondere gilt: $\sigma_{\text{diskret}}(\hat{A}) \subset \sigma_P(\hat{A})$.

Die entsprechende Zerlegung des HR ist

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{diskret}} \oplus \mathcal{H}_{\text{ess}} ,$$

wobei wir uns in $\mathcal{H}_{\text{diskret}}$, wie im endlich-dimensionalen Fall, orthonormale Basen durch Eigenfunktionen von \hat{A} verschaffen können. Dagegen kann man mit \mathcal{H}_{ess} nur "verallgemeinerte Eigenfunktionen" assoziieren. Mit diesen befassen wir uns nun:

3.4.3 Verallgemeinerte Eigenfunktionen

Im endlich-dimensionalen Fall hatten wir für die Projektoren \hat{P}_{λ_i} der Spektralzerlegung

$$\hat{A} = \sum_i \lambda_i \hat{P}_{\lambda_i}$$

des s. a. Operators \hat{A} die Darstellung

$$\hat{P}_{\lambda_i} = \sum_\alpha |\lambda_i, \alpha\rangle \langle \alpha, \lambda_i| ,$$

wobei $\{|\lambda_i, \alpha\rangle\}$ eine orthonormale Basis in \mathcal{H} gebildet aus Eigenvektoren von \hat{A} ist. Wegen

$$\sum_i \hat{P}_{\lambda_i} = \mathbf{1}$$

folgt daraus die **Eigenfunktionenentwicklung** des Vektors $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ nach diesen Eigenvektoren

$$|\psi\rangle = \sum_{i,\alpha} |\lambda_i, \alpha\rangle \langle \alpha, \lambda_i | \psi \rangle, \quad (3.37)$$

vgl. (3.19). Aus den Betrachtungen des letzten Abschnittes ist klar, daß sich diese Formel direkt auf den unendlich-dimensionalen Fall überträgt, vorausgesetzt, \hat{A} hat ein reines Punktspektrum.

Wir fragen uns, ob es für den allgemeinen Fall eine analoge Formel gibt. Allgemein gilt

$$\hat{A} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, d\hat{E}_\lambda, \quad \int_{-\infty}^{\infty} d\hat{E}_\lambda = \mathbf{1}$$

und damit formal

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\hat{E}_\lambda |\psi\rangle.$$

Die in dieser Formel auftretenden Elemente der Spektralschar können natürlich **nicht** als Eigenvektoren in \mathcal{H} , zum Eigenwert λ interpretiert werden. Es existiert aber eine sinnvolle Verallgemeinerung dieser Begriffe:

Beispiel 3.1 (Ortsoperator)

Wie wir in Beispiel b) aus Abschnitt 3.4.2 gesehen hatten, hat der Operator $\hat{x} \in \mathbf{B}(L^2(\Omega))$ der Ortsmessung im kompakten Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^1$ ein rein kontinuierliches Spektrum, $\sigma_c(\hat{x}) = \Omega$. D. h., das Eigenwertproblem $\hat{x}\psi(x) = \lambda\psi(x)$ hat keine nichtrivialen Lösungen für $\psi \in L^2(\Omega)$. Es gibt aber offensichtlich eine Lösung im **Distributionen-Sinne**:

$$\psi_\lambda(x) = \delta(x - \lambda). \quad (3.38)$$

Die Distribution ψ_λ ist ein Funktional, etwa auf dem Raum $D = \mathcal{C}_0^\infty(\Omega)$ der beliebig oft differenzierbaren Funktionen mit kompaktem Träger⁶. Sei $\phi \in D$. Wir berechnen

$$\psi_\lambda(\phi) \equiv \langle \psi_\lambda | \phi \rangle = \int_{\Omega} dx \, \psi_\lambda(x) \phi(x) = \int_{\Omega} dx \, \delta(x - \lambda) \phi(x) = \phi(\lambda). \quad (3.39)$$

Dabei ist $\langle \psi_\lambda | \phi \rangle$ eine Bezeichnung für die Auswertung des Funktionals $\psi_\lambda \in D'$ auf der Testfunktion ϕ und nicht etwa das Skalarprodukt in \mathcal{H} . In Verallgemeinerung des Diracschen bra-ket-Formalismus schreiben wir im weiteren $\psi_\lambda \equiv \langle \lambda |$. Die Verallgemeinerung des üblichen Eigenwertproblems führt uns also auf ein sogenanntes **Gelfandsches Tripel** (jeweils dichter Unterräume):

$$D \subset \mathcal{H} \subset D'. \quad (3.40)$$

Eine **verallgemeinerte Eigenfunktion** liegt nicht im Hilbertraum, sondern in D' . Wir bilden für beliebige $\chi, \phi \in D \subset \mathcal{H}$ das Skalarprodukt:

$$\langle \chi | \phi \rangle = \int_{\Omega} d\lambda \, \chi(\lambda)^* \phi(\lambda) = \int_{\Omega} d\lambda \, \langle \lambda | \chi \rangle^* \langle \lambda | \phi \rangle.$$

Um an die übliche bra-ket-Darstellung der Zerlegung der $\mathbf{1}$ im Hilbertraum anzuknüpfen, bezeichnen wir

$$\langle \lambda | \chi \rangle^* \equiv \langle \chi | \lambda \rangle.$$

⁶Diese Forderung ist im vorliegenden Beispiel natürlich redundant.

Dann erhalten wir

$$\langle \chi | \phi \rangle = \int_{\Omega} d\lambda \langle \chi | \lambda \rangle \langle \lambda | \phi \rangle. \quad (3.41)$$

Dies ist eine verallgemeinerte Vollständigkeitsrelation, für die wir symbolisch schreiben:

$$\int d\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda| = \mathbf{1}. \quad (3.42)$$

Dabei ist $|\lambda\rangle\langle\lambda|$ als Abbildung $|\lambda\rangle\langle\lambda| : D \rightarrow D'$ aufzufassen. Es gilt also die **verallgemeinerte Eigenfunktionentwicklung**

$$|\phi\rangle = \int_{\Omega} d\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda|\phi\rangle \quad (3.43)$$

für Elemente aus dem dichten Unterraum $D \subset \mathcal{H}$. Daraus ergibt sich

$$\langle x | \phi \rangle = \int_{\Omega} d\lambda \langle x | \lambda \rangle \langle \lambda | \phi \rangle, \quad (3.44)$$

also die Orthogonalitätsrelation

$$\langle \lambda' | \lambda \rangle = \delta(\lambda' - \lambda). \quad (3.45)$$

Analog können wir den Ortsoperator auf ganz \mathbb{R} behandeln. In obigen Formeln ist dann Ω durch \mathbb{R} zu ersetzen. Dies ist natürlich ein **unbeschränkter** Operator im Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}, dx)$. Sein Definitionsbereich ist

$$D(\hat{x}) := \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}, dx) : \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 |\psi(x)|^2 < \infty \right\}.$$

In Abschnitt 3.6 wird bewiesen, daß \hat{x} mit diesem Definitionsbereich selbstadjungiert ist. In 3 Dimensionen gilt obiges natürlich für jede Komponente des Ortsoperators. Wir bezeichnen die verallgemeinerten Eigenfunktionen des Ortsoperators $\hat{\vec{x}}$ mit $\langle \vec{x} |$. Dann gilt für jeden Vektor ϕ (aus dem dichten Unterraum D) die verallgemeinerte Eigenfunktionentwicklung:

$$|\phi\rangle = \int d^3x |\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\phi\rangle. \quad (3.46)$$

Die Funktion

$$\phi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \phi \rangle \quad (3.47)$$

liefert den Repräsentanten von ϕ in der **Ortsdarstellung**. Dies ist die gewöhnliche Ortswellenfunktion.

Beispiel 3.2 (Impulsoperator)

Wir betrachten den (unbeschränkten) Impulsoperator

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (3.48)$$

in einer Dimension auf dem Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}, dx)$ mit dem Definitionsbereich

$$D(\hat{p}) = \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}) : \psi \in AC(\mathbb{R}); \psi' \in L^2(\mathbb{R}) \right\}.$$

In Abschnitt 3.6 wird gezeigt, daß \hat{p} selbstadjungiert ist. Wir diskutieren das verallgemeinerte Eigenwertproblem,

$$(\hat{p}\psi)(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x) = \lambda \psi(x).$$

Wir verwenden für \hat{p} das gleiche Gelfandsche Tripel (3.40). Die verallgemeinerten Eigenfunktionen $\psi_{\lambda} \equiv \langle \lambda |$ sind in diesem Falle offensichtlich gegeben durch die folgenden Distributionen:

$$\psi_{\lambda}(x) = a e^{\frac{i}{\hbar} \lambda x}.$$

Analoges gilt für jede Komponente des Impulsoperators in 3 Dimensionen. Wir bezeichnen die zugehörigen verallgemeinerten Eigenfunktionen mit $\langle \vec{p} |$. Sie sind, bis auf eine Phase, durch (3.42) eindeutig bestimmt. Dann gilt für jeden Vektor $\phi \in D$, wie im vorigen Beispiel, die verallgemeinerte Eigenfunktionsentwicklung

$$|\phi\rangle = \int d^3p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p} | \phi \rangle. \quad (3.49)$$

Die Funktion

$$\tilde{\phi}(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \phi \rangle \quad (3.50)$$

liefert den Repräsentanten von ϕ in der **Impulsdarstellung**.

Die Bezeichnung $\tilde{\phi}$ ist natürlich nicht zufällig. Unter Verwendung von (3.42) erhalten wir die folgende Beziehung zwischen Orts- und Impulsdarstellung:

$$\tilde{\phi}(\vec{p}) = \int d^3x \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \phi \rangle = \int d^3x \langle \vec{p} | \vec{x} \rangle \phi(\vec{x}).$$

Wir müssen nun nur noch $\langle \vec{p} | \vec{x} \rangle$ berechnen. Aber $\langle \vec{p} | \vec{x} \rangle^* = \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle \equiv \psi_{\vec{p}}(\vec{x})$ ist die Wellenfunktion zum Impuls \vec{p} in der Ortsdarstellung, die, wie oben bemerkt, zunächst bis auf eine Phase bestimmt ist. Wir bestimmen nun diese Phase: $\psi_{\vec{p}}(\vec{x})$ erfüllt die Gleichung

$$-i\hbar \nabla \psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \vec{p} \psi_{\vec{p}}(\vec{x}),$$

ist also von der Gestalt

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = C(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}.$$

Man zeigt, daß $C(\vec{p}) = C = \text{const}$ sein muß⁷ und unter Verwendung von (3.42) findet man $|C|^2 = (2\pi\hbar)^3$. Daraus erhalten wir

$$\langle \vec{p} | \vec{x} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}},$$

also

$$\tilde{\phi}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int d^3x e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}} \phi(\vec{x}). \quad (3.51)$$

Der Zustandvektor in der Impulsdarstellung stimmt also genau mit der **Fouriertransformation** des Vektors in der Ortsdarstellung überein. Insbesondere folgt daraus, daß die in Abschnitt 2.3 gegebene probabilistische Interpretation für die Fouriertransformierte auf diesen Zustandsvektor zutrifft.

Obige Beispiele kann man verallgemeinern. Wie aus den Beispielen klar wurde, muß man dazu die übliche Hilbertraum-Theorie verlassen. Wir beschränken uns auf einige elementare Bemerkungen und verweisen ansonsten auf die untenstehende Literaturliste⁸. Sei Φ ein dichter Teilraum eines Hilbertraumes \mathcal{H} , versehen mit einer nuklearen⁹ Topologie, so daß die natürliche Einbettung $\Phi \rightarrow \mathcal{H}$ stetig ist, und sei Φ' der Raum der stetigen linearen Funktionale auf Φ . Da Φ dicht liegt, kann \mathcal{H} mit einem Teilraum von Φ' identifiziert werden. Unter diesen Annahmen heißt

$$\Phi \subset \mathcal{H} \subset \Phi'$$

⁷siehe [Galindo/Pascual], Bd.I, Abschnitt 3..

⁸K. Maurin, *General Eigenfunction Expansions and Unitary Representations of Topological Groups*, Polish Scient. Publ., Warsaw 1968

J.P. Antoine, *J. Math. Phys.*, Vol. 10, No. 1 (1969), 53–69

J.E. Roberts, *J. Math. Phys.*, Vol. 7, No. 6 (1966), 1097–1104; *Commun. Math. Phys.*, Vol. 3, No. 2 (1966), 98–119

Y.M. Berezansky et.al., *Functional Analysis*, Vol. I and II, Birkhäuser Verlag 1996

siehe auch [Berezin/Shubin], Supplement 1, Theorem 2.1

⁹ K. Maurin, *Methods of Hilbert Spaces*, Polish Scient. Publ., Warsaw 1967, §VII.9

Gelfandsches Tripel. Nehmen wir an, eine (beschränkte) Observable \hat{A} läßt Φ invariant und ist als Operator $\hat{A} : \Phi \rightarrow \Phi$ stetig. Dann kann man \hat{A} zu einem stetigen Operator \hat{A}' auf Φ' erweitern:

$$\langle \hat{A}'\lambda | \phi \rangle := \langle \lambda | \hat{A}\phi \rangle, \quad |\phi\rangle \in \Phi, \quad \langle \lambda | \in \Phi'. \quad (3.52)$$

Wir setzen im weiteren immer voraus, daß das Spektrum $\sigma(\hat{A})$ von \hat{A} **keinen singulären** Anteil hat. Sei, der Einfachheit wegen, $\sigma(\hat{A})$ zunächst **nichtentart**. Dann wissen wir aus dem Spektraltheorem 3.6, daß ein Maß $d\lambda$ auf \mathbb{R} und eine unitäre Abbildung

$$F : \mathcal{H} \ni \phi \mapsto \tilde{\phi} \in L^2(\mathbb{R}, d\lambda)$$

existieren, so daß gilt:

$$(F\hat{A}F^{-1}f)(\lambda) = \lambda f(\lambda), \quad f \in L^2(\mathbb{R}, d\lambda). \quad (3.53)$$

Die Abbildung F heißt **\hat{A} -Fourier-Transformation**. Man beweist nun (siehe Zitate) den folgenden, für diese Theorie fundamentalen Sachverhalt: Unter den gemachten Annahmen ist die durch F induzierte Abbildung

$$\mathcal{H} \supset \Phi \ni \phi \mapsto F_\lambda(\phi) := \tilde{\phi}(\lambda) \in \mathbb{C}$$

nuklear¹⁰ und **stetig**, d.h. es existiert für jedes λ ein lineares stetiges Funktional $\langle \lambda | \in \Phi'$, so daß

$$F_\lambda(\phi) = \tilde{\phi}(\lambda) = \langle \lambda | \phi \rangle \quad (3.54)$$

gilt. Damit folgt aus (3.52) und (3.53) für beliebige $|\phi\rangle \in \Phi$

$$\langle \hat{A}'\lambda | \phi \rangle = \lambda \langle \lambda | \phi \rangle. \quad (3.55)$$

Da F unitär ist, gilt für beliebige $\phi, \chi \in \Phi$ die **verallgemeinerte Parseval-Identität**:

$$\langle \chi | \phi \rangle = \langle F\chi | F\phi \rangle = \int d\lambda \tilde{\chi}(\lambda)^* \tilde{\phi}(\lambda) = \int d\lambda \langle \lambda | \chi \rangle^* \langle \lambda | \phi \rangle$$

und insbesondere

$$\|\phi\|^2 = \int d\lambda |\tilde{\phi}(\lambda)|^2. \quad (3.56)$$

Um an physikalische Standardbezeichnungen anzuknüpfen, schreiben wir wieder $\langle \lambda | \chi \rangle^* \equiv \langle \chi | \lambda \rangle$, d. h., $|\lambda\rangle$ ist die Hintereinanderausführung des linearen Funktionals $\langle \lambda | : \Phi \rightarrow \mathbb{C}$ und der Konjugation in \mathbb{C} . Dann erhalten wir

$$\langle \chi | \phi \rangle = \int d\lambda \langle \chi | \lambda \rangle \langle \lambda | \phi \rangle. \quad (3.57)$$

Wir schreiben in diesen Bezeichnungen die **inverse \hat{A} -Fourier-Transformation** auf: Im schwachen Sinne gilt

$$|\phi\rangle = \int d\lambda |\lambda\rangle \langle \lambda | \phi \rangle, \quad \phi \in \Phi, \quad (3.58)$$

mit $|\lambda\rangle \langle \lambda | : \Phi \rightarrow \Phi'$. Gleichung (3.58) liefert die **verallgemeinerte Eigenfunktionenentwicklung** bezüglich \hat{A} und die Funktion $\lambda \mapsto \tilde{\phi}(\lambda)$ heißt **\hat{A} -Darstellung** von ϕ .

Wir diskutieren eine Reihe von physikalisch relevanten Verallgemeinerungen:

Bemerkung 3.11

1. Im allgemeinen hat der (beschränkte) Operator \hat{A} ein entartetes Spektrum. Dann ist $\langle \lambda |$ durch

$$\langle \lambda, \alpha |, \quad \alpha = 1, 2, \dots, \dim \mathcal{H}(\lambda),$$

¹⁰siehe Fußnote 9

zu ersetzen. Dabei bezeichnet $\mathcal{H}(\lambda)$ den zu λ gehörigen Hilbertraum. Genauer gesagt, ist dann $L^2(\mathbb{R}, d\lambda)$ durch ein sogenanntes **direktes Integral von Hilberträumen** $\int^\oplus \mathcal{H}(\lambda) d\lambda$ zu ersetzen, (zur Definition dieses Begriffs siehe Zitate). Die verallgemeinerte Eigenfunktionenentwicklung lautet damit:

$$|\phi\rangle = \int d\lambda \sum_{\alpha} |\lambda, \alpha\rangle \langle \alpha, \lambda | \phi \rangle, \quad (3.59)$$

bzw. nach Abtrennen des Punktspektrums-Anteils vom kontinuierlichen Spektrum:

$$|\phi\rangle = \sum_{\lambda_i \in \sigma_P(\hat{A})} \sum_{\alpha} |\lambda_i, \alpha\rangle \langle \alpha, \lambda_i | \phi \rangle + \int_{\sigma_c(\hat{A})} d\lambda \sum_{\alpha} |\lambda, \alpha\rangle \langle \alpha, \lambda | \phi \rangle. \quad (3.60)$$

2. In physikalischen Anwendungen verwenden wir sogenannte **vollständige Systeme kommutierender Observabler**. Diese werden im nächsten Abschnitt ausführlich diskutiert. Sind alle betrachteten Observablen beschränkt, so folgt die Verallgemeinerung der obigen Theorie auf diesen Fall sofort aus dem Spektraltheorem für kommutative C^* -Algebren. Aus der **Vollständigkeit** folgt, daß keine Entartung, wie in Punkt i) diskutiert, mehr vorliegt. Es gilt in diesem Falle wieder das Analogon der verallgemeinerte Eigenfunktionenentwicklung (3.58),

$$|\phi\rangle = \int d\lambda |\lambda\rangle \langle \lambda | \phi \rangle, \quad \phi \in \Phi. \quad (3.61)$$

Allerdings ist hier, für den Fall von n kommutierenden Observablen $(\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n)$, der Maßraum $(\mathbb{R}, d\lambda)$ durch $(\mathbb{R}^n, d\lambda)$ zu ersetzen. Die verallgemeinerten Eigenwerte sind n -Tupel $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$.

3. Im allgemeinen sind einige der betrachteten Observablen **unbeschränkt**. Hat man ein System unbeschränkter, selbstadjungierter Operatoren, die im starken Sinne kommutieren, dann kann man auf kanonische Weise¹¹ einen Unterraum Φ konstruieren, der alle notwendigen Eigenschaften hat. Anschließend baut man die Theorie wie oben beschrieben auf.

3.5 Vollständige Systeme kommutierender Observabler und Superauswahlregeln

Sei zunächst \hat{A} ein selbstadjungierter Operator im endlich-dimensionalen Hilbertraum \mathcal{H} . Dann liefert die Spektralzerlegung $\hat{A} = \sum_{\lambda} \lambda \hat{P}_{\lambda}$ die Zerlegung

$$\mathcal{H} = \hat{P}_1 \mathcal{H} \oplus \hat{P}_2 \mathcal{H} \oplus \dots \oplus \hat{P}_m \mathcal{H} \quad (3.62)$$

des Hilbertraumes, wobei i.a. $\dim \hat{P}_i \mathcal{H} > 1$ gilt. Wir bezeichnen die orthonormale Basis, gebildet aus Eigenvektoren von \hat{A} , wieder mit $\{|\lambda, \alpha\rangle\}$. Wird nun bei der Messung der Observablen \hat{A} ein Eigenwert λ gemessen, so kann **nicht** entschieden werden, in welchem reinen Zustand sich das System befindet. Wir wissen nur, daß der Zustand im Unterraum $\hat{P}_{\lambda} \mathcal{H}$ liegt.

Wählen wir eine weitere Observable \hat{B} , die mit \hat{A} kommutiert,

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0,$$

so sind beide Observable gleichzeitig scharf meßbar: Sei $\psi \in \hat{P}_{\lambda} \mathcal{H}$, d.h.: $\hat{A} \psi = \lambda \psi$. Dann gilt

$$\hat{A} \hat{B} \psi = \hat{B} \hat{A} \psi = \lambda \hat{B} \psi,$$

¹¹siehe [Maurin], Abschnitt II.3, Theorem 6

d.h. $\hat{B}\psi$ ist wieder ein Eigenvektor von \hat{A} zum Eigenwert λ . Damit gilt $\hat{B}\psi \in \hat{P}_\lambda\mathcal{H}$, d. h., \hat{B} läßt die Zerlegung (3.62) invariant und wirkt in jedem Unterraum $\hat{P}_\lambda\mathcal{H}$. Wir können nun jeden dieser Unterräume weiter in Eigenunterräume der Observablen \hat{B} zerlegen. Dies führt zu einer Zerlegung von $\hat{P}_\lambda\mathcal{H}$ in Unterräume, die von Eigenvektoren von \hat{B} aufgespannt werden. Sei $\hat{B} = \sum_\mu \mu \hat{Q}_\mu$ die Spektralzerlegung von \hat{B} und sei $\mathcal{H}_{\lambda\mu} := \hat{Q}_\mu \hat{P}_\lambda \mathcal{H}$. Dann gilt

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{\lambda,\mu} \mathcal{H}_{\lambda\mu}.$$

Die Unterräume $\mathcal{H}_{\lambda\mu}$ sind entweder trivial oder bestehen aus gemeinsamen Eigenvektoren von \hat{A} und \hat{B} . Wählt man in jedem der nichttrivialen $\mathcal{H}_{\lambda\mu}$ eine Orthonormalbasis $|\lambda, \mu; \beta\rangle$, $\beta = 1, \dots, \dim \mathcal{H}_{\lambda\mu}$, so erhält man eine Orthonormalbasis in \mathcal{H} aus gemeinsamen Eigenvektoren von \hat{A} und \hat{B} :

$$\begin{aligned} \hat{A}|\lambda, \mu; \beta\rangle &= \lambda|\lambda, \mu; \beta\rangle \\ \hat{B}|\lambda, \mu; \beta\rangle &= \mu|\lambda, \mu; \beta\rangle. \end{aligned}$$

Falls alle nichttrivialen Unterräume $\mathcal{H}_{\lambda\mu} \subset \mathcal{H}$, aufgespannt durch die $|\lambda, \mu; \beta\rangle$ eindimensional sind, ist der Zählindex β überflüssig und wir schreiben $|\lambda, \mu\rangle$. Wir haben in diesem Falle eine Zerlegung von \mathcal{H} in eindimensionale Unterräume aufgespannt durch die $\{|\lambda, \mu\rangle\}$. Wir nennen dann $\{\hat{A}, \hat{B}\}$ ein vollständiges System kommutierender (bzw. kompatibler) Observabler. Falls es noch Unterräume $\mathcal{H}_{\lambda\mu}$ mit $\dim \mathcal{H}_{\lambda\mu} > 1$ gibt, existieren (in jedem dieser $\mathcal{H}_{\lambda\mu}$) mehrere linear unabhängige Vektoren $|\lambda, \mu, \beta\rangle$ mit gleichen "Quantenzahlen" λ und μ , d. h., \hat{A} und \hat{B} genügen nicht, um zwischen diesen Vektoren zu unterscheiden. Wir müssen also nach weiteren kommutierenden Observablen suchen, und zwar so lange, bis wir eine vollständige Zerlegung in eindimensionale Teilräume gefunden haben.

Definition 3.10 Die Menge $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots\}$ heißt **vollständiges System kommutierender Observabler**, falls gilt:

1. Die Operatoren kommutieren paarweise.
2. Die Basis, gebildet aus den Eigenvektoren $\{|\lambda, \mu, \nu, \dots\rangle\}$, ist (bis auf die Phasen) **eindeutig** bestimmt, d.h.: \mathcal{H} zerfällt in eindimensionale Unterräume, aufgespannt durch diese Eigenvektoren.
3. Das System ist nicht redundant: Wird ein Operator entfernt, dann ist Punkt 2. nicht mehr erfüllt.

Führt man nun eine Messung **aller** Elemente eines Systems kommutierender Observabler durch, so kann man entscheiden, in welchem reinen Zustand sich das System befindet.

Bemerkung 3.12

- (i) Es gilt $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ genau dann, wenn alle Spektralprojektoren von \hat{A} und \hat{B} kommutieren. Sei $\hat{P}_\lambda\psi \in \hat{P}_\lambda\mathcal{H}$. Dann gilt $\hat{Q}_\mu \hat{P}_\lambda \psi \in \hat{P}_\lambda\mathcal{H}$, für alle μ , und damit $\hat{P}_\lambda \hat{Q}_\mu \hat{P}_\lambda = \hat{Q}_\mu \hat{P}_\lambda$. Hermitesche Konjugation dieser Gleichung liefert $\hat{P}_\lambda \hat{Q}_\mu \hat{P}_\lambda = \hat{P}_\lambda \hat{Q}_\mu$. Die andere Richtung in obiger Behauptung ist trivial.
- (ii) Die Verallgemeinerung auf beliebige beschränkte, selbstadjungierte Operatoren in \mathcal{H} ist trivial, solange für die betrachteten Observablen reine Punktspektren vorliegen. Liegen kontinuierliche Spektren vor, so ist die verallgemeinerte Eigenfunktionenzerlegung (3.60) zu verwenden (und an die Stelle der direkten Summe tritt ein direktes Integral von Hilberträumen.) Der Begriff des Systems kommutierender Observabler überträgt sich ansonsten sinngemäß auf diesen Fall.
- (iii) Sei ein vollständiges System $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots\}$ kommutierender Observabler gegeben und sei $\{|\lambda, \mu, \nu, \dots\rangle\}$ das zugehörige Basissystem. Sei \hat{T} eine Observable, die mit allen Elementen dieses Systems kommutiert. Dann sind obige Basiselemente auch Eigenvektoren von \hat{T} und damit die Eigenwerte von \hat{T} Funktionen der Eigenwerte λ, μ, ν, \dots . Im Sinne des Operatorfunktionskalküls ist also \hat{T} eine Funktion der Observablen $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$.

- (iv) Aus tieferer mathematischer Sicht bedeutet das Suchen nach einem vollständigen System kommutierender Observabler folgendes:
1. Für (durch die physikalische Problemstellung vorgegebenen) Hilbertraum und eine vorgegebene Observablen $\hat{A} \in \mathbf{B}(\mathcal{H})$ bilden wir zunächst die Kommutante $\mathcal{M}'(\hat{A}) \subset \mathbf{B}(\mathcal{H})$, (dies sind alle Operatoren aus $\mathbf{B}(\mathcal{H})$, die mit \hat{A} vertauschen.)
 2. Wir suchen eine maximale kommutative Unteralgebra in $\mathcal{M}'(\hat{A})$. Daß man mit obiger Vorschrift immer zu einer maximalen kommutativen Unteralgebra kommt, folgt aus dem Zornschen Lemma. Allerdings ist es denkbar, daß in $\mathcal{M}'(\hat{A})$ mehrere verschiedene maximale kommutative Unteralgebren existieren. Die Wahl der weiteren Observablen \hat{B}, \hat{C}, \dots wird durch die physikalische Problemstellung nahegelegt.
 3. Für eine kommutative C^* -Algebra zeigt man (Spektralsatz), daß es eine gemeinsame Spektralschar für alle ihre Elemente gibt. Damit zerfällt der Hilbertraum in eine direkte, orthogonale Summe gemeinsamer Eigenräume. Da bei einer maximalen kommutativen Unteralgebra die gemeinsamen Eigenräume irreduzibel sind (Lemma von Schur) und da die irreduziblen Darstellungen einer kommutativen C^* -Algebra eindimensional sind, sind die gemeinsamen Eigenräume eindimensional.
- (v) Wir machen einige Bemerkungen zur Terminologie im Zusammenhang mit dem quantenmechanischen Meßprozess. Wir nennen eine Messung, die das quantenmechanische System in einen definierten reinen Zustand überführt, **Messung 1. Art**, (oder **ideale Messung**, oder **Präparation**). Aus obiger Diskussion folgt, daß eine solche Präparation durch die Messung eines vollständigen Systems kommutierender Observabler geschieht. Lag vor der Messung ein Zustand $|\phi\rangle$ vor und wird durch die Messung der Zustand $|\psi\rangle$ präpariert, so sprechen wir von einer **Reduktion** des Zustandes durch Messung. Die Frage, “auf welchen Wege sich $|\phi\rangle$ nach $|\psi\rangle$ bewegt”, wird nicht gestellt. Dafür würden wir ein theoretisches Modell für die Wechselwirkung von Meßobjekt und Meßapparatur benötigen. Man sagt in diesem Kontext auch, eine ideale Messung wirke wie ein **idealer Filter**, (der aus allen möglichen Zuständen genau den reinen Zustand $|\psi\rangle$ auswählt.) Nach durchgeführter Präparation wird die Zeitentwicklung von $|\psi\rangle$ durch die Schrödingergleichung **deterministisch** festgelegt, d.h. solange wie das System nicht durch weitere Messungen “gestört” wird, kann man die statistische Verteilung der Meßwerte genau voraussagen.

Mitunter spricht man noch von **Messungen 2. Art**. Dies sind solche, bei denen die Information über die Eigenschaft, die gemessen wird, im Meßprozeß zerstört wird, (z.B. die Messung des Impulses eines Elektrons, welches in einem Magnetfeld abgelenkt wird und bei der Messung “im Detektor verschwindet”.)

Das Experiment legt nahe, daß gewisse Observable $\{\hat{Q}_i\}$ existieren, die mit allen Observablen vertauschen, d.h., diese \hat{Q}_i gehören zu jedem vollständigen System von kommutierenden Observablen. Ein wichtiges Beispiel für eine solche **Superauswahlobservable** ist die **elektrische Ladung**. Wir werden im Laufe der Vorlesung weitere Beispiele kennenlernen.

Wir zerlegen \mathcal{H} in gemeinsame Unterräume (**Superauswahlsektoren**) der \hat{Q}_i :

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{\{q_i\}} \mathcal{H}(\{q_i\}). \quad (3.63)$$

Seien $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ Zustände, die sich in den Eigenwerten $\{q_i\}$ unterscheiden, also aus verschiedenen Unterräumen der Zerlegung (3.63) stammen. Da eine beliebige Observable \hat{A} mit allen $\{\hat{Q}_i\}$ kommutiert, läßt \hat{A} die Zerlegung (3.63) invariant. Damit gilt:

$$\langle \psi_1 | \hat{A} \psi_2 \rangle = 0,$$

für **alle** Observable. Wir betrachten die Superposition $|\psi\rangle = \alpha_1 |\psi_1\rangle + \alpha_2 |\psi_2\rangle$. Dieser Vektor repräsentiert keinen reinen Zustand, denn er besitzt keine wohldefinierten Quantenzahlen q_i . Dies bedeutet auch, daß

es **experimentell** unmöglich ist, einen reinen Zustand als Superposition der reinen Zustände $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ zu präparieren. (In der Tat ist es unmöglich, etwa einen reinen Zustand als Superposition reiner Zustände mit unterschiedlicher elektrischer Ladung zu präparieren.)

Wir verstehen dies noch besser, wenn wir den Erwartungswert einer beliebigen Observablen \hat{A} für eine solche Superposition analysieren:

$$\langle \psi | \hat{A} \psi \rangle = |\alpha_1|^2 \langle \psi_1 | \hat{A} \psi_1 \rangle + |\alpha_2|^2 \langle \psi_2 | \hat{A} \psi_2 \rangle,$$

d.h.: $|\psi\rangle$ unterscheidet sich in der Tat nicht vom gemischten¹² Zustand

$$\hat{\rho} = |\alpha_1|^2 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\alpha_2|^2 |\psi_2\rangle\langle\psi_2|.$$

Diese Betrachtungen führen offensichtlich zu einer Modifikation des früher formulierten naiven **Superpositionsprinzips**. Das Superpositionsprinzip gilt nur innerhalb der Superauswahlsektoren, d.h. jede Superposition von reinen Zuständen in einem fixierten Sektor $\mathcal{H}(\{q_i\})$ ist ein reiner Zustand.

3.6 Bemerkungen zu unbeschränkten Operatoren

Das Material dieses Abschnittes dient dem mathematisch interessierten Hörer als Zusatzinformation, es ist nicht Gegenstand der Diplomprüfung. Im weiteren Verlauf der Vorlesung wird auf diesen Abschnitt nur in Zusatzbemerkungen, die den mathematischen Hintergrund präzisieren sollen, Bezug genommen.

Im Labor messen wir beschränkte Observable, aber es ist eine bequeme und für viele Zwecke unerläßliche mathematische Idealisierung, mit unbeschränkten Observablen zu arbeiten, (z. B. anstelle der beschränkten Operatorfunktion $f(\hat{x})$ den unbeschränkten Operator \hat{x} selbst zu nehmen). Dies führt zu mathematischen Komplikationen:

- i) Der Definitionsbereich unbeschränkter Operatoren ist nicht der ganze Hilbertraum. (Ein Operator \hat{A} , der auf ganz \mathcal{H} definiert ist und $\langle \hat{A} \phi | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{A} \psi \rangle$ erfüllt, ist nach dem Satz von Toeplitz beschränkt.) Sind zwei unbeschränkte Operatoren auf einem dichten Unterraum gleich, dann können sie sich trotzdem noch unterscheiden, (d. h. ein einfacher Begriff von "stetiger Fortsetzung" existiert nicht.)
- ii) Einfache algebraische Rechenregeln, wie das Bilden von Summen, Produkten und insbesondere Kommutatoren, gelten nicht automatisch. (In drastischen Beispielen kann etwa die Summe zweier unbeschränkter Operatoren nicht existieren, weil der Durchschnitt ihrer Definitionsbereiche leer ist.)
- iii) Der Begriff der Selbstadjungiertheit wird komplizierter.

Aber der **Spektralsatz** gilt in der gleichen Form wie im beschränkten Fall.

Wir definieren zunächst den Begriff des adjungierten Operators \hat{A}^\dagger eines unbeschränkten Operators \hat{A} . Dazu müssen wir annehmen, daß der Definitionsbereich $D(\hat{A}) \subset \mathcal{H}$ dicht in \mathcal{H} liegt.

Definition 3.11 Sei \hat{A} ein unbeschränkter Operator im Hilbertraum \mathcal{H} mit dichtem Definitionsbereich $D(\hat{A}) \subset \mathcal{H}$. Sei $D(\hat{A}^\dagger)$ die Menge aller $\varphi \in \mathcal{H}$, für die ein $\eta \in \mathcal{H}$ existiert, so daß für alle $\psi \in D(\hat{A})$ gilt:

$$\langle \hat{A} \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | \eta \rangle.$$

Wir definieren den zu \hat{A} adjungierten Operator durch

$$\hat{A}^\dagger \varphi := \eta, \tag{3.64}$$

für alle $\varphi \in D(\hat{A}^\dagger)$. $D(\hat{A}^\dagger)$ heißt Definitionsbereich des adjungierten Operators.

¹²siehe später

Man überzeugt sich leicht davon, daß η durch φ eindeutig bestimmt ist. Damit ist die Definition (3.64) sinnvoll. Wir bemerken, daß $D(\hat{A}^\dagger) \subset \mathcal{H}$ i.a. **nicht** dicht ist.

Definition 3.12 Ein linearer Operator \hat{A} in \mathcal{H} heißt **symmetrisch genau dann**, wenn

$$\langle \hat{A}\varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{A}\psi \rangle, \quad (3.65)$$

für alle $\varphi, \psi \in D(\hat{A})$ gilt.

Wir schreiben im weiteren $\hat{A} \subset \hat{B}$ genau dann, wenn $D(\hat{A}) \subset D(\hat{B})$ und $\hat{A}\varphi = \hat{B}\varphi$ für alle $\varphi \in D(\hat{A})$ gilt. Wir nennen \hat{B} **Erweiterung** (oder **Fortsetzung**) von \hat{A} . Ist $D(\hat{A})$ dicht, dann ist \hat{A}^\dagger definiert und aus (3.65) folgt: \hat{A} ist symmetrisch genau dann, wenn $\hat{A} \subset \hat{A}^\dagger$ gilt.

Definition 3.13 Sei \hat{A} ein linearer Operator in \mathcal{H} mit dichtem Definitionsbereich. \hat{A} heißt **selbstadjungiert genau dann**, wenn

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \quad (3.66)$$

gilt.

Ein Operator \hat{A} ist also selbstadjungiert genau dann, wenn er symmetrisch ist und $D(\hat{A}) = D(\hat{A}^\dagger)$ erfüllt. In der Vorlesung werden im weiteren Spektraleigenschaften von selbstadjungierten, i.a. unbeschränkten Operatoren untersucht. Die Selbstadjungiertheit wird in der Regel nicht bewiesen, es werden aber Hinweise auf die entsprechende mathematische Literatur gegeben.

Wir geben zunächst eine exakte Definition des Ortsoperators.

Beispiel: Wir betrachten den Ortsoperator in einer Dimension: $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$, $\psi \in \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^1, dx)$.

a) Definitionsbereich: Mit ψ muß auch $x\psi$ im L^2 liegen, d.h. $\|x\psi\|^2 < \infty$. Dies liefert:

$$D(\hat{x}) := \left\{ \psi \in \mathcal{H} : \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 |\psi(x)|^2 < \infty \right\}.$$

Bemerkung: $D(\hat{x})$ liegt dicht in L^2 .

b) \hat{x} ist symmetrisch, d.h.: $\langle \hat{x}\varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | \hat{x}\psi \rangle$ $\forall \varphi, \psi \in D(\hat{x})$ ist hier trivial erfüllt, denn

$$\langle \varphi | \hat{x}\psi \rangle = \int dx \varphi^*(x) x \psi(x) = \int dx (x \varphi(x))^* \psi(x) = \langle \hat{x}\varphi | \psi \rangle. \quad (3.67)$$

c) Es bleibt zu zeigen, daß $D(\hat{x}) = D(\hat{x}^\dagger)$ ist: Aber aus (3.67) folgt $\hat{x} = \hat{x}^\dagger$ auf $D(\hat{x}) \subset D(\hat{x}^\dagger)$, also bleibt noch zu beweisen, daß $D(\hat{x}^\dagger) \subset D(\hat{x})$ gilt: Sei $\psi \in D(\hat{x}^\dagger)$. Wir setzen $\psi_1 := \hat{x}^\dagger \psi$. Dann ist

$$\langle \psi | \hat{x}\varphi \rangle = \langle \psi_1 | \varphi \rangle \quad \forall \varphi \in D(\hat{x}),$$

d.h.:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx (x\psi^*(x) - \psi_1^*(x)) \varphi(x) = 0 \quad \forall \varphi \in D(\hat{x}).$$

Offenbar enthält $D(\hat{x})$ alle Testfunktionen. Damit ist $x\psi(x) - \psi_1(x) = 0$ fast überall. Es folgt

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 |\psi(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_1(x)|^2 < \infty$$

und damit $\psi \in D(\hat{x})$.

Analoges gilt natürlich für den Ortsoperator in 3 Dimensionen.

Einer der wichtigsten Begriffe in der elementaren Theorie unbeschränkter Operatoren ist der des **abgeschlossenen Operators**. Ein solcher ist zwar nicht unbedingt stetig, aber er verhält sich gutartig unter Grenzwertbildung. Es zeigt sich, daß man für einen **abgeschlossenen, symmetrischen Operator** eine explizite Vorschrift zur Bestimmung aller seiner selbstadjungierten Fortsetzungen finden kann.

Damit verknüpft ist das Konzept der **wesentlichen Selbstadjungiertheit**. In konkreten Anwendungen kann es schwierig sein, den Definitionsbereich eines selbstadjungierten Operators aufzuschreiben. Es genügt aber, einen sogenannten **wesentlichen Bereich** (oder auch **core**) der Selbstadjungiertheit anzugeben. Damit hat man den Operator bereits eindeutig charakterisiert. Man erhält den selbstadjungierten Operator durch Bildung des Abschlusses.

Wir erläutern diese Begriffe.

Definition 3.14 Sei $\hat{A}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein linearer Operator mit Definitionsbereich $D(\hat{A})$. Der **Graph** $\Gamma(\hat{A})$ von \hat{A} ist die Menge der Paare

$$\Gamma(\hat{A}) := \{(\varphi, \hat{A}\varphi) : \varphi \in D(\hat{A})\} \subset \mathcal{H} \times \mathcal{H}.$$

Ein linearer Operator \hat{A}_1 ist genau dann eine Fortsetzung von \hat{A} , wenn $\Gamma(\hat{A}) \subset \Gamma(\hat{A}_1)$ gilt.

Definition 3.15 Sei $\hat{A}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein linearer Operator.

- i) \hat{A} heißt **abgeschlossen**, falls $\Gamma(\hat{A}) \subset \mathcal{H} \times \mathcal{H}$ ein abgeschlossener Unterraum ist.
- ii) \hat{A} heißt **abschließbar**, falls eine abgeschlossene Fortsetzung von \hat{A} existiert. Die kleinste abgeschlossene Fortsetzung heißt **Abschluß** von \hat{A} und wird mit $\overline{\hat{A}}$ bezeichnet.

Man zeigt leicht: Ist \hat{A} abschließbar, dann gilt

$$\Gamma(\overline{\hat{A}}) = \overline{\Gamma(\hat{A})}. \quad (3.68)$$

Satz 3.9¹³ Sei $\hat{A}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein linearer Operator mit **dichtem** Definitionsbereich $D(\hat{A})$. Dann gilt:

- i) \hat{A}^\dagger ist abgeschlossen.
- ii) \hat{A} ist abschließbar genau dann, wenn $D(\hat{A}^\dagger)$ dicht ist. Dann gilt

$$\overline{\hat{A}} = \hat{A}^{\dagger\dagger}.$$

- iii) Ist \hat{A} abschließbar, dann gilt

$$(\overline{\hat{A}})^\dagger = \hat{A}^\dagger.$$

Wir folgern aus Punkt ii) dieses Satzes: Ein symmetrischer Operator \hat{A} ist immer abschließbar, denn es gilt $D(\hat{A}) \subset D(\hat{A}^\dagger)$, also ist $D(\hat{A}^\dagger)$ dicht in \mathcal{H} . Sein Abschluß ist $\hat{A}^{\dagger\dagger}$. Andererseits folgt aus Punkt i), daß \hat{A}^\dagger eine abgeschlossene Fortsetzung von \hat{A} ist. Damit gilt:

$$\hat{A} \subset \hat{A}^{\dagger\dagger} \subset \hat{A}^\dagger.$$

Ist \hat{A} **symmetrisch und abgeschlossen**, so folgt:

$$\hat{A} = \hat{A}^{\dagger\dagger} \subset \hat{A}^\dagger. \quad (3.69)$$

Ist \hat{A} **selbstadjungiert**, so folgt:

$$\hat{A} = \hat{A}^{\dagger\dagger} = \hat{A}^\dagger. \quad (3.70)$$

¹³[Reed/Simon], Bd. I, Satz VIII.1

Definition 3.16 Ein symmetrischer Operator \hat{A} heißt **wesentlich selbstadjungiert**, wenn sein Abschluß $\overline{\hat{A}}$ selbstadjungiert ist. Ist \hat{A} abgeschlossen, dann heißt eine Untermenge $D \subset D(\hat{A})$ **wesentlicher Bereich** oder **core**, falls gilt:

$$\overline{\hat{A}|_D} = \hat{A}.$$

Nun geben wir ein Kriterium dafür an, daß ein abgeschlossener, symmetrischer Operator selbstadjungierte Fortsetzungen besitzt. Wir definieren dazu:

Definition 3.17 Sei $\hat{A}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein symmetrischer Operator. Wir setzen

$$K_+ := \ker(i - \hat{A}^\dagger), \quad K_- := \ker(i + \hat{A}^\dagger). \quad (3.71)$$

Die Räume K_\pm heißen **Defekt–Unterräume** und ihre Dimensionen

$$n_\pm := \dim K_\pm \quad (3.72)$$

heißen **Defekt–Indizes** des Operators \hat{A} .

Man zeigt leicht, daß für einen abgeschlossenen symmetrischen Operator \hat{A} die folgende Zerlegung in orthogonale Teilräume gilt:

$$D(\hat{A}^\dagger) = D(\hat{A}) \oplus K_+ \oplus K_-. \quad (3.73)$$

Diese Bemerkung spielt eine Schlüsselrolle beim Beweis des folgenden Satzes:

Satz 3.10¹⁴ Sei \hat{A} ein abgeschlossener symmetrischer Operator mit Defekt–Indizes n_+ und n_- . Dann gilt:

- i) \hat{A} ist selbstadjungiert genau dann, wenn $n_+ = 0 = n_-$ gilt.
- ii) \hat{A} besitzt selbstadjungierte Fortsetzungen genau dann, wenn $n_+ = n_-$ gilt. Die Menge der selbstadjungierten Fortsetzungen steht in eindeutiger Beziehung zu den unitären Abbildungen $K_+ \rightarrow K_-$. Ist \hat{U} ein solcher unitärer Operator, dann hat die selbstadjungierte Fortsetzung \hat{A}_U als Definitionsbereich

$$D(\hat{A}_U) = \left\{ \psi_0 + \psi_+ + \hat{U}\psi_+ : \psi_0 \in D(\hat{A}), \quad \psi_+ \in K_+ \right\} \quad (3.74)$$

und ist gegeben durch

$$\hat{A}_U(\psi_0 + \psi_+ + \hat{U}\psi_+) = \hat{A}\psi_0 + i\psi_+ - i\hat{U}\psi_+. \quad (3.75)$$

Bemerkung 3.13

In physikalischen Anwendungen sind die betrachteten linearen Operatoren oft **von unten beschränkt und symmetrisch**. Dann gibt es unter obigen selbstadjungierten Fortsetzungen eine ausgezeichnete, die **Fortsetzung im Sinne von Friedrichs**, siehe [Reed/Simon], Bd. II, Satz X.23.

Nun betrachten wir in einer Reihe von Beispielen den Impulsoperator und dessen Quadrat (unter Weglassung der Koeffizienten $-\hbar$ bzw. \hbar^2 .)

Beispiel: Wir betrachten den Impulsoperator

$$\hat{p} = i \frac{d}{dx} \quad (3.76)$$

auf dem Hilbertraum $L^2([0, 1])$ mit dem Definitionsbereich

$$D(\hat{p}) = \left\{ \psi \in L^2([0, 1]) : \psi \in AC[0, 1]; \psi' \in L^2([0, 1]), \psi(0) = 0 = \psi(1) \right\}, \quad (3.77)$$

¹⁴[Reed/Simon], Bd. II, Folgerung aus Satz X.2

wobei $AC[0, 1]$ den Raum der absolut-stetigen Funktionen¹⁵ auf $[0, 1]$ bezeichnet. Aus **physikalischer Sicht** handelt es sich um die Bewegung eines (1-dimensionalen) Teilchens auf dem Kreis, durch die obigen Randbedingungen werden die Ende des Intervalls $[0, 1]$ "zusammengeklebt".

a) Natürlich ist $D(\hat{p}) \subset L^2([0, 1])$ dicht. Durch partielle Integration sehen wir, unter Verwendung der Randbedingungen, daß \hat{p} **symmetrisch** ist.

b) Wir skizzieren den Beweis, daß \hat{p} **abgeschlossen** ist: Sei ψ_n eine Folge in $D(\hat{p})$, konvergiere $\psi_n \rightarrow \psi$ und konvergiere die entsprechende Folge im Graphen $(\psi_n, \hat{p}\psi_n) \rightarrow (\psi, \phi)$, jeweils im L^2 -Sinne. Wir müssen zeigen, daß $(\psi, \phi) \in \Gamma(\hat{p})$ gilt, d.h. es muß $\psi \in D(\hat{p})$ und $\phi = i\psi'$ folgen.

Betrachte

$$\chi(x) = -i \int_0^x \phi(t) dt.$$

Unter Verwendung der Hölder-Ungleichung sieht man, daß $\phi \in L^1([0, 1])$ gilt. Damit ist χ wohldefiniert und $\chi \in AC[0, 1]$, also $\chi' = -i\phi$ fast überall. Unter Verwendung der Randbedingung in $D(\hat{p})$ und durch nochmalige Anwendung der Hölder-Ungleichung zeigt man

$$|\psi_n(x) - \chi(x)| \leq \|\hat{p}\psi_n - \phi\|.$$

Aber $\|\hat{p}\psi_n - \phi\| \rightarrow 0$, nach Beweisannahme. Also haben wir $|\psi_n(x) - \chi(x)| \rightarrow 0$, gleichmäßig auf $[0, 1]$. Damit konvergiert ψ_n auch im L^2 -Sinne gegen χ , d.h. es gilt $\psi = \chi$. Wir haben also $\psi \in AC[0, 1]$ und $\psi' = -i\phi$ fast überall. Mit ϕ ist auch ψ' aus $L^2([0, 1])$. Außerdem folgt aus $\psi_n(0) = 0 = \psi_n(1)$ natürlich $\psi(0) = 0 = \psi(1)$, also $\psi \in D(\hat{p})$.

c) Wir empfehlen dem Leser die folgende Übung: Man betrachte den Operator

$$\hat{p}_0 = i \frac{d}{dx}, \quad D(\hat{p}_0) = \{\psi \in L^2([0, 1]) : \psi \in C^\infty([0, 1]); \psi(0) = 0 = \psi(1)\}$$

und zeige, daß \hat{p}_0 nicht abgeschlossen, aber abschließbar ist und daß $\overline{\hat{p}_0} = \hat{p}$ gilt.

d) Mit einer Standardtechnik (Approximation der Eins¹⁶) zeigt man, daß der adjungierte Operator gegeben ist durch

$$\hat{p}^\dagger = i \frac{d}{dx}, \quad D(\hat{p}^\dagger) = \{\psi \in L^2([0, 1]) : \psi \in AC[0, 1]; \psi' \in L^2([0, 1])\}, \quad (3.78)$$

d.h. den Elementen aus dem Definitionsbereich von \hat{p}^\dagger sind keine Randbedingungen auferlegt!

Wir berechnen die Defektindizes von \hat{p} : Offenbar gilt

$$K_+ = \ker\{\hat{p}^\dagger - i\} = \{\psi \in L^2([0, 1]) : \psi \in D(\hat{p}^\dagger), \quad i\psi' = i\psi\},$$

Aus $\psi' = \psi$ folgt, daß auch ψ' absolut-stetig sein muß. Iteriert man dieses Argument, so folgt, daß beliebig oft differenzierbare Lösungen obiger Gleichung gesucht werden. Wir finden $\psi(x) = e^x$. Diese Funktion liegt natürlich in $L^2([0, 1])$. Wir haben also $K_+ = \mathbb{C}\{e^x\}$ und damit $n_+ = 1$. Analog findet man $K_- = \mathbb{C}\{e^{-x}\}$ und damit $n_- = 1$. Wir folgern: Der Operator \hat{p} ist nach Punkt i) des obigen Satzes **nicht selbstadjungiert**, aber nach Punkt ii) **besitzt er selbstadjungierte Fortsetzungen**.

d) Wir finden die selbstadjungierten Fortsetzungen von \hat{p} . Seien

$$\psi_+ := \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{e^2 - 1}} e^x, \quad \psi_- := \frac{\sqrt{2}e}{\sqrt{e^2 - 1}} e^{-x}$$

¹⁵ $f \in AC[0, 1]$ genau dann, wenn eine meßbare, integrierbare Funktion g existiert, mit $f(x) - f(0) = \int_0^x g(t) dt$, $x \in [0, 1]$. Dann ist f f.ü. differenzierbar und es gilt $f' = g$ f.ü..

¹⁶ vgl. [Reed/Simon], Bd. 1, Beispiel aus Abschnitt VIII.2

die normierten Vektoren, die K_+ und K_- aufspannen. Da $K_+ \cong \mathbb{C} \cong K_-$, sind die unitären Operatoren $\hat{U} : K_+ \rightarrow K_-$ gegeben durch $\psi_+ \mapsto \gamma\psi_-$, $|\gamma| = 1$. Damit sind, nach obigem Satz, alle selbstadjungierten Fortsetzungen von \hat{p} der Gestalt $\hat{p}_\gamma = i\frac{d}{dx}$ mit Definitionsbereich

$$D(\hat{p}_\gamma) = \{\psi_0 + \lambda(\psi_+ + \gamma\psi_-) : \psi \in D(\hat{p}), \quad \lambda \in \mathbb{C}\}.$$

Wegen der Randbedingungen $\psi_0(0) = 0 = \psi_0(1)$ haben wir:

$$\psi(0) = \frac{\lambda\sqrt{2}(1 + \gamma e)}{\sqrt{e^2 - 1}}, \quad \psi(1) = \frac{\lambda\sqrt{2}(\gamma + e)}{\sqrt{e^2 - 1}},$$

also

$$\psi(1) = \alpha\psi(0), \quad \alpha = \frac{\gamma + e}{1 + \gamma e}, \quad |\alpha| = 1.$$

Man sieht leicht, daß jede Zahl $\alpha \in \mathbb{C}$, $|\alpha| = 1$, in obiger Form geschrieben werden kann. Wir erhalten also **alle selbstadjungierten Fortsetzungen** von \hat{p} durch $\hat{p}_\alpha = i\frac{d}{dx}$, mit Definitionsbereich

$$D(\hat{p}_\alpha) = \{\psi \in L^2([0, 1]) : \psi \in AC[0, 1]; \psi' \in L^2([0, 1]), \psi(1) = \alpha\psi(0)\}, \quad (3.79)$$

wobei α eine beliebige komplexe Zahl auf dem Einheitskreis ist.

Beispiel: Wir betrachten den Impulsoperator

$$\hat{p} = i\frac{d}{dx} \quad (3.80)$$

auf dem Hilbertraum $L^2([0, \infty))$ mit dem Definitionsbereich

$$D(\hat{p}) = \{\psi \in L^2([0, \infty)) : \psi \in AC[0, \infty); \psi' \in L^2([0, \infty)), \psi(0) = 0\}. \quad (3.81)$$

Dieser Operator ist unitär äquivalent zum **Radialimpulsoperator**, den man bei der **Reduktion der 3-dimensionalen Schrödinger-Gleichung mit Zentralpotential** erhält, siehe Kapitel 6.

Man zeigt wieder, daß \hat{p} ein **abgeschlossener, symmetrischer** Operator ist. Eine (zum vorigen Beispiel) analoge Berechnung der Defekträume liefert als Lösungen

$$\psi_\pm(x) = c_\pm e^{\pm x}.$$

Da ψ_+ nicht quadratintegabel ist, erhalten wir

$$n_+ = 0, \quad n_- = 1,$$

d.h. \hat{p} ist maximal symmetrisch auf $D(\hat{p})$ und besitzt **keine selbstadjungierten Fortsetzungen**. Dieser Operator definiert also **keine Observable!**

Beispiel: Schließlich betrachten wir den bereits mehrfach verwendeten Impulsoperator

$$\hat{p} = i\frac{d}{dx} \quad (3.82)$$

auf dem Hilbertraum $L^2(\mathbb{R})$ mit dem Definitionsbereich

$$D(\hat{p}) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) : \psi \in AC(\mathbb{R}); \psi' \in L^2(\mathbb{R})\}. \quad (3.83)$$

Dieser Operator ist offensichtlich symmetrisch und abgeschlossen. Bei der Berechnung der Defekträume erhalten wir die gleichen Lösungen ψ_\pm , aber auf $L^2(\mathbb{R})$ ist keine der beiden Funktionen quadratintegabel. Wir erhalten

$$n_+ = 0, \quad n_- = 0,$$

d.h. \hat{p} ist **selbstadjungiert**. Wir haben also in diesem Falle keine Randbedingungen und damit einen eindeutigen selbstadjungierten Operator.

Analoges gilt natürlich für die Komponenten des Impulsoperators in 3 Dimensionen.

Beispiel: Wir betrachten das Quadrat des Impulsoperators

$$\hat{p}^2 = -\frac{d^2}{dx^2} \quad (3.84)$$

auf dem Hilbertraum $L^2([0, \infty))$ mit dem Definitionsbereich

$$D(\hat{p}^2) = \{\psi \in L^2([0, \infty)) : \psi, \psi' \in AC[0, \infty); \psi', \psi'' \in L^2([0, 1]); \psi(0) = 0 = \psi'(0)\} . \quad (3.85)$$

Man beweist wieder, analog wie oben, daß \hat{p}^2 ein abgeschlossener, symmetrischer Operator ist. Als Definitionsbereich für den adjungierten Operator erhält man:

$$D(\hat{p}^{2\dagger}) = \{\psi \in L^2([0, \infty)) : \psi, \psi' \in AC[0, \infty); \psi', \psi'' \in L^2([0, 1])\} . \quad (3.86)$$

Zur Berechnung der Defekträume ist die Gleichung

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} = \pm i\psi$$

zu lösen. Man findet für K_+ die Lösungen

$$\psi_+^1 = e^{\frac{1}{\sqrt{2}}(-1+i)x}, \quad \psi_+^2 = e^{\frac{1}{\sqrt{2}}(1-i)x}$$

und für K_-

$$\psi_-^1 = e^{\frac{1}{\sqrt{2}}(1+i)x}, \quad \psi_-^2 = e^{\frac{1}{\sqrt{2}}(-1-i)x} .$$

Da nur ψ_+^1 und ψ_-^2 in $L^2([0, \infty))$ liegen, haben wir

$$n_+ = 1, \quad n_- = 1,$$

d.h. \hat{p}^2 besitzt selbstadjungierte Fortsetzungen. Die unitären Abbildungen $K_+ \rightarrow K_-$ sind wieder wie im obigen Beispiel gegeben und eine einfache Auswertung der Randbedingungen liefert die selbstadjungierten Fortsetzungen \hat{p}_a^2 , $a \in \mathbb{R}$, und \hat{p}_∞^2 , definiert durch die folgenden Bereiche:

$$D(\hat{p}_a^2) = \{\psi \in L^2([0, \infty)) : \psi, \psi' \in AC[0, \infty); \psi', \psi'' \in L^2([0, 1]); \psi'(0) + a\psi(0) = 0\} , \quad (3.87)$$

$$D(\hat{p}_\infty^2) = \{\psi \in L^2([0, \infty)) : \psi, \psi' \in AC[0, \infty); \psi', \psi'' \in L^2([0, 1]); \psi(0) = 0\} . \quad (3.88)$$

Der Operator \hat{p}_∞^2 ist identisch mit der oben erwähnten selbstadjungierten Fortsetzung von \hat{p}^2 im Sinne von Friedrichs. Genau dieser Operator wird als **Radialimpulsquadrat** bei der Reduktion der Schrödinger-Gleichung mit Zentralpotential gewählt, siehe Kapitel 6. Diese Wahl wird durch physikalische Erwägungen nahegelegt. Sie entspricht der Vorstellung, daß im Nullpunkt eine unendliche Potentialbarriere vorliegt. Die Operatoren \hat{p}_a^2 erzeugen eine Dynamik, bei der eine einlaufende Welle reflektiert wird und dabei eine Phasenverschiebung erfährt, die vom Impuls und von a abhängig ist¹⁷. Für \hat{p}_∞^2 ist die Phasenverschiebung für alle Impulse gleich -1 .

Zum Abschluß behandeln wir den typischen Schrödinger-Operator

$$\hat{H} = \vec{p}^2 + V,$$

also in der Ortsdarstellung

$$\hat{H} = -\Delta + V. \quad (3.89)$$

¹⁷siehe [Reed/Simon], Bd. II, Beispiel X.2

Wir haben wieder die Koeffizienten $\frac{1}{2m}$ bzw. $\frac{\hbar^2}{2m}$ weggelassen. Man muß sich fragen, für welche Klassen von Potentialen V dieser Operator selbstadjungiert ist. Dazu gibt es eine reiche Literatur. Wir machen hier nur einige ganz elementare, aber für unsere Zwecke wichtige Bemerkungen. Dazu betrachten wir zunächst $-\Delta$ auf dem Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}^3)$. Es sei daran erinnert, daß die Fourier-Transformation

$$\mathcal{F} : L^2(\mathbb{R}^3) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^3)$$

ein unitärer Operator ist. Wir wählen den folgenden **Definitionsbereich**

$$D(-\Delta) := \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}^3) : \mathcal{F}\psi \in D(\hat{k}^2) \right\} \equiv \mathcal{F}^{-1}(D(\hat{k}^2)). \quad (3.90)$$

Man zeigt leicht¹⁸, daß der Multiplikationsoperator \hat{k}^2 auf dem Bereich

$$D(\hat{k}^2) = \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}^3) : \hat{k}^2\psi \in L^2(\mathbb{R}^3) \right\}$$

selbstadjungiert ist. Da \mathcal{F} unitär ist, ist auch

$$-\Delta = \mathcal{F}^{-1} \hat{k}^2 \mathcal{F}$$

selbstadjungiert. Außerdem ist $-\Delta$ wegen $\hat{k}^2 \geq 0$ positiv. Man beweist¹⁹, daß $-\Delta$ auf $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, genauso wie auf dem Schwartzraum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$, **wesentlich selbstadjungiert ist**.

Zur Behandlung von $\hat{H} = -\Delta + V$ kann man nun, in vielen Fällen, die Störungstheorie von Kato verwenden.

Definition 3.18 Seien \hat{A} und \hat{B} lineare Operatoren im Hilbertraum \mathcal{H} mit dichten Definitionsbereichen und gelte:

i) $D(\hat{A}) \subset D(\hat{B})$,

ii) Es existieren reelle Zahlen a und b , so daß

$$\|\hat{B}\psi\| \leq a \|\hat{A}\psi\| + b \|\psi\|, \quad \psi \in D(\hat{A}). \quad (3.91)$$

Dann sagt man \hat{B} sei \hat{A} -beschränkt und nennt die Zahl a relative Schranke von \hat{B} bezüglich \hat{A} .

Es gilt der folgende grundlegende Satz von Kato und Rellich²⁰

Satz 3.11 Seien \hat{A} und \hat{B} lineare Operatoren im Hilbertraum \mathcal{H} mit dichten Definitionsbereichen. Sei \hat{A} selbstadjungiert und sei \hat{B} symmetrisch und \hat{A} -beschränkt, mit $a < 1$. Dann ist $\hat{A} + \hat{B}$ selbstadjungiert auf $D(\hat{A})$ und wesentlich selbstadjungiert auf jedem beliebigen wesentlichen Bereich von \hat{A} . Ist \hat{A} von unten durch die Zahl M beschränkt, so ist $\hat{A} + \hat{B}$ beschränkt durch

$$M - \max \left\{ \frac{b}{1-a}, a|M| + b \right\}.$$

Für physikalische Anwendungen ist die folgende Folgerung aus dem Satz von Kato und Rellich besonders wichtig.

Satz 3.12 Sei $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$, d.h. es existieren Funktionen $V_1 \in L^2(\mathbb{R}^3)$ und $V_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$, mit $V = V_1 + V_2$. Dann ist $\hat{H} = -\Delta + V$ selbstadjungiert auf $D(-\Delta)$ und wesentlich selbstadjungiert auf $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$.

¹⁸siehe [Reed/Simon] Bd. I, Satz VIII.3

¹⁹siehe [Reed/Simon] Bd. II, Satz IX.27

²⁰siehe [Reed/Simon] Bd. II, Satz X.12

Wir liefern eine **Beweisskizze**: Der Multiplikationsoperator V ist auf

$$D(V) = \{\phi \in L^2(\mathbb{R}^3) : V\phi \in L^2(\mathbb{R}^3)\}$$

selbstadjungiert. Offensichtlich gilt $C_0^\infty(\mathbb{R}^3) \subset D(V)$, also ist $D(V)$ dicht. Wir zeigen: V ist $(-\Delta)$ -beschränkt mit relativer $(-\Delta)$ -Schranke 0. Dazu beweist man zunächst die folgende Abschätzung: Für jedes $\epsilon > 0$ existiert ein $\delta > 0$, so daß

$$\|\phi\|_\infty \leq \epsilon \|(-\Delta)\phi\|_2 + \delta \|\phi\|_2,$$

für alle $\phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Dann gilt:

$$\|V_1\phi\|_2^2 = \int d^3x |V_1(x)\phi(x)|^2 \leq \|V_1\|_2^2 (\epsilon \|(-\Delta)\phi\|_2 + \delta \|\phi\|_2)^2$$

und

$$\|V_2\phi\|_2^2 = \int d^3x |V_2(x)\phi(x)|^2 \leq \epsilon \|V_2\|_\infty^2 \|\phi\|_2^2.$$

Damit haben wir

$$\|V\phi\|_2 \leq \|V_1\phi\|_2 + \|V_2\phi\|_2 \leq \epsilon \|V_1\|_2 \|(-\Delta)\phi\|_2 + (\delta \|V_1\|_2 + \|V_2\|_\infty) \|\phi\|_2,$$

d.h. $a = \epsilon \|V_1\|_2$ kann beliebig klein gewählt werden. Damit hat V eine beliebig kleine $(-\Delta)$ -Schranke und alle Voraussetzungen des Satzes von Kato und Rellich sind erfüllt.

Beispiel: Wir betrachten das Coulombpotential $V(r) = -\frac{e^2}{r}$ und zerlegen $V = V_1 + V_2$ wie folgt:

$$V_1(r) = \begin{cases} -\frac{e^2}{r} & r \leq 1 \\ 0 & r > 1 \end{cases}$$

$$V_2(r) = V - V_1.$$

Offensichtlich gilt $V_1 \in L^2(\mathbb{R}^3)$ und $V_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$, damit ist der **Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms** auf $D(-\Delta)$ selbstadjungiert und auf $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ wesentlich selbstadjungiert.

In physikalischen Anwendungen sind Potentiale der Form

$$V_\alpha(r) = -\frac{1}{r^\alpha}, \quad \alpha < 2,$$

interessant. Für $\alpha < \frac{3}{2}$ zeigt man $V_\alpha \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$, für $\frac{3}{2} \leq \alpha < 2$ gilt dies nicht. Um solche Potentiale zu betrachten, führt man die **Rollnik-Klasse** ein. Diese besteht aus allen Potentialen auf \mathbb{R}^3 , für die

$$\|V\|_R^2 := \int \frac{|V(\vec{x})||V(\vec{y})|}{|\vec{x} - \vec{y}|^2} d^3x d^3y \quad (3.92)$$

endlich ist. Der Raum \mathcal{R} aller dieser Potentiale ist vollständig in der Norm $\|\cdot\|_R$. Insbesondere im Rahmen der **Streutheorie** (Kapitel 8) ist diese Klasse von Potentialen wichtig. Man beweist²¹: Gilt $V \in \mathcal{R} + L^\infty(\mathbb{R}^3)$, dann ist V wieder $-\Delta$ -beschränkt. Damit ist $-\Delta + V$ wieder wesentlich selbstadjungiert auf einem beliebigen Bereich der Selbstadjungiertheit von $-\Delta$. Insbesondere zeigt man, daß $V_\alpha \in \mathcal{R} + L^\infty(\mathbb{R}^3)$, für beliebiges $\alpha < 2$.

Diese Klasse von Potentialen enthält die oben betrachtete, d.h. es gilt²²

$$L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3) \subset \mathcal{R} + L^\infty(\mathbb{R}^3).$$

²¹siehe [Reed/Simon], Bd. II, Satz X.19

²²siehe [Simon] Korollar I.2

Schließlich gibt es wichtige physikalische Modelle, für die die Kato-Theorie nicht anwendbar ist. Das Standardbeispiel ist der (an)harmonische Oszillator

$$\hat{H} = -\Delta + \hat{x}^2 + \hat{x}^4.$$

Für solche Situationen hat man andere Techniken. Besonders nützlich ist das Konzept der **analytischen Vektoren**.

Definition 3.19 Sei \hat{A} ein linearer Operator in \mathcal{H} . Ein Vektor $\psi \in \mathcal{H}$ heißt analytischer Vektor für \hat{A} , falls $\psi \in \bigcap_{n=1}^{\infty} D(\hat{A}^n)$ und

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \|\hat{A}^n \psi\| t^n < \infty,$$

für ein $t > 0$, gilt.

Es gilt der folgende Satz von Nelson²³:

Satz 3.13 Ein abgeschlossener, symmetrischer Operator \hat{A} ist selbstadjungiert genau dann, wenn sein Definitionsbereich $D(\hat{A})$ eine dichte Menge analytischer Vektoren enthält.

Damit beweist man die Selbstadjungiertheit für den Hamiltonoperator des (an)harmonischen Oszillators²⁴. Wir werden den harmonischen Oszillator im nächsten Kapitel behandeln.

²³siehe [Reed/Simon], Bd. II, Satz X.39 und Folgerungen

²⁴siehe [Reed/Simon], Bd. II, Absatz X.6, Beispiele 2 und 5

Kapitel 4

Lösung der Schrödinger–Gleichung: Eindimensionale Probleme

Im eindimensionalen Fall gibt es eine ganze Reihe allgemeiner, strenger mathematischer Resultate, für die wir auf [Reed /Simon] Bd. IV und auf [Berezin/Shubin]¹ verweisen. Eine heuristische Diskussion und eine Auflistung wichtiger mathematischer Resultate findet man auch in [Galindo/Pascual], insbesondere im Abschnitt 4.10.

4.1 Stationäre Zustände (in beliebiger Dimension)

Wir betrachten die Schrödinger–Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle. \quad (4.1)$$

Im weiteren wird immer vorausgesetzt, daß der Hamiltonoperator \hat{H} ein selbstadjungierter Operator im Hilbertraum \mathcal{H} des betrachteten Systems ist. Das Standardbeispiel für \hat{H} ist natürlich, im Falle eines Teilchens, $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$, vgl. Kapitel 1. Wir berechnen, unter Verwendung von (4.1):

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \|\psi(t)\|^2 &= \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi(t) | \right) |\psi(t)\rangle + \langle \psi(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \\ &= -\langle \psi(t) | \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle + \langle \psi(t) | \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle = 0, \end{aligned}$$

denn \hat{H} ist selbstadjungiert. D. h., während der zeitlichen Entwicklung bleibt das Normquadrat des Zustandsvektors konstant. Da die Schrödinger–Gleichung **linear** ist, folgern wir, daß ein normerhaltender, linearer Operator $\hat{U}(t, t_0)$ der Zeitentwicklung existiert,

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (4.2)$$

Für die freie Schrödinger–Gleichung haben wir diesen Operator bereits in Abschnitt 2.2.3 berechnet. Wir untersuchen die Eigenschaften dieses Operators. Zunächst gilt offensichtlich:

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \mathbf{1}. \quad (4.3)$$

Setzen wir (4.2) in die Schrödinger–Gleichung ein, so erhalten wir:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0). \quad (4.4)$$

¹F.A Berezin, M.A Shubin: *The Schrödinger Equation*, (1991), Kluwer Ac. Publ.

Man zeigt leicht, daß $\hat{U}(t, t_0)$ unitär ist, (siehe das Kapitel zur Zeitentwicklung). Wir nehmen hier an, daß \hat{H} **nicht** explizit von der Zeit abhängt. Der allgemeine Fall wird später diskutiert. Dann hat die Lösung von (4.4) die Gestalt

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}. \quad (4.5)$$

Um die Verbindung zum früher (für den Fall des freien Teilchens) eingeführten Propagator in der Ortsdarstellung herzustellen, müssen wir die Entwicklung von $|\psi(t)\rangle$ nach den verallgemeinerten Eigenfunktionen des Ortsoperators verwenden:

$$|\psi(t)\rangle = \int d^3x |\vec{x}\rangle \langle \vec{x} | \psi(t)\rangle \equiv \int d^3x |\vec{x}\rangle \psi(\vec{x}, t). \quad (4.6)$$

Dies liefert

$$\psi(\vec{x}, t) = \int d^3x' G(\vec{x}, t; \vec{x}', t') \psi(\vec{x}', t'), \quad (4.7)$$

$$G(\vec{x}, t; \vec{x}', t') = \langle \vec{x} | e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t')\hat{H}} | \vec{x}' \rangle. \quad (4.8)$$

Sei \hat{H} nicht explizit zeitabhängig und sei $|\psi(t_0)\rangle$ ein Eigenzustand von \hat{H} zum Eigenwert E ,

$$\hat{H} |\psi(t_0)\rangle = E |\psi(t_0)\rangle.$$

Dann ist die Zeitentwicklung dieses Zustandes nach (4.5) gegeben durch

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E} |\psi(t_0)\rangle,$$

d. h., nur die Phase von $|\psi(t)\rangle$ ändert sich mit der Zeit. Der Zustand $|\psi(t_0)\rangle$ heißt deshalb **stationär**. Sei nun \hat{A} ein beliebige, zeitabhängige Observable. Dann gilt:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{A}(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | [\hat{A}(t), \hat{H}(t)] | \psi(t) \rangle + i\hbar \langle \psi(t) | \frac{d}{dt} \hat{A}(t) | \psi(t) \rangle.$$

Man stelle sich \hat{A} als Funktion $\hat{A} = \hat{A}(\hat{x}, \hat{p}, \dots, t)$ vor, wobei die explizite Zeitabhängigkeit etwa in Gegenwart eines zeitlich periodischen äußeren Feldes auftritt. Da die Operatoreinträge \hat{x}, \dots nicht explizit von t abhängen, ist die Verwendung der "gewöhnlichen" Ableitung $\frac{d}{dt}$ in diesem Kontext sinnvoll. Manche Autoren verwenden aber an dieser Stelle das Symbol der partiellen Ableitung!

Wenn \hat{H} nicht explizit zeitabhängig ist und $|\psi(t)\rangle$ einen stationären Zustand bezeichnet, so gilt:

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{A}(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | \frac{d}{dt} \hat{A}(t) | \psi(t) \rangle, \quad (4.9)$$

denn

$$\langle \psi(t) | [\hat{A}(t), \hat{H}(t)] | \psi(t) \rangle = \langle \psi | \hat{A} \hat{H} \psi \rangle - \langle \psi | \hat{H} \hat{A} \psi \rangle = E \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle - E \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle = 0.$$

D. h., ist die Observable \hat{A} nicht explizit zeitabhängig, dann ist ihr statistischer Mittelwert in einem stationären Zustand eine Bewegungskonstante.

Allgemeiner nennen wir eine Observable \hat{A} **Bewegungskonstante**, falls gilt:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}(t) + [\hat{A}(t), \hat{H}(t)] = 0. \quad (4.10)$$

Der Leser denke über die offensichtlich vorliegende Analogie zur klassischen Mechanik nach.

4.2 Eigenschaften stationärer Lösungen in einer Dimension

Wir betrachten die Schrödinger-Gleichung in einer Dimension für ein Teilchen der Masse m unter dem Einfluß eines Potentials V . Dann gilt, in der Ortsdarstellung,

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

und für einen stationären Zustand ψ zur Energie E :

$$\Delta\psi(x) + (\varepsilon - U(x))\psi(x) = 0.$$

Dabei bezeichnet $\psi(x)$ die Wellenfunktion in der Ortsdarstellung (zu einem fixierten Zeitpunkt) und

$$\varepsilon = \frac{2m}{\hbar^2}E, \quad U(x) = \frac{2m}{\hbar^2}V(x).$$

Da wir uns in einer Dimension befinden, schreiben wir einfach $\psi'' = (u - \varepsilon)\psi$. Wir diskutieren diese Gleichung:

(i) **Diskrete Energieniveaus sind nicht entartet:**

Sind ψ_1 und ψ_2 Eigenvektoren zum Eigenwert E , dann gilt

$$(\psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2')' = 0$$

und damit

$$W = \psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2' = \text{const}. \quad (4.11)$$

W heißt **Wronski-Determinante**. Da wir diskrete Energieniveaus betrachten, müssen die Eigenfunktionen im L^2 -Sinne normierbar sein. Für $|x| \rightarrow \infty$ muß also $\psi_1, \psi_2 \rightarrow 0$ gelten, d.h.

$$\psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2' = 0.$$

Dies liefert $\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2}$, also: $\psi_2 = c\psi_1$, d.h. ψ_1 und ψ_2 sind linear abhängig.

Daraus folgt sofort: Eigenvektoren zu diskreten Eigenwerten können **reell** gewählt werden: Mit ψ erfüllt auch ψ^* die Schrödinger-Gleichung. Dann folgt aus obiger Bemerkung

$$\psi^* = c\psi$$

und damit

$$\psi = \psi^{**} = (c\psi)^* = c^*\psi^* = |c|^2\psi.$$

Es muß also $|c|^2 = 1$ gelten. Wir setzen $c = e^{2i\varphi}$ und wählen $\tilde{\psi} = e^{i\varphi}\psi$. Dann gilt

$$\tilde{\psi}^* = e^{-i\varphi}\psi^* = e^{2i\varphi}e^{-i\varphi}\psi = \tilde{\psi}.$$

(ii) Ist $V(x) = V(-x)$ ein spiegelsymmetrisches Potential, dann haben die Eigenvektoren zu diskreten Eigenwerten eine definierte **Parität**:

Sei ψ Eigenvektor zum Eigenwert E . Dann ist $\phi(x) := \psi(-x)$ auch Eigenvektor zum Eigenwert E :

$$\begin{aligned} 0 = \psi''(x) + (\varepsilon - U(x))\psi(x) &= \left(-\frac{d}{dx}\right) \left(-\frac{d}{dx}\right) \psi(x) + (\varepsilon - U(x))\psi(x) \\ &= \frac{d}{dx} \frac{d}{dx} \psi(-x) + (\varepsilon - U(-x))\psi(-x) \\ &= \phi''(x) + (\varepsilon - U(x))\phi(x). \end{aligned}$$

Aber mit Punkt (i) gilt wieder: $\psi(-x) = \phi(x) = c\psi(x)$. Falls ψ reell gewählt wurde, folgt daraus, daß auch c reell sein muß. Wegen $c^2 = 1$ folgt $c = \pm 1$, d.h.:

$$\psi(-x) = \begin{cases} \psi(x) \\ -\psi(x) \end{cases} .$$

Wir definieren den Paritätsoperator \hat{P} durch

$$\left(\hat{P}\psi\right)(x) := \psi(-x).$$

Er ist offensichtlich selbstadjungiert und erfüllt $\hat{P}^2 = 1$. Damit sind ± 1 die möglichen Eigenwerte von \hat{P} .

(iii) Das **Spektrum** des Hamiltonoperators:

Wir betrachten \hat{H} in $L^2(\mathbb{R}^1)$ und verweisen, was mathematische Feinheiten betrifft, auf die zu Beginn des Kapitels zitierte Literatur: Sei $U(x)$ stückweise stetig auf \mathbb{R}^1 , (auf einer diskreten Menge kann $U(x)$ endliche Sprünge haben, unendliche Sprünge sind oft als Grenzwerte definierbar!). Wir bezeichnen:²

$$U_0 = \inf U(x) \quad \text{und} \quad U_{\pm} = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} U(x). \quad (4.12)$$

Sei o. B. d. A. $U_- \leq U_+$. Man zeigt: $\hat{H} = -\Delta + U$ ist selbstadjungiert. Sein **Punktspektrum** liegt in $(U_0, U_-]$ und kann leer sein. Das **kontinuierliche** Spektrum liegt rechts von U_- . Im Bereich (U_-, U_+) enthält es **nichtentartete verallgemeinerte** Eigenwerte und im Bereich (U_+, ∞) enthält es **zweifach entartete verallgemeinerte** Eigenwerte.

(iv) Habe U eine Unstetigkeitsstelle im Punkt $x = a$. Integration der Schrödinger-Gleichung von $a - \epsilon$ bis $a + \epsilon$ liefert:

$$\left(\frac{d\psi}{dx}\right)\Big|_{a+\epsilon} - \left(\frac{d\psi}{dx}\right)\Big|_{a-\epsilon} = -\epsilon \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx \psi(x) + \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx U(x)\psi(x).$$

Hat U am Punkt a eine **endliche** Sprungstelle, so verschwindet die rechte Seite beim Grenzübergang $\epsilon \rightarrow 0$, d. h., die erste Ableitung (und damit auch ψ selbst) ist stetig. Dies liefert die Anschlußbedingungen für Lösungen der Schrödinger-Gleichung mit nichtstetigem Potential. Ist der Sprung dagegen unendlich, oder enthält U etwa eine δ -Distribution, so gelten diese Stetigkeitsaussagen nicht mehr. Für $U = c\delta_a$ erhält man einen Sprung $c\psi(a)$ in der ersten Ableitung.

4.3 Der harmonische Oszillator

Der Hamilton-Operator des harmonischen Oszillators hat die Gestalt:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{k}{2}\hat{x}^2. \quad (4.13)$$

Damit ist $U_0 = 0$ und $U_{\pm} = \infty$, d.h., das Spektrum des harmonischen Oszillators ist rein diskret, liegt zwischen 0 und ∞ und die Eigenwerte sind nicht entartet. Das Problem der Selbstadjungiertheit von \hat{H} wird in einer Zusatzbemerkung am Ende des Abschnitts diskutiert. Wir bezeichnen, wie in der klassischen Theorie, $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ und setzen

$$\hat{P} := (m\hbar\omega)^{-\frac{1}{2}}\hat{p}, \quad \hat{X} := \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\hat{x}.$$

² U_{\pm} kann unendlich sein.

Dann gilt

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{P}^2 + \hat{X}^2). \quad (4.14)$$

Außerdem bemerken wir, daß die Heisenbergsche Vertauschungsrelation $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\mathbf{1}$ die Gestalt

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\mathbf{1}$$

annimmt.

Wir wollen nun das Eigenwertproblem für den Hamilton-Operator (4.13) lösen. Anstatt die Schrödinger-Gleichung, etwa in der Ortsdarstellung, zu lösen, verwenden wir die folgende algebraische Methode. Wir definieren

$$\hat{a} := \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}), \quad \hat{a}^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - i\hat{P}), \quad \hat{N} := \hat{a}^\dagger \hat{a}. \quad (4.15)$$

Unter Verwendung der Heisenbergschen Vertauschungsrelationen erhalten wir:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \mathbf{1}, \quad [\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger. \quad (4.16)$$

Mit

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{2}i} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

folgt, unter Verwendung der Vertauschungsrelationen:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right). \quad (4.17)$$

Offenbar ist mit \hat{H} auch \hat{N} ein Operator mit diskrettem Spektrum. Sei $|\mu\rangle$ ein Eigenvektor von \hat{N} zum Eigenwert μ . Dann gilt

$$\mu \langle \mu | \mu \rangle = \langle \mu | \hat{N} \mu \rangle = \langle \mu | \hat{a}^\dagger \hat{a} \mu \rangle = \|\hat{a} \mu\rangle\|^2.$$

Folglich ist $\mu \geq 0$ und es gilt genau dann $\hat{a} \mu\rangle = 0$, wenn $\mu = 0$ ist. Außerdem bemerken wir, daß $\hat{a}^\dagger |\mu\rangle$ ungleich Null ist, denn

$$\|\hat{a}^\dagger |\mu\rangle\|^2 = \langle \mu | \hat{a} \hat{a}^\dagger \mu \rangle = \langle \mu | (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \mathbf{1}) \mu \rangle = (\mu + 1) \|\mu\rangle\|^2 > 0.$$

Wir berechnen

$$\begin{aligned} \hat{N} \hat{a} |\mu\rangle &= (\hat{a} \hat{N} - \hat{a}) |\mu\rangle = (\mu - 1) \hat{a} |\mu\rangle, \\ \hat{N} \hat{a}^\dagger |\mu\rangle &= (\hat{a}^\dagger \hat{N} + \hat{a}^\dagger) |\mu\rangle = (\mu + 1) \hat{a}^\dagger |\mu\rangle, \end{aligned}$$

d. h., \hat{a} **verringert** und \hat{a}^\dagger **vergrößert** den Eigenwert von \hat{N} jeweils um 1. Diese Operatoren heißen deshalb **Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren**.³ Wenn wir mit irgendeinem Eigenwert μ und dem zugehörigen Eigenvektor $|\mu\rangle$ starten, so erhalten wir durch Anwendung dieser Operatoren die folgende Menge von Eigenwerten:

$$\dots, \mu - 2, \mu - 1, \mu, \mu + 1, \mu + 2, \dots$$

Nun sind offenbar 2 Fälle zu betrachten:

i) Sei $\mu = n$ eine ganze Zahl. Dann erhalten wir nach n -facher Anwendung von \hat{a} auf den Eigenvektor $|n\rangle$ den Eigenwert Null. Da $\hat{a} |\mu\rangle = 0$ genau für $\mu = 0$ gilt, erhalten wir durch weitere Anwendung von \hat{a} keine neuen Eigenvektoren.

ii) Angenommen, μ ist keine natürliche Zahl, d. h. es existieren eine natürliche Zahl m und ein x , mit $0 < x < 1$, so daß

$$\mu = m + x$$

³in der Darstellungstheorie von Lie-Algebren heißen sie **Leiteroperatoren**

gilt. Wir bezeichnen den zugehörigen normierbaren Eigenvektor mit $|\psi\rangle$,

$$\hat{N}|\psi\rangle = (m+x)|\psi\rangle.$$

Aus den Vertauschensrelationen (4.16) ergibt sich sofort

$$[\hat{N}, \hat{a}^k] = -k\hat{a}^k, \quad [\hat{N}, \hat{a}^{\dagger k}] = k\hat{a}^{\dagger k}, \quad (4.18)$$

d. h. die k -fache Anwendung von \hat{a} auf $|\psi\rangle$ liefert den Eigenwert $m+x-k$ für \hat{N} . Nun berechnen wir:

$$\|\hat{a}^{k+1}|\psi\rangle\|^2 = \langle \hat{a}^k\psi | (\hat{a}^\dagger \hat{a}) \hat{a}\psi \rangle = (m+x-k)\|\hat{a}^k|\psi\rangle\|^2.$$

Daraus folgern wir, wegen $m+x-k \neq 0$, daß mit $|\psi\rangle$ alle $\hat{a}^k|\psi\rangle$ endliche Norm haben. Von einem gewissen k an sind aber alle Eigenwerte $m+x-k$ negativ. Es gibt also normierbare Zustände mit negativem Eigenwert von \hat{N} . Dies steht im Widerspruch zur eingangs getroffenen Feststellung, daß $\mu \geq 0$ gelten muß.

Wir folgern, daß das gesamte Spektrum nur aus einer Leiter, numeriert durch die natürlichen Zahlen, besteht:

$$\sigma(\hat{N}) = \{0, 1, 2, \dots\}.$$

Wir nennen \hat{N} im weiteren **Teilchenzahl- bzw. Besetzungszahloperator**, denn \hat{N} zählt offenbar die auftretenden Schwingungsquanten. Mit dem Spektrum von \hat{N} kennen wir auch das Spektrum des Hamilton-Operators. Wir erhalten aus (4.17) die folgenden Eigenwerte von \hat{H} :

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (4.19)$$

Wir berechnen die zugehörigen normierten Eigenvektoren. Bezeichne $|0\rangle$ den Eigenvektor zum Eigenwert $\mu = 0$ von \hat{N} . Wir nennen $|0\rangle$ den Grundzustand (wie oben bemerkt, sind die Eigenwerte nicht entartet). Es existiert ein Satz c_i von Konstanten, so daß

$$\begin{aligned} |n\rangle &= c_n (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \\ |n-1\rangle &= c_{n-1} (\hat{a}^\dagger)^{n-1} |0\rangle \\ &\vdots \\ |1\rangle &= c_1 \hat{a}^\dagger |0\rangle \end{aligned}$$

gilt. Mit $\hat{a}^\dagger |n-1\rangle = c_{n-1} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle$ erhalten wir daraus

$$|n\rangle = \frac{c_n}{c_{n-1}} \hat{a}^\dagger |n-1\rangle = c_n (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle ..$$

Fordern wir $\| |n\rangle \| = 1$, so ergibt sich

$$\begin{aligned} 1 = \langle n | n \rangle &= \frac{|c_n|^2}{|c_{n-1}|^2} \langle \hat{a}^\dagger (n-1) | \hat{a}^\dagger (n-1) \rangle \\ &= \frac{|c_n|^2}{|c_{n-1}|^2} \langle n-1 | \hat{a} \hat{a}^\dagger | n-1 \rangle \\ &= \frac{|c_n|^2}{|c_{n-1}|^2} \langle n-1 | (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \mathbf{1}) | n-1 \rangle \\ &= n \frac{|c_n|^2}{|c_{n-1}|^2} \langle n-1 | n-1 \rangle = n \frac{|c_n|^2}{|c_{n-1}|^2}, \end{aligned}$$

also $|c_{n-1}|^2 = n|c_n|^2$. Mit $c_0 = 1$ erhalten wir (bis auf beliebige Phasen)

$$c_n = 1/\sqrt{n!}.$$

Die **normierten Eigenvektoren** haben also die folgende Gestalt:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle. \quad (4.20)$$

Natürlich gilt $\langle m | n \rangle = \delta_{mn}$.

Bemerkung 4.1

(i) Da

$$|n\rangle = \frac{c_n}{c_{n-1}} \hat{a}^\dagger |n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^\dagger |n-1\rangle$$

gilt, folgt

$$\hat{a} |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a} \hat{a}^\dagger |n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \mathbf{1}) |n-1\rangle = \frac{n}{\sqrt{n}} |n-1\rangle.$$

Analog berechnet man die Wirkung von \hat{a}^\dagger und \hat{N} auf die normierten Eigenvektoren. Wir erhalten:

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (4.21)$$

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (4.22)$$

$$\hat{N} |n\rangle = n |n\rangle. \quad (4.23)$$

(ii) Wir berechnen die Eigenfunktionen in der **Ortsdarstellung**: Dazu verwenden wir die (verallgemeinerte) Eigenfunktionenentwicklung für die Eigenvektoren,

$$|n\rangle = \int dx |x\rangle \langle x | n \rangle \equiv \int dx |x\rangle \psi_n(x),$$

wobei $\psi_n(x) = \langle x | n \rangle$ die Ortsdarstellung von $|n\rangle$ bezeichnet. Insbesondere haben wir für den Grundzustand

$$|0\rangle = \int dx |x\rangle \langle x | 0 \rangle = \int dx |x\rangle \psi_0(x).$$

Wenden wir \hat{a} auf diese Gleichung an, so erhalten wir

$$\hat{a} |0\rangle = \int dx \hat{a} |x\rangle \psi_0(x) = 0$$

und damit:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle x | \hat{a} | 0 \rangle = \int dx' \langle x | \hat{a} | x' \rangle \psi_0(x') \\ &= \int dx' \langle x | \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}) \right) | x' \rangle \psi_0(x') \\ &= \int dx' \langle x | x' \rangle \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x' + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx'} \right) \psi_0(x') \\ &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x). \end{aligned}$$

Nach Variablentransformation $x \rightarrow \xi = \alpha x$, mit $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, lautet die zu lösende Differentialgleichung für die Wellenfunktion des Grundzustandes:

$$\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) \psi_0(\xi) = 0.$$

Die normierte Lösung dieser Gleichung hat die Gestalt:

$$\psi_0(\xi) = \alpha^{1/2} \pi^{-1/4} e^{-\xi^2/2}. \quad (4.24)$$

Aus (4.20) erhalten wir durch n -faches Anwenden von \hat{a}^\dagger in der Ortsdarstellung:

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{2^{n/2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n \psi_0(\xi). \quad (4.25)$$

Man zeigt:

a) Es gilt

$$\psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}(\xi)^2}, \quad (4.26)$$

wobei

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

die Hermiteschen Polynome bezeichnen.

b) Die Funktionen ψ_n , $n = 0, 1, 2, \dots$, bilden ein vollständiges Orthonormalsystem im $L^2(\mathbb{R}^1, dx)$ (siehe Übungen). Damit bilden die normierten Eigenvektoren $|n\rangle$, $n = 0, 1, 2, \dots$, ein vollständiges Orthonormalsystem in \mathcal{H} und der Teilchenzahloperator \hat{N} bildet ein vollständiges System kommutierender Observabler.

(iii) Die Hermiteschen Polynome erfüllen die folgende Differentialgleichung:

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi \frac{d}{d\xi} + 2n\right) H_n(\xi) = 0. \quad (4.27)$$

Man überzeugt sich leicht davon, daß der Lösungsansatz der Form

$$\psi(\xi) = H(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

für die Schrödingergleichung genau die Gleichung (4.27) liefert. Dies ist ein anderer Weg, das Eigenwert-Problem zu lösen. (4.27) kann durch Reihenentwicklung explizit gelöst werden.

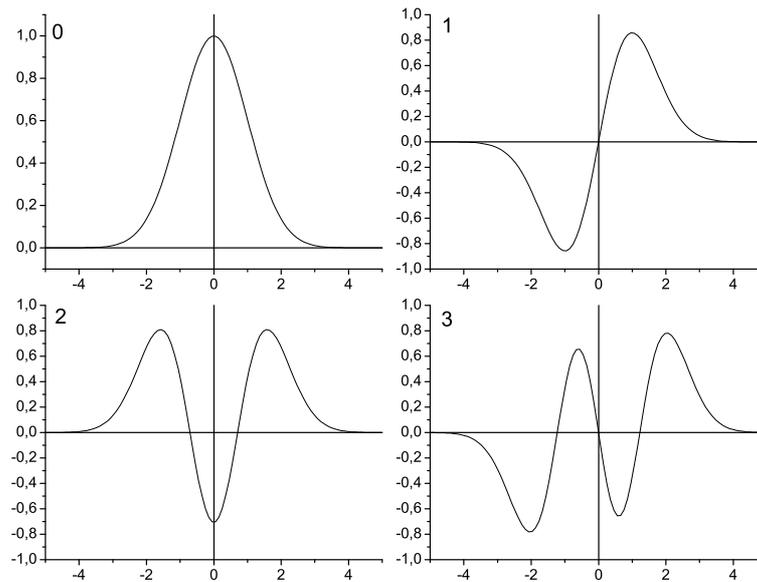
Die Hermiteschen Polynome erfüllen die folgenden nützlichen **Rekursionsformeln**:

$$\begin{aligned} H'_n(\xi) &= 2n H_{n-1}(\xi) \\ \xi H'_n(\xi) &= n H'_{n-1}(\xi) + n H_n(\xi) \\ H_n(\xi) &= 2\xi H_{n-1}(\xi) - 2(n-1) H_{n-2}(\xi). \end{aligned}$$

Wir geben die ersten vier Polynome an:

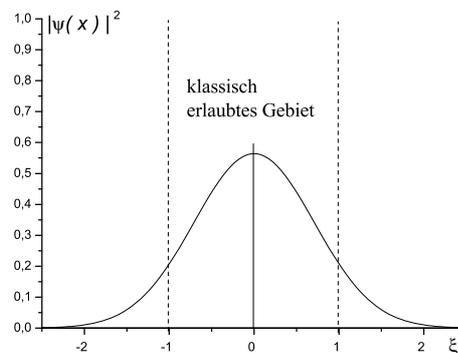
$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, & H_1(\xi) &= 2\xi \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2, & H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi. \end{aligned}$$

Abbildung 4.1 zeigt die damit errechneten Eigenfunktionen. Man sieht, daß ψ_n für gerades n gerade und für ungerades n ungerade ist.

Abbildung 4.1: Die Eigenfunktionen ψ_n für $n = 0, \dots, 3$.

(iv) Vergleichen wir mit dem **klassischen harmonischen Oszillator**, so sind folgende Punkte bemerkenswert:

- Die erlaubten Energiewerte des quantenmechanischen Oszillators sind **diskret**.
- Für den Grundzustand gilt $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} > 0$.
- Die Wahrscheinlichkeit, daß sich der in einem beliebigen Eigenzustand ψ_n befindliche harmonische Oszillator außerhalb des klassisch erlaubten Gebietes befindet, ist verschieden von Null. Für den Grundzustand ist dies in Abb. 4.2 dargestellt.

Abbildung 4.2: Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\varrho_0 = |\psi_0(\xi)|^2$

(v) **Ausblick:** Die hier diskutierte Methode der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ist sowohl für weiterführende Entwicklungen in der Quantentheorie als auch in der reinen Mathematik von fundamentaler Bedeutung.

In der Quantenfeldtheorie liefert eine Entwicklung der Quantenfelder nach Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren die Grundlage der Störungstheorie. Dies hängt zusammen mit dem Konzept der sogenannten "zweiten Quantelung", die im 3. Semester dieses Kurses behandelt wird. Für die

komplexe Klein-Gordon-Gleichung

$$(\square + m^2)\varphi(x) = 0$$

(siehe 2. Semester) liefert dieses Konzept

$$\varphi(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d^3k}{\sqrt{2k^0}} \left(a(k) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - k^0 t)} + a^\dagger(k) e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x} - k^0 t)} \right),$$

mit $k^0 = \sqrt{\vec{k}^2 + m^2}$, siehe etwa Bjorken/Drell: *Relativistic Quantum Field Theory*, §12.1. Man hat das Feld nach Normalschwingungen von eindimensionalen harmonischen Oszillatoren entwickelt.

Aus mathematischer Sicht ist die hier behandelte Methode in der Darstellungstheorie von Lie-Algebren (und Super-Lie-Algebren) von großer Bedeutung.

Zum Abschluß machen wir eine zusätzliche, mathematische

Bemerkung 4.2

Man überzeugt sich leicht davon, daß die Operatoren \hat{a} und \hat{a}^\dagger den Schwartzraum $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ in sich abbilden. Damit ist auch ihr Kommutator auf $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ wohldefiniert. Der Schwartzraum ist also ein natürlicher Definitionsbereich für \hat{H} . Aus obiger Bemerkung, Punkt ii) wissen wir, daß die Eigenvektoren ψ_n , $n = 0, 1, 2, \dots$, die offenbar in $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ liegen, ein vollständiges Orthonormalsystem in $L^2(\mathbb{R}^1, dx)$ bilden. Es gilt

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \|\hat{H}^k \psi_n\| t^k = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \lambda_n^k \|\psi_n\| t^k = \exp(\lambda_n t) < \infty,$$

für jedes endliche $t > 0$. (Dabei bezeichnet $\lambda_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ den Eigenwert zum Eigenvektor ψ_n .) Damit bildet die lineare Hülle der Eigenvektoren ψ_n eine dichte Untermenge analytischer Vektoren in $\mathcal{S}(\mathbb{R})$. Der Operator \hat{H} ist also nach dem Satz von Nelson⁴ auf $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ wesentlich selbstadjungiert.

4.4 Der Potentialtopf. Gebundene Zustände

Der Potentialtopf ist ein Modell für kurzreichweitige, anziehende Kräfte. Damit kann man z.B. die Wechselwirkung von Störstellen mit Elektronen in Festkörpern beschreiben.

4.4.1 Der Potentialtopf mit endlich hohen Wänden

Der Potentialtopf wird beschrieben durch das Potential

$$U(x) = \begin{cases} +U_0 < 0 & \text{für } |x| < L \\ 0 & \text{für } |x| \geq L, \end{cases}$$

siehe Abb. 4.3.

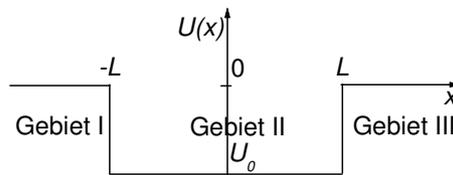


Abbildung 4.3: Der Potentialtopf

⁴siehe Abschnitt 3.6

Damit gilt $u_0 = \inf(U) = U_0$ und $u_{\pm} = 0$, d.h., die gebundenen Zustände werden durch das Punktspektrum $\sigma_{\text{disc}}(\hat{H}) \subset (u_0, 0]$ beschrieben und dem (zweifach entarteten) kontinuierlichen Spektrum $\sigma_{\text{ess}}(\hat{H}) = (0, \infty)$ entsprechen die Streuzustände.

Wir betrachten zunächst die **gebundenen Zustände**, d. h. es sei

$$U_0 < \varepsilon < 0.$$

Da $U(x) = U(-x)$ gilt, sind die Eigenzustände entweder symmetrisch oder antisymmetrisch. Die Gebiete I und III, definiert durch $x < -L$ bzw. $x > L$ sind klassisch verboten, da dort $\varepsilon < U = 0$ gilt. Die Schrödinger-Gleichung hat in diesen Gebieten die Form

$$\psi'' + \varepsilon\psi = 0.$$

Das Gebiet II, definiert durch $-L < x < L$ ist dagegen wegen $U_0 < \varepsilon$ klassisch erlaubt. Dort haben wir

$$\psi'' + (\varepsilon - U_0)\psi = 0,$$

mit $\varepsilon - U_0 > 0$. Damit ψ quadratintegabel ist, muß

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0$$

erfüllt sein. Außerdem kann man ψ reell wählen. Dies liefert den folgenden Ansatz für die Lösung der Schrödinger-Gleichung:

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{\beta x} & \text{für } x < -L & \text{Gebiet I} \\ A_2 (e^{i\alpha x} \pm e^{-i\alpha x}) & \text{für } -L < x < L & \text{Gebiet II} \\ \pm A_1 e^{-\beta x} & \text{für } x > L & \text{Gebiet III,} \end{cases}$$

wobei $\alpha \equiv (\varepsilon - U_0)^{1/2}$ und $\beta \equiv |\varepsilon|^{1/2}$ gilt, und das Vorzeichen im Gebiet III aus den Paritätseigenschaften der Wellenfunktion, $\psi(x) = \pm\psi(-x)$, bestimmt wird. Wir bemerken, daß $\alpha \equiv (\varepsilon - U_0)^{1/2} = 0$, d.h. $\varepsilon = U_0$, und damit $\beta = 0$ **ausgeschlossen** ist, denn $\psi = \text{const}$ wäre dann nicht quadratintegabel. Also gehört U_0 nicht zum Punktspektrum.

Im Sinne der Diskussion aus Abschnitt 4.2 fordern wir die Stetigkeit von ψ und ψ' an den Sprungstellen $x = \pm L$ des Potentials. Im Punkt $x = -L$ muß gelten:

$$\begin{aligned} A_1 e^{-\beta L} &= A_2 (e^{-i\alpha L} \pm e^{i\alpha L}), \\ \beta A_1 e^{-\beta L} &= i\alpha A_2 (e^{-i\alpha L} \mp e^{i\alpha L}). \end{aligned}$$

Aus der Symmetrie des Problems folgt, daß dann ψ auch für $x = +L$ stetig ist. Durch Division der beiden Gleichungen erhalten wir transzendente Gleichungen für die Eigenwerte,

$$\begin{aligned} \beta &= \alpha \tan \alpha L & \text{für positive Parität} \\ -\beta &= \alpha \cot \alpha L & \text{für negative Parität,} \end{aligned} \quad (4.28)$$

und die **normierten Eigenfunktionen** haben die folgende Gestalt:

$$\psi(x) = \begin{cases} N_+ \cos \alpha L \cdot e^{\beta(x+L)} & \text{für } x < -L \\ N_+ \cos \alpha x & \text{für } -L < x < L \\ N_+ \cos \alpha L \cdot e^{-\beta(x-L)} & \text{für } x > L, \end{cases}$$

(für positive Parität) und

$$\psi(x) = \begin{cases} -N_- \sin \alpha L \cdot e^{\beta(x+L)} & \text{für } x < -L \\ N_- \sin \alpha x & \text{für } -L < x < L \\ N_- \sin \alpha L \cdot e^{-\beta(x-L)} & \text{für } x > L, \end{cases}$$

(für negative Parität). Dabei ist

$$N_+ = N_- = \sqrt{\frac{\beta}{1 + \beta L}}.$$

Die Gleichungen (4.28) lassen sich natürlich nicht exakt lösen. Eine graphische Darstellung, vgl. Abb. 4.4, veranschaulicht aber die Lösungsmenge sehr gut. Dabei ist eine andere, zu (4.28) äquivalente Form der Gleichungen nützlich:

$$\begin{aligned} \cos \alpha L &= \pm \frac{\alpha}{\sqrt{|U_0|}}, & \tan \alpha L > 0 & \text{ für positive Parität} \\ \sin \alpha L &= \pm \frac{\alpha}{\sqrt{|U_0|}}, & \cot \alpha L < 0 & \text{ für negative Parität} \end{aligned}$$

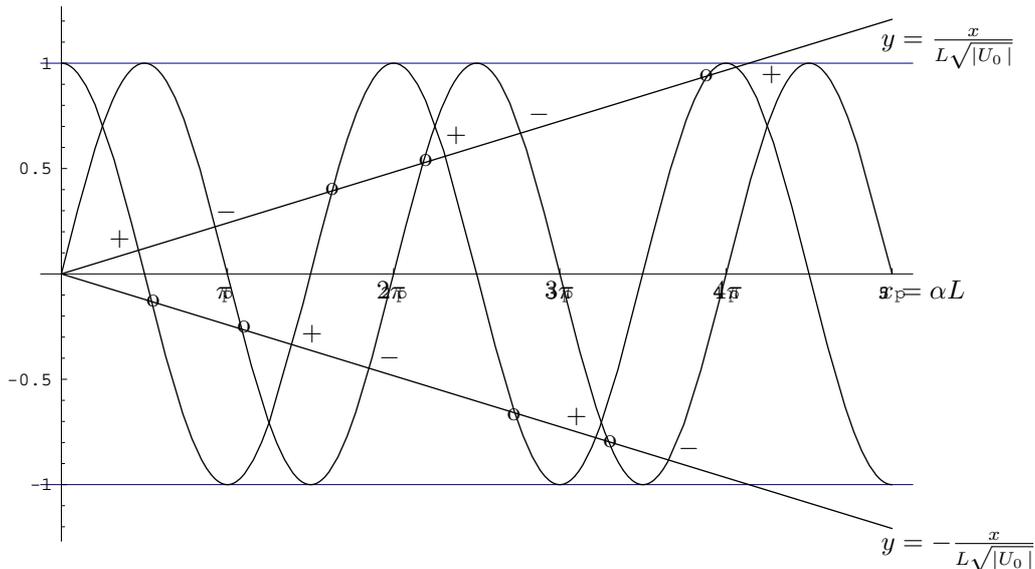


Abbildung 4.4: Graphische Lösung. Das + steht für Lösungen mit positiver und das – für Lösungen mit negativer Parität. Die mit o bezeichneten Schnittpunkte repräsentieren keine Lösungen, da an diesen Stellen die Nebenbedingung $\tan x > 0$ (für positive Parität) bzw. $\cot x < 0$ (für negative Parität) nicht erfüllt ist.

Bemerkung 4.3

- (i) Es existiert immer ein gebundener Zustand (mit positiver Parität).
- (ii) Energieniveaus mit positiver und negativer Parität wechseln sich ab.
- (iii) Wir schätzen die Anzahl der gebundenen Zustände für eine gegebene Zahl $L \cdot |U_0|^{1/2}$ ab: In jedem Intervall

$$(k-1)\frac{\pi}{2} \leq x \leq k\frac{\pi}{2},$$

mit $k = 1, \dots$, gibt es **einen** relevanten Schnittpunkt. Damit gibt es zumindest dann einen Schnittpunkt, wenn am Ende des Intervalls noch

$$\frac{x}{L\sqrt{|U_0|}} < 1$$

gilt, also zumindest für alle n mit $n\frac{\pi}{2} < L\sqrt{|U_0|}$. Da $n \in \mathbb{N}$, entspricht n also $n-1$ Schnittpunkten, d.h.:

$$n < 1 + \frac{2}{\pi} L\sqrt{|U_0|}.$$

4.4.2 Der Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden

Unter Verwendung der bisherigen Resultate diskutieren wir jetzt den Fall $U_0 = 0$ und

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } |x| < L \\ \infty & \text{für } |x| \geq L. \end{cases}$$

(unendlich hohe Wände). Dann gilt $u_0 = 0$ und $u_{\pm} = \infty$, d.h., $\sigma_{\text{disc}}(\hat{H}) = (0, \infty)$ und $\sigma_{\text{ess}}(\hat{H}) = \emptyset$. Diesen Fall erhält man aus dem vorhergehenden Fall durch die Transformation $\varepsilon \rightarrow \varepsilon + U_0$ und $U_0 \rightarrow \infty$. Dann ist $\alpha = \sqrt{\varepsilon}$ und $\beta = \sqrt{\varepsilon + U_0}$. Die Gleichungen (4.28) nehmen mit $\beta \rightarrow \infty$ die folgende Gestalt an:

$$\begin{aligned} \text{für positive Paritäten:} \quad \tan \alpha L = \infty & \rightarrow \alpha L = (2n + 1) \frac{\pi}{2} \\ \text{für negative Paritäten:} \quad \tan \alpha L = 0 & \rightarrow \alpha L = 2n \frac{\pi}{2}, \end{aligned}$$

wobei $n = 0, 1, \dots$. Damit ergeben sich die Energieeigenwerte zu

$$\varepsilon_n = \left(\frac{\pi}{2L} \right)^2 (n + 1)^2, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (4.29)$$

und die normierten Eigenfunktionen haben die Gestalt

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{L}} \sin \left((n + 1) \frac{\pi}{2} \frac{x + L}{L} \right) & \text{für } |x| < L \\ 0 & \text{für } |x| \geq L. \end{cases}$$

Bemerkung 4.4

(i) Es gilt $\psi_n(x)|_{x=\pm L} = 0$, aber die Ableitung $\psi_n(x)'|_{x=\pm L}$ verschwindet **nicht**. Dies ist die typische Randbedingung für undurchdringliche (unendlich hohe) Potentialwände. Wir haben obige Lösung durch den Grenzübergang $\beta \rightarrow \infty$ gefunden. Das gleiche Resultat erhält man durch direktes Lösen der freien Schrödinger-Gleichung innerhalb des Kastens. Dazu betrachtet man $-\frac{d^2}{dx^2}$ auf $C^\infty(-L, +L)$ und sucht nach selbstadjungierten Fortsetzungen. Die Randbedingungen $\psi(x)|_{x=\pm L} = 0$ entsprechen der selbstadjungierten Fortsetzung im Sinne von Friedrichs, vgl. Abschnitt 3.6.

(ii) Die Grundzustandsenergie ist

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mL^2}, \quad (4.30)$$

also **ungleich Null**. Dies ist konsistent mit der Unschärferelation: Es gilt $\Delta x \leq L$, also $\Delta p \geq \hbar/L$ und damit $E \geq \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2}{L^2}$.

4.5 Streuung und Streuzustände

Wir nehmen an, ein Teilchen werde an einem Potential U (das im Unendlichen konstant wird) gestreut. Es seien U_+ und U_- **endlich** und es gelte $u_- \leq u_+$. Für $x \rightarrow \pm\infty$ ist das Teilchen dann frei.

Wir betrachten zunächst den Fall $\varepsilon > u_+$:

Für $\varepsilon > u_+$ ist $\varepsilon \in \sigma_c(\hat{H})$ und **zweifach entartet**, d.h. die Schrödinger-Gleichung

$$\psi'' + (\varepsilon - U)\psi = 0$$

hat zwei linear unabhängige Lösungen:

$$\psi^{(-)}(x) \sim \begin{cases} e^{ik_-x} + \varrho_-(E) e^{-ik_-x} & \text{für } x \rightarrow -\infty \\ \sigma_-(E) e^{ik_+x} & \text{für } x \rightarrow +\infty \end{cases}$$

für eine “von links einlaufende” Welle und

$$\psi^{(+)}(x) \sim \begin{cases} e^{-ik_+x} + \varrho_+(E) e^{ik_+x} & \text{für } x \rightarrow +\infty \\ \sigma_+(E) e^{-ik_-x} & \text{für } x \rightarrow -\infty \end{cases}$$

für eine “von rechts einlaufende” Welle. Dabei ist $k_{\pm} \equiv +\sqrt{\varepsilon - u_{\pm}}$.

Interpretation am Beispiel von $\psi^{(-)}$: Das Teilchen kommt von links, also von $-\infty$, beschrieben durch die Wellenfunktion e^{ik_-x} . Die Wechselwirkung mit dem Potential produziert eine reflektierte Welle $\sim \varrho_-(E) e^{-ik_-x}$ und eine durchlaufende Welle $\sim \sigma_-(E) e^{ik_+x}$.

Wir verwenden nun die Konstanz der Wronski-Determinante $W(\psi_1, \psi_2) = \psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1'$. Dies liefert:

$$\frac{i}{2}W(\psi^{(-)}, \psi^{(-)*}) = k_- (1 - |\varrho_-|^2) = k_+ |\sigma_-|^2 = \text{const} \quad (4.31)$$

$$\frac{i}{2}W(\psi^{(+)}, \psi^{(+)*}) = -k_- |\sigma_+|^2 = -k_+ (1 - |\varrho_+|^2) = \text{const} \quad (4.32)$$

$$\frac{i}{2}W(\psi^{(-)}, \psi^{(+)*}) = k_- \sigma_+ = k_+ \sigma_- = \text{const} \quad (4.33)$$

$$\frac{i}{2}W(\psi^{(-)}, \psi^{(+)*}) = -k_- \varrho_- \sigma_+^* = k_+ \varrho_+^* \sigma_- = \text{const} \quad (4.34)$$

Die Interpretation dieser Identitäten: Da der Wahrscheinlichkeitsfluß durch

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \nabla \psi^* \psi)$$

gegeben ist, folgt:

$$\frac{i}{2}W(\psi^{(\mp)}, \psi^{(\mp)*}) = \frac{i}{2} (\psi^{(\mp)} \psi^{(\mp)*'} - \psi^{(\mp)*} \psi^{(\mp)'}) = \frac{m}{\hbar} j^{(\mp)},$$

d.h., die Gleichungen (4.31) und (4.32) sind **Flußerhaltungsgleichungen**. Es gilt:

Einlaufender Fluß – reflektierter Fluß = durchlaufender Fluß.

Definition 4.1 Der Transmissionskoeffizient ist definiert durch

$$T_{\mp}(E) := \frac{\text{durchlaufender Fluß}}{\text{einlaufender Fluß}}. \quad (4.35)$$

Wir erhalten

$$T_{\mp}(E) = \frac{k_{\pm}}{k_{\mp}} |\sigma_{\mp}|^2$$

und aus Gleichung (4.33) folgern wir

$$T_+(E) = T_-(E) \equiv T(E).$$

Definition 4.2 Der Reflexionskoeffizient ist definiert durch

$$R_{\mp}(E) := \frac{\text{reflektierter Fluß}}{\text{einlaufender Fluß}}. \quad (4.36)$$

Wir erhalten

$$R_{\mp}(E) = |\varrho_{\mp}|^2$$

und aus den Gleichungen (4.33) und (4.34) lesen wir ab:

$$R_+(E) = R_-(E) \equiv R(E) = 1 - T(E),$$

d.h. mit (4.31) folgt die Flußerhaltung.

Wir betrachten den Spezialfall $u_+ = u_-$, d.h. $k_- = k_+ = k$. Dann folgt aus den Gleichungen (4.31)–(4.34):

$$\sigma_+ = \sigma_- \equiv \sigma, \quad |\sigma|^2 + |\varrho_{\pm}|^2 = 1, \quad \varrho_- \sigma^* + \varrho_+^* \sigma = 0. \quad (4.37)$$

Wir bezeichnen mit $|\pm k \text{ in}\rangle \equiv e^{\pm ikx}$ den Zustand vor der Streuung und mit $|\pm k \text{ out}\rangle$ den Zustand nach der Streuung. Dann liefern die Gleichungen für $\psi^{(-)}$ und $\psi^{(+)}$:

$$\begin{aligned} | + k \text{ out}\rangle &= \varrho_- | - k \text{ in}\rangle + \sigma | + k \text{ in}\rangle \\ | - k \text{ out}\rangle &= \sigma | - k \text{ in}\rangle + \varrho_+ | + k \text{ in}\rangle, \end{aligned}$$

also

$$(| + k \text{ out}\rangle, | - k \text{ out}\rangle) = (| + k \text{ in}\rangle, | - k \text{ in}\rangle) \cdot S, \quad (4.38)$$

wobei

$$S := \begin{pmatrix} \sigma & \varrho_+ \\ \varrho_- & \sigma \end{pmatrix} \quad (4.39)$$

die **Streumatrix** bezeichnet. Wir bemerken, daß die Streumatrix S wegen (4.37) **unitär** ist:

$$S^\dagger S = \begin{pmatrix} \sigma^* & \varrho_-^* \\ \varrho_+^* & \sigma^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma & \varrho_+ \\ \varrho_- & \sigma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\sigma|^2 + |\varrho_-|^2 & \sigma^* \varrho_+ + \varrho_-^* \sigma \\ \varrho_+^* \sigma + \sigma^* \varrho_- & |\varrho_+|^2 + |\sigma|^2 \end{pmatrix} = \mathbf{1}.$$

Damit gilt für die Eigenwerte λ_1, λ_2 von S

$$|\lambda_1|^2 = |\lambda_2|^2 = 1.$$

Wir bezeichnen

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \exp(2i\delta_0) \\ \lambda_2 &= \exp(2i\delta_1). \end{aligned}$$

Die Größen δ_0 und δ_1 heißen **Streuphasen**. Sie beschreiben die **Phasenverschiebung** der auslaufenden, am Potential gestreuten Welle, im Vergleich zur auslaufenden nicht gestreuten Welle.

Sei nun $V(x) = V(-x)$ ein symmetrisches Potential. Dann gilt offensichtlich

$$\varrho_+ = \varrho_- \equiv \varrho.$$

Wir berechnen λ_1 und λ_2 :

$$\det \begin{pmatrix} \sigma - \lambda & \varrho \\ \varrho & \sigma - \lambda \end{pmatrix} = (\sigma - \lambda)^2 - \varrho^2 = \lambda^2 - 2\sigma\lambda + \sigma^2 - \varrho^2 = 0 \quad \rightarrow \quad \lambda_{1,2} = \sigma \pm \sqrt{\varrho^2}.$$

Wir erhalten also $\lambda_1 = \sigma + \varrho$ und $\lambda_2 = \sigma - \varrho$. Dies liefert

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2) = \frac{1}{2}e^{i(\delta_0 + \delta_1)} \left(e^{i(\delta_0 - \delta_1)} + e^{-i(\delta_0 - \delta_1)} \right) \\ \varrho &= \frac{1}{2}(\lambda_1 - \lambda_2) = \frac{1}{2i}e^{i(\delta_0 + \delta_1 + \frac{\pi}{2})} \left(e^{i(\delta_0 - \delta_1)} + e^{-i(\delta_0 - \delta_1)} \right), \end{aligned}$$

also

$$\sigma = \cos(\delta_0 - \delta_1) e^{i(\delta_0 + \delta_1)} \quad (4.40)$$

$$\varrho = \sin(\delta_0 - \delta_1) e^{i(\delta_0 + \delta_1 + \frac{\pi}{2})}. \quad (4.41)$$

Es ist noch der Fall $u_- < \varepsilon < u_+$ zu diskutieren:

Für $u_- < \varepsilon < u_+$ ist $\varepsilon \in \sigma_c(\hat{H})$ und **nicht entartet**. Wir haben also nur eine von links einlaufende Welle:

$$\psi^{(-)}(x) \sim \begin{cases} e^{ik_-x} + \varrho_-(E) e^{-ik_-x} & \text{für } x \rightarrow -\infty \\ \sigma_-(E) e^{-k_+x} & \text{für } x \rightarrow +\infty. \end{cases}$$

Die Wronski-Determinante liefert:

$$W(\psi^{(-)}, \psi^{(-)*}) = k_-(1 - |\varrho_-|^2) = k_+ \cdot 0 = 0,$$

d.h. es gilt $|\varrho_-|^2 = 1$. Wir haben also in diesem Falle **totale Reflexion**.

Bemerkung 4.5

Die durchlaufende Welle (und auch die reflektierte Welle) erfahren ein **Zeitverzögerung** aufgrund der Wechselwirkung mit dem Potential. Wir zeigen dies der Einfachheit halber für den Fall $U_+ = U_- = U$. Wir betrachten ein von **links einlaufendes Wellenpaket**,

$$\psi_{\text{ein}}(x, t) = \int dk f(k) \exp \left[i \left(kx - \frac{Et}{\hbar} \right) \right],$$

wobei $f(k)$ ein reelles Profil, konzentriert um k_0 , beschreiben soll und $k = \sqrt{\varepsilon - u_-}$ ist. Das **durchlaufende Wellenpaket** ist dann gegeben durch

$$\psi_{\text{durch}}(x, t) = \int dk f(k) \sigma(E) \exp \left[i \left(kx - \frac{Et}{\hbar} \right) \right] \quad (4.42)$$

und das **reflektierte Wellenpaket** hat die Form

$$\psi_{\text{refl.}}(x, t) = \int dk f(k) \varrho_-(E) \exp \left[i \left(-kx - \frac{Et}{\hbar} \right) \right]. \quad (4.43)$$

Wir zerlegen

$$\sigma(E) = |\sigma(E)| e^{2i\delta_-(E)}. \quad (4.44)$$

Wir vergleichen die Bewegung der Zentren des einlaufenden und des durchlaufenden Wellenpaketes:

a) Für die Bewegung des Zentrums x_{ein} des einlaufenden Wellenpaketes haben wir nach Abschnitt 1.6

$$x_{\text{ein}} = vt = \frac{\hbar}{m} kt,$$

wobei v die Gruppengeschwindigkeit bezeichnet. Es gilt

$$E = \frac{m}{2} v^2 + V = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + V.$$

b) Mit (4.44) hat die Phase der durchlaufende Welle (4.42) die Form:

$$\varphi(k, x, t) = kx - \frac{Et}{\hbar} + 2\delta_-(E).$$

Man findet das Zentrum des Wellenpaketes mit der Methode der stationären Phase: Die Werte (x, t) , für die sich φ im effektiven Integrationsgebiet $|k - k_0| \leq \Delta k/2$ schnell verändert, liefern einen geringen Beitrag zum Integral (schnelle Oszillationen liquidieren sich gegenseitig). Andererseits existiert für jedes t ein Punkt $x = x_0$ (Zentrum des Paketes), bestimmt durch die Bedingung, daß $\varphi(k, x, t)$ für $k = k_0$ stationär ist:

$$0 = \frac{d\varphi}{dk} \Big|_{k=k_0} = x_0 - vt + 2 \frac{d}{dk} \Big|_{k=k_0} \delta_-(E). \quad (4.45)$$

Wegen $E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 + V$ gilt $\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2}{m}k = \hbar v$ und damit

$$\begin{aligned} x_0 &= vt - 2\hbar v \left. \frac{d}{dE} \right|_{E=E_0} \delta_-(E) \\ &= v \left(t - 2\hbar \left. \frac{d}{dE} \right|_{E=E_0} \delta_-(E) \right), \end{aligned}$$

d.h., die **Zeitverschiebung** ist gegeben durch die sogenannte **Eisenbud–Wigner–Relation**

$$\tau_{\text{durch}}(E_0) = 2\hbar \left. \frac{d}{dE} \right|_{E=E_0} \delta_-(E). \quad (4.46)$$

Beispiel: Streuung am Potentialtopf

Wir haben $U_- = U_+ = 0$, d.h., für $\varepsilon > 0$ liegt zweifache Entartung vor. Wir betrachten nur eine von links einlaufende Welle, (eine von rechts einlaufende Welle wird völlig analog behandelt):

$$\psi^{(-)}(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \varrho e^{-ikx} & \text{für } -\infty < x \leq -L \\ A e^{ik'x} + B e^{-ik'x} & \text{für } -L \leq x \leq L \\ \sigma e^{ikx} & \text{für } L \leq x < +\infty, \end{cases}$$

mit $k = \sqrt{\varepsilon}$ und $k' \equiv \sqrt{\varepsilon - u_0}$, $u_0 < 0$. Die Forderung der Stetigkeit der Lösung und ihrer ersten Ableitung liefert nach einer völlig analogen Rechnung wie im Falle gebundener Zustände:

$$\begin{aligned} \sigma &= e^{-2i\alpha} \frac{2\alpha\beta}{2\alpha\beta \cos 2\beta - i(\alpha^2 + \beta^2) \sin 2\beta} \\ \varrho &= e^{-2i\alpha} \frac{i(\beta^2 - \alpha^2) \sin 2\beta}{2\alpha\beta \cos 2\beta - i(\alpha^2 + \beta^2) \sin 2\beta} \\ A &= \frac{\beta + \alpha}{2\beta} e^{i(\alpha - \beta)} \cdot \sigma \\ B &= \frac{\beta - \alpha}{2\beta} e^{i(\alpha + \beta)} \cdot \sigma, \end{aligned}$$

wobei $\alpha \equiv kL$ und $\beta \equiv k'L$ sind. Wir zeigen dies. Die Anschlußbedingungen sind

$$e^{-ikL} + \varrho e^{ikL} = A e^{-ik'L} + B e^{ik'L} \quad (4.47)$$

$$A e^{ik'L} + B e^{-ik'L} = \sigma e^{ikL} \quad (4.48)$$

$$k e^{-ikL} - k\varrho e^{ikL} = k' A e^{-ik'L} - k' B e^{ik'L} \quad (4.49)$$

$$k' A e^{ik'L} - k' B e^{-ik'L} = k\sigma e^{ikL} \quad (4.50)$$

Wir bilden zunächst $k' \cdot (4.48) + (4.50)$ und $k' \cdot (4.48) - (4.50)$:

$$2k' A e^{ik'L} = (k + k')\sigma e^{ikL}, \quad 2k' B e^{-ik'L} = (k' - k)\sigma e^{ikL}.$$

Daraus ergibt sich

$$A = \frac{\beta + \alpha}{2\beta} e^{i(\alpha - \beta)} \sigma, \quad B = \frac{\beta - \alpha}{2\beta} e^{i(\alpha + \beta)} \sigma.$$

Nun bilden wir $k \cdot (4.47) + (4.49)$ und $k \cdot (4.47) - (4.49)$:

$$2k e^{-ikL} = (k + k') A e^{-ik'L} + (k - k') B e^{ik'L}, \quad 2k\varrho e^{ikL} = (k - k') A e^{-ik'L} + (k + k') B e^{ik'L}.$$

Aus der ersten Gleichung ergibt sich durch Einsetzen von A und B

$$1 = \frac{\alpha + \beta}{2\alpha} e^{-i(\beta - \alpha)} \frac{\alpha + \beta}{2\beta} e^{i(\alpha - \beta)} \sigma + \frac{\alpha - \beta}{2\alpha} e^{i(\alpha + \beta)} \frac{\beta - \alpha}{2\beta} e^{i(\alpha + \beta)} \sigma,$$

also

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{4\alpha\beta e^{-2i\alpha}}{(\alpha + \beta)^2 e^{-2i\beta} - (\alpha - \beta)^2 e^{2i\beta}} \\ &= \frac{4\alpha\beta e^{-2i\alpha}}{2i(\alpha^2 + \beta^2) \frac{e^{-2i\beta} - e^{2i\beta}}{2i} + 4\alpha\beta \frac{e^{-2i\beta} + e^{2i\beta}}{2}} \\ &= e^{-2i\alpha} \frac{2\alpha\beta}{2\alpha\beta \cos 2\beta - i(\alpha^2 + \beta^2) \sin 2\beta}.\end{aligned}$$

Die zweite Gleichung liefert

$$\begin{aligned}\varrho &= \frac{\alpha - \beta}{2\alpha} e^{-i(\alpha+\beta)} A + \frac{\alpha + \beta}{2\alpha} e^{i(\beta-\alpha)} A \\ &= \frac{\alpha^2 - \beta^2}{4\alpha\beta} e^{-2i\beta} \sigma + \frac{\beta^2 - \alpha^2}{4\alpha\beta} e^{2i\beta} \sigma \\ &= i \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sin 2\beta \cdot \sigma \\ &= e^{-2i\alpha} \frac{i(\beta^2 - \alpha^2) \sin 2\beta}{2\alpha\beta \cos 2\beta - i(\alpha^2 + \beta^2) \sin 2\beta}.\end{aligned}\quad \square$$

Als nächstes berechnen wir die Streuphasen δ_0, δ_1 aus

$$\lambda_1 = \sigma + \varrho = \exp(2i\delta_0), \quad \lambda_2 = \sigma - \varrho = \exp(2i\delta_1).$$

Für δ_0 ergibt sich:

$$\begin{aligned}e^{2i(\delta_0+\alpha)} &= \frac{2\alpha\beta + i(\beta^2 - \alpha^2) \sin 2\beta}{2\alpha\beta \cos 2\beta - i(\alpha^2 + \beta^2) \sin 2\beta} \\ &= \frac{2\alpha\beta + 2i(\beta^2 - \alpha^2) \frac{\tan \beta}{1+\tan^2 \beta}}{2\alpha\beta \frac{1-\tan^2 \beta}{1+\tan^2 \beta} - 2i(\alpha^2 + \beta^2) \frac{\tan \beta}{1+\tan^2 \beta}} \\ &= \frac{1 + \tan^2 \beta + i \left(\frac{\beta}{\alpha} - \frac{\alpha}{\beta} \right) \tan \beta}{1 - \tan^2 \beta - i \left(\frac{\beta}{\alpha} + \frac{\alpha}{\beta} \right) \tan \beta} \\ &= \frac{\left(1 + \tan^2 \beta + i \left(\frac{\beta}{\alpha} - \frac{\alpha}{\beta} \right) \tan \beta \right) \left(1 - \tan^2 \beta + i \left(\frac{\beta}{\alpha} + \frac{\alpha}{\beta} \right) \tan \beta \right)}{(1 - \tan^2 \beta)^2 + \left(\frac{\beta}{\alpha} + \frac{\alpha}{\beta} \right)^2 \tan^2 \beta} \\ &= \frac{1 - \tan^4 \beta - \left(\frac{\beta^2}{\alpha^2} - \frac{\alpha^2}{\beta^2} \right) \tan^2 \beta + 2i \frac{\beta}{\alpha} \tan \beta \left(1 + \frac{\alpha^2}{\beta^2} \tan^2 \beta \right)}{(1 - \tan^2 \beta)^2 + \left(\frac{\beta}{\alpha} + \frac{\alpha}{\beta} \right)^2 \tan^2 \beta}.\end{aligned}$$

Dies liefert

$$\tan(2(\delta_0 + \alpha)) = \frac{2 \frac{\beta}{\alpha} \tan \beta \left(1 + \frac{\alpha^2}{\beta^2} \tan^2 \beta \right)}{1 - \tan^4 \beta - \left(\frac{\beta^2}{\alpha^2} - \frac{\alpha^2}{\beta^2} \right) \tan^2 \beta} = \frac{2 \frac{\beta}{\alpha} \tan \beta}{1 - \frac{\beta^2}{\alpha^2} \tan^2 \beta},$$

und mit $\tan 2x = \frac{2 \tan x}{1 - \tan^2 x}$ erhalten wir:

$$\tan(\delta_0 + \alpha) = \frac{\beta}{\alpha} \tan \beta.$$

Für δ_1 führen wir eine analoge Rechnung aus. Damit sind die Streuphasen gegeben durch

$$\delta_0 = -\alpha + \arctan\left(\frac{\beta}{\alpha} \tan \beta\right), \quad \delta_1 = -\alpha + \arctan\left(\frac{\alpha}{\beta} \tan \beta\right).$$

Insbesondere gilt

$$\delta_0 + \delta_1 = -2\alpha + \arctan\left[\frac{1}{2} \left(\frac{\alpha}{\beta} + \frac{\beta}{\alpha}\right) \tan 2\beta\right].$$

Für die S -Matrix erhalten wir mit den obigen Ausdrücken für σ und ϱ

$$S = \frac{e^{-2i\alpha}}{2\alpha\beta \cos 2\beta - i(\alpha^2 + \beta^2) \sin 2\beta} \begin{pmatrix} 2\alpha\beta & i(\beta^2 - \alpha^2) \sin 2\beta \\ i(\beta^2 - \alpha^2) \sin 2\beta & 2\alpha\beta \end{pmatrix}. \quad (4.51)$$

Der Transmissionskoeffizient $T = |\sigma|^2$ ergibt sich zu

$$T = \frac{4\alpha^2\beta^2}{4\alpha^2\beta^2 \cos^2 2\beta + (\alpha^2 + \beta^2)^2 \sin^2 2\beta} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta}\right)^2 \sin^2 2\beta}$$

beziehungsweise, unter Verwendung von $\alpha = kL = \sqrt{\varepsilon}L$ und $\beta = k'L = \sqrt{\varepsilon - U_0}L$,

$$T = T(\varepsilon) = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4\varepsilon(\varepsilon - U_0)} \sin^2(2L\sqrt{\varepsilon - U_0})}. \quad (4.52)$$

Der Kurvenverlauf von $T(\varepsilon)$ ist in Abb. 4.5 dargestellt.

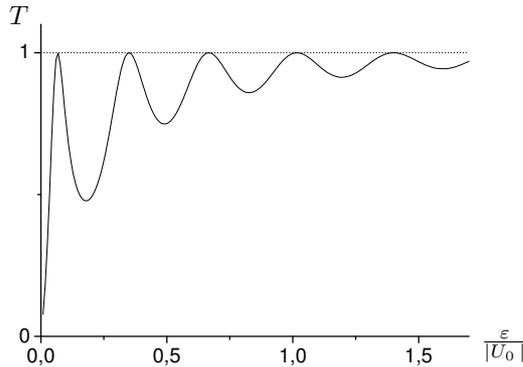


Abbildung 4.5: Transmissionskoeffizient $T(\varepsilon)$ für den Potentialtopf

Bemerkung 4.6

- (i) Für $\varepsilon \rightarrow \infty$ geht der Transmissionskoeffizient asymptotisch gegen den Wert 1, d. h., Teilchen mit sehr hohen Energien spüren das Potential nicht mehr.
- (ii) Für $\varepsilon \ll |U_0|$ ist

$$\frac{U_0^2}{4\varepsilon(\varepsilon - U_0)} \gg 1,$$

d. h., der Transmissionskoeffizient oszilliert hier stark. Für Werte von ε , die

$$2L\sqrt{\varepsilon - U_0} = n\pi$$

erfüllen, ist $T(\varepsilon) = 1$, also die Transmission total. Diese Energiewerte heißen **Resonanzen**. Aus $2L\sqrt{\varepsilon - U_0} = n\pi$ folgt

$$\varepsilon + |U_0| = \left(\frac{n\pi}{2L}\right)^2,$$

also

$$\frac{E}{|V_0|} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8mL^2 |V_0|} - 1.$$

Wir bemerken, daß die Gleichung für die Energien der Resonanzen mit der Gleichung für die Energien der gebundenen Zustände im unendlich tiefen Potentialtopf zusammenfallen, vgl. (4.30). Wir schätzen für kleine ε die Abstände zwischen den Resonanzen ab. Aus $\sqrt{\varepsilon_{n+1} - U_0} - \sqrt{\varepsilon_n - U_0} = \frac{\pi}{2L}$ folgt

$$\sqrt{1 + \frac{E_{n+1}}{|V_0|}} - \sqrt{1 + \frac{E_n}{|V_0|}} = \frac{\pi \hbar}{2L} \frac{1}{2m|V_0|}$$

und daraus durch Entwickeln der Wurzelfunktion in erster Ordnung

$$E_{n+1} - E_n \simeq \frac{\pi \hbar}{2L} \frac{|V_0|}{2m}.$$

Damit einige Resonanzen auftreten, muß gelten:

$$\frac{m|V_0|L^2}{\hbar^2} \gg 1,$$

d.h., der Potentialtopf muß breit und tief sein.

(iii) Die Streumatrix hat offensichtlich **Polestellen** für

$$2\alpha\beta \cos 2\beta - i(\alpha^2 + \beta^2) \sin 2\beta = 0,$$

also für

$$\tan 2\beta = \frac{1}{i} \frac{2\alpha\beta}{\alpha^2 + \beta^2}, \quad (4.53)$$

mit $\alpha = \sqrt{\varepsilon}L$ und $\beta = \sqrt{\varepsilon - U_0}L$. Gehen wir zu negativen Energien $\varepsilon < 0$ über, dann haben wir

$$\alpha = i\sqrt{|\varepsilon|}L \equiv i\tilde{\alpha}$$

und

$$\beta = \sqrt{\varepsilon - U_0}L.$$

Damit nimmt (4.53) die folgende Form an:

$$\tan 2\beta = \frac{2\tilde{\alpha}\beta}{\beta^2 - \tilde{\alpha}^2} = \frac{-2\frac{\beta}{\tilde{\alpha}}}{1 - \frac{\beta^2}{\tilde{\alpha}^2}} \equiv \frac{2 \tan \beta}{1 - \tan \beta},$$

d.h. $\tan \beta = -\frac{\beta}{\tilde{\alpha}}$ bzw. $\tan \beta = \frac{\tilde{\alpha}}{\beta}$. Diese Relationen sind offensichtlich identisch mit den Gleichungen für die gebundenen Zustände im Potentialtopf, vgl. (4.28), (man hat nur α und β zu vertauschen). Wir sehen also, daß die Pole auf der **negativen reellen Achse** der Energie liegen und mit den gebundenen Energiezuständen übereinstimmen. Sie entsprechen Punkten auf der positiven imaginären Achse in der komplexen k -Ebene, da $\sqrt{-\varepsilon} = ik$ gilt.

(iv) **Die Resonanzbreite:**

Wir untersuchen $\sigma(\varepsilon)$ in der Nähe der Resonanz $\varepsilon = \varepsilon_r$, d. h., $2L\sqrt{\varepsilon_r - U_0} = n\pi$:

$$\begin{aligned} \sigma(\varepsilon) &= e^{-2i\alpha} \frac{1}{\cos 2\beta - \frac{i}{2} \left(\frac{\alpha}{\beta} + \frac{\beta}{\alpha} \right) \sin 2\beta} \\ &= \frac{e^{-2i\alpha}}{\cos 2\beta} \frac{1}{1 - \frac{i}{2} \left(\frac{\alpha}{\beta} + \frac{\beta}{\alpha} \right) \tan 2\beta}. \end{aligned}$$

In der Nähe der Resonanz gilt

$$\begin{aligned} \left(\frac{k}{k'} + \frac{k'}{k}\right) \tan 2k'L &\simeq \frac{d}{d\varepsilon} \left\{ \left(\frac{k}{k'} + \frac{k'}{k}\right) \tan 2k'L \right\} \Big|_{\varepsilon=\varepsilon_r} (\varepsilon - \varepsilon_r) \\ &= \frac{L(2\varepsilon_r - U_0)}{(\varepsilon_r - U_0)\sqrt{\varepsilon_r}} (\varepsilon - \varepsilon_r) \\ &\equiv \frac{4}{\gamma_r} (\varepsilon - \varepsilon_r) \end{aligned}$$

mit

$$\gamma_r := \frac{4(\varepsilon_r - U_0)\sqrt{\varepsilon_r}}{L(2\varepsilon_r - U_0)},$$

wobei γ_r die Maßeinheit m^{-2} hat. Damit ist

$$\sigma(\varepsilon) \simeq \pm e^{-2ikL} \frac{1}{1 - \frac{i}{2} \frac{4}{\gamma_r} (\varepsilon - \varepsilon_r)} = \pm e^{-2ikL} \frac{i\gamma_r/2}{\varepsilon - \varepsilon_r + i\gamma_r/2},$$

wobei $\cos n\pi$ das Vorzeichen bestimmt. Wir sehen: $\sigma(\varepsilon)$ (und damit auch die Streumatrix) hat **Polstellen** für $\varepsilon = \varepsilon_r - i\gamma_r/2$. Für den Transmissionskoeffizienten erhalten wir die **Breit-Wigner-Formel**

$$T(E) \simeq \frac{\Gamma_r^2/4}{(E - E_r)^2 + \Gamma_r^2/4}, \quad (4.54)$$

wobei die Energie

$$\Gamma_r/2 \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \gamma_r/2$$

die **Halbwertsbreite der Resonanz** ist, d. h., für $E = E_r$ ist $T = 1$ und für $E = E_r \pm \Gamma_r/2$ ist $T = 1/2$.

Die Polstruktur von $S(k)$ ist in Abbildung 4.6 zusammengefaßt. Um von $\sigma(k)$ zur Funktion $\sigma(\varepsilon)$

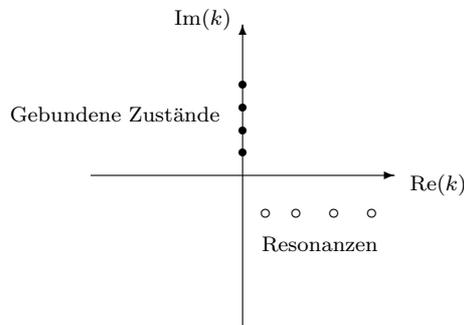


Abbildung 4.6: Die Polstellen der Funktion $\sigma(k)$ in der komplexen k -Ebene.

überzugehen, müssen wir ε als Punkt in der Riemannschen Fläche der Wurzelfunktion betrachten. Diese Fläche besteht aus den beiden Blättern R_1 ($\Im\sqrt{\varepsilon} > 0$) und R_2 ($\Im\sqrt{\varepsilon} < 0$) sowie dem Verzweigungspunkt 0, siehe Abbildung 4.7. Im Blatt R_1 , dem sogenannten “physikalischen Blatt” liegen auf der negativen reellen Achse die Energien der gebundenen Zustände. Im Blatt R_2 , dem sogenannten “unphysikalischen Blatt”, liegen die Resonanzenergien.

(v) Abschließend diskutieren wir die Bewegung eines einlaufenden Wellenpaketes

$$\psi_{\text{ein}}(x, t) = \int_{\Delta k} dk f(k) \exp \left\{ i \left(kx - \frac{Et}{\hbar} \right) \right\}$$

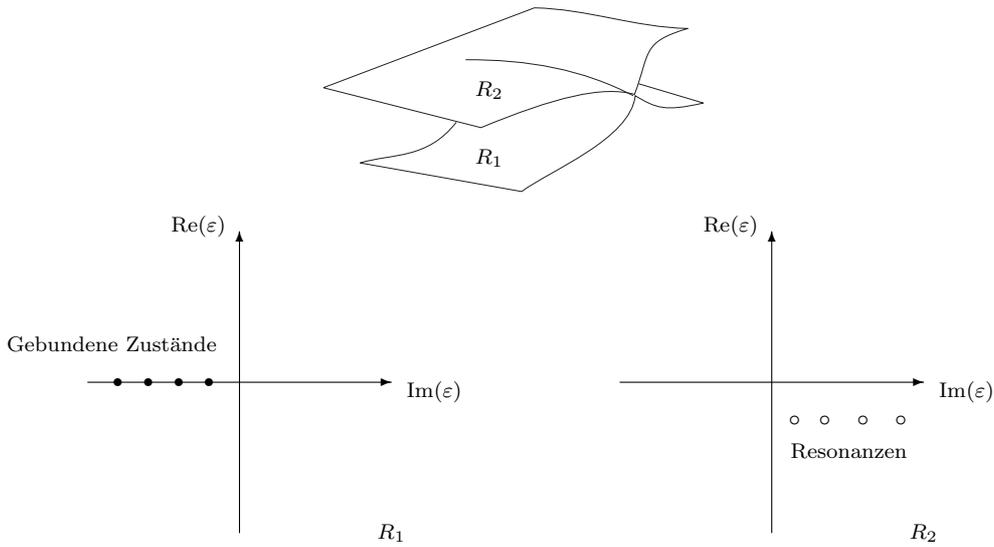


Abbildung 4.7: Die Polstellen der Funktion $\sigma(\varepsilon)$ auf der Riemannschen Fläche von ε .

mit einem Profil $f(k)$, konzentriert um eine Resonanz $k_r = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE_r}$. Dann erhalten wir für das auslaufende Paket:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{ausl.}}(x, t) &= \int_{\Delta k} dk f(k) \sigma(E) \exp \left\{ i \left(kx - \frac{Et}{\hbar} \right) \right\} \\ &= \pm \int_{\Delta k} dk f(k) \frac{i\Gamma_r/2}{E - E_r + i\Gamma_r/2} \exp \left\{ i \left(k(x - 2L) - \frac{Et}{\hbar} \right) \right\}. \end{aligned}$$

Dieses Integral ist für komplizierte f nicht exakt berechenbar, die Diskussion von Spezialfällen liefert aber gewisse Einsichten:

a) Sei $f(k) \simeq \text{const}$ im Bereich $\Delta E \gg \Gamma_r$, d.h., sei das Wellenpakete räumlich "höchstlokalisiert". Dann zeigt man:

$$\langle x \rangle_{\psi_{\text{ausl.}}} \simeq 2L + \frac{\hbar k_r t}{m}.$$

Hier taucht also Γ_r gar nicht mehr in der Formel auf.

b) Sei f eine Gauß-Verteilung. Man zeigt

$$|\psi_{\text{ausl.}}(x, t)|^2 \simeq \exp \left(-t \frac{\Gamma_r}{\hbar} \right),$$

vorausgesetzt es gilt

$$\left(\frac{E_r}{\Delta E} \right)^2 (k_r x)^{-2/3} \gtrsim \frac{t - x/v_r}{\hbar/\Gamma_r} \gg 4 \left(\frac{\Gamma_r}{\Delta E} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Gamma_r}{\Delta E} \right)^2,$$

siehe R.G. Newton: *Scattering Theory of Waves and Particles*, Springer 1982. Dies ist so zu interpretieren: Das Teilchen verweilt im Potentialtopf für eine Zeit $\sim \hbar/\Gamma_r$ und verläßt dann den Topf entsprechend dem obigen Exponentialgesetz. Es handelt sich also um ein metastabiles Teilchen mit einer Lebensdauer von $\sim \hbar/\Gamma_r$.

Kapitel 5

Der Drehimpuls

Ersetzen wir in der Formel

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$$

für den Drehimpuls der klassischen Mechanik die klassischen Größen \vec{x} und \vec{p} durch die entsprechenden quantenmechanischen Observablen, so erhalten wir

$$\hat{L} = \hat{x} \times \hat{p}, \quad (5.1)$$

bzw. in Komponenten

$$\hat{L}_i = \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k. \quad (5.2)$$

In der Ortsdarstellung ergibt sich

$$\hat{L} = -i\hbar \hat{x} \times \nabla. \quad (5.3)$$

Als Kombination von selbstadjungierten unbeschränkten Operatoren ist \hat{L} wieder ein unbeschränkter Operator, von dem man beweist, daß er selbstadjungiert ist.¹ Im weiteren spielt das Quadrat

$$\hat{L}^2 := \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2$$

des Drehimpulses eine wichtige Rolle. Es gelten die folgenden **Vertauschungsrelationen**:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k \quad (5.4)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0, \quad (5.5)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{x}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{x}_k \quad (5.6)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{p}_k \quad (5.7)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{x}^2] = [\hat{L}_i, \hat{p}^2] = 0. \quad (5.8)$$

Aus (5.8) folgt für einen Hamiltonoperator der Form $\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V(|\vec{x}|)$:

$$[\hat{L}_i, \hat{H}] = 0,$$

¹Siehe [Thirring], S.96, das Gebiet D der wesentlichen Selbstadjungiertheit ist die lineare Hülle der Vektoren

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = e^{-x^2/2} x_1^{k_1} x_2^{k_2} x_3^{k_3}, \quad k_i = 0, 1, 2.$$

D ist dicht und unter Drehungen invariant.

d.h. \hat{L}_i ist eine **Erhaltungsgröße**. Wir beweisen (5.4) unter Verwendung der Heisenbergschen Vertauschungsrelationen:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{L}_j] &= \epsilon_{imn}\epsilon_{jrs} (\hat{x}_m \hat{p}_n \hat{x}_r \hat{p}_s - \hat{x}_r \hat{p}_s \hat{x}_m \hat{p}_n) \\ &= \epsilon_{imn}\epsilon_{jrs} \{ \hat{x}_m (\hat{x}_r \hat{p}_n - i\hbar \delta_{rn}) \hat{p}_s - \hat{x}_r (\hat{x}_m \hat{p}_s - i\hbar \delta_{ms}) \hat{p}_n \} \\ &= i\hbar (\epsilon_{imn}\epsilon_{njs} \hat{x}_m \hat{p}_s - \epsilon_{imn}\epsilon_{mjr} \hat{x}_r \hat{p}_n) \\ &= i\hbar \{ (\delta_{ij}\delta_{ms} - \delta_{is}\delta_{mj}) \hat{x}_m \hat{p}_s - (\delta_{ij}\delta_{nr} - \delta_{ir}\delta_{nj}) \hat{x}_r \hat{p}_n \} \\ &= i\hbar (\hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i) = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k. \end{aligned}$$

Für (5.5) genügt es zu zeigen, daß $[\hat{L}_i, \hat{L}_j^2] = 0$ für $i \neq j$ gilt:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{L}_j \hat{L}_j] &= [\hat{L}_i, \hat{L}_j] \hat{L}_j + \hat{L}_j [\hat{L}_i, \hat{L}_j] \\ &= i\hbar \epsilon_{ijk} (\hat{L}_k \hat{L}_j + \hat{L}_j \hat{L}_k) = 0. \end{aligned}$$

Der Beweis von (5.6) und (5.7) ist Hausaufgabe.

Die gruppentheoretische Interpretation von (5.4) ist offensichtlich: Es handelt sich um die Vertauschungsrelationen für die Erzeugenden der Drehgruppe $SO(3)$, vgl. mit der klassischen Mechanik. Wir werden im ersten Abschnitt einige wichtige gruppentheoretische Sachverhalte zusammenfassen.

5.1 Einige gruppentheoretische Grundlagen

Die **Drehgruppe** $O(3)$ ist die Gruppe der linearen Transformationen des \mathbb{R}^3 , die das Euklidische Skalarprodukt invariant lassen, d.h., $R \in O(3)$ genau dann, wenn

$$(R\vec{x})^T \cdot (R\vec{y}) = \vec{x}^T \cdot \vec{y}$$

für alle $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^3$ gilt. Es muß also

$$R^T R = \mathbf{1} \tag{5.9}$$

gelten. Daraus folgern wir

$$(\det R)^2 = 1,$$

also $\det R = \pm 1$. Die Gruppe $SO(3)$ der **echten Drehungen** ist definiert durch:

$$SO(3) := \{R \in O(3) : \det R = +1\}. \tag{5.10}$$

Zerlegen wir $\vec{x} = x^i \vec{e}_i$ in der Standardbasis \vec{e}_i , so gilt $R\vec{x} = R^i_j x^j \vec{e}_i$ und (5.9) hat die Form

$$(R^T)^i_j R^j_k = \delta^i_k.$$

Man zeigt: Jedes Element $R \in SO(3)$ kann man als Drehung um einen Winkel φ , $0 < \varphi \leq \pi$, bezüglich einer bestimmten (orientierten) Drehachse realisieren. Wir ordnen jeder Drehung R damit einen Vektor der Länge φ in Achsenrichtung zu. Diese Zuordnung ist eineindeutig, solange $\varphi < \pi$ gilt. Jeden Vektor der Länge $\varphi = \pi$ müssen wir offenbar mit dem in entgegengesetzter Richtung zeigenden Vektor der Länge π identifizieren. D.h. die Gruppe $SO(3)$ ist als topologischer Raum identisch mit einer Vollkugel im \mathbb{R}^3 mit Radius π und identifizierten Antipodenpunkten. Dieser Raum ist offensichtlich kompakt und zusammenhängend. Er ist aber **nicht** einfach zusammenhängend, denn es gibt geschlossenen Kurven, die nicht auf stetige Weise zur trivialen Kurve deformierbar sind: Dies trifft für jede Kurve zu, die in einem Punkt auf dem Rand der Kugel startet und zum entsprechenden Antipodenpunkt läuft.

Man kann auf obigem topologischen Raum eine differenzierbare Struktur, die mit der Gruppenstruktur verträglich ist, definieren. Deshalb ist die $SO(3)$ eine **Lie-Gruppe**. Für eine Einführung in die Theorie

der Lie-Gruppen siehe z. B. [Warner]. Die $SO(3)$ ist **3-dimensional** (die Dimension des topologischen Raumes) und – aus obigen Überlegungen – **kompakt, zusammenhängend, aber nicht einfach zusammenhängend**.

Wir erinnern noch an die (lokale) Parametrisierung der $SO(3)$ mit Hilfe der Euler-Winkel:

$$R(\varphi, \theta, \psi) = R_z(\varphi) R_y(\theta) R_x(\psi),$$

mit $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \psi \leq 2\pi$ und

$$R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad R_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & -\sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}.$$

Dabei bezeichnen R_y und R_z Drehungen um die y - bzw. um die z -Achse.

Die **unitäre Gruppe** $U(2)$ ist die Gruppe der linearen Transformationen des \mathbb{C}^2 , die das Hermitesche Skalarprodukt invariant lassen, d.h. $U \in U(2)$ genau dann, wenn

$$(U\vec{x})^\dagger \cdot (U\vec{y}) = \vec{x}^\dagger \cdot \vec{y},$$

für alle $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{C}^2$ gilt. Dies liefert

$$U^\dagger U = \mathbf{1}. \quad (5.11)$$

Wir folgern

$$|\det U|^2 = 1.$$

Die **spezielle unitäre Gruppe** $SU(2)$ ist definiert durch

$$SU(2) := \{U \in U(2) : \det U = +1\}. \quad (5.12)$$

Werten wir die Bedingung (5.11) für eine beliebige komplexe 2×2 -Matrix $U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ aus, so erhalten wir $c = -b^*$ und $d = a^*$, also

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}.$$

Die Bedingung $\det U = 1$ liefert

$$|a|^2 + |b|^2 = 1.$$

Daraus folgern wir: Die Gruppe $SU(2)$ kann als topologischer Raum mit der Einheitskugel $S^3 \subset \mathbb{C}^2 \cong \mathbb{R}^4$ identifiziert werden. Die Kugel S^3 ist offensichtlich ein 3-dimensionaler, kompakter, zusammenhängender und einfach-zusammenhängender Raum (jede geschlossene Kurve ist kontrahierbar). Wiederum kann man auf diesem Raum eine differenzierbare Struktur definieren, die mit der Gruppenstruktur verträglich ist. Damit ist die $SU(2)$ eine **3-dimensionale, kompakte, zusammenhängende und einfach-zusammenhängende Lie-Gruppe**.

Es zeigt sich, daß die Gruppe $SU(2)$ die **universelle Überlagerungsgruppe** der Gruppe $SO(3)$ ist. Man sagt in diesem Zusammenhang auch, die $SU(2)$ (aufgefaßt als reelle Lie-Gruppe) ist die **Spingruppe** der $SO(3)$ und schreibt $Spin(3) \cong SU(2)$. Um den obigen Zusammenhang verstehen zu können, identifizieren wir den \mathbb{R}^3 mit dem Vektorraum $H_{2 \times 2}$ der Hermiteschen 2×2 -Matrizen mit verschwindender Spur

$$\mathbb{R}^3 \ni \vec{x} \mapsto x = x^i \sigma_i \in H_{2 \times 2}, \quad (5.13)$$

wobei x^i die Komponenten von \vec{x} in der Standardbasis des \mathbb{R}^3 sind und σ_i , $i = 1, 2, 3$ die Pauli-Matrizen bezeichnen. Für weitere Rechnungen ist die folgende Formel für das Produkt von Pauli-Matrizen nützlich:

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbf{1} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k. \quad (5.14)$$

Man zeigt damit leicht, daß

$$x^2 = \bar{x}^2 \mathbf{1}$$

und

$$\det x = -\bar{x}^2 \quad (5.15)$$

gilt. Wir bemerken nun, daß für jedes $U \in SU(2)$ die Transformation

$$H_{2 \times 2} \ni x \mapsto U x U^{-1} \in H_{2 \times 2}$$

die Determinante $\det x$ invariant läßt. Damit wird, wegen (5.15), über die Identifizierung (5.13) eine Drehung R im \mathbb{R}^3 induziert, (da für $U = \mathbf{1}$ die Identität induziert wird und die $SU(2)$ zusammenhängend ist, handelt es sich um eine eigentliche Drehung):

$$U(x^k \sigma_k) U^{-1} = (R^k_l x^l) \sigma_k. \quad (5.16)$$

Damit erhalten wir eine Abbildung

$$\phi : SU(2) \rightarrow SO(3), \quad U \mapsto \phi(U) = R.$$

Im Seminar werden die folgenden Eigenschaften dieser Abbildung bewiesen:

- i) ϕ ist ein Homomorphismus von Gruppen.
- ii) ϕ ist surjektiv.
- iii) Der Kern der Abbildung ist

$$\ker \phi = \{\mathbf{1}, -\mathbf{1}\} \equiv \mathbb{Z}_2.$$

Es liegt also ein 2-fache Überlagerung vor. Da die $SU(2)$ einfach zusammenhängend ist, heißt ϕ **universeller** Überlagerungshomomorphismus. Aus dem Homomorphismensatz für Gruppen folgt, daß $\ker \phi$ ein Normalteiler ist und die Faktorisierung von $SU(2)$ nach $\ker \phi$ einen Gruppen-Isomorphismus

$$SU(2)/\mathbb{Z}_2 \cong SO(3) \quad (5.17)$$

liefert. Das folgende kommutative Diagramm faßt diese Sachverhalte zusammen:

$$\begin{array}{ccc} SU(2) & \xrightarrow{\phi} & SO(3) \\ \pi \downarrow & \nearrow \cong & \\ SU(2)/\mathbb{Z}_2 & & \end{array}$$

Die Tatsache, daß eine zweifache Überlagerung vorliegt, manifestiert sich auch in einer (lokalen) Parametrisierung der $SU(2)$ mit Euler-Winkeln:

$$U = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \cdot e^{\frac{i}{2}(\psi+\varphi)} & -\sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{\frac{i}{2}(\psi-\varphi)} \\ \sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{-\frac{i}{2}(\psi-\varphi)} & \cos \frac{\theta}{2} \cdot e^{-\frac{i}{2}(\psi+\varphi)} \end{pmatrix}$$

mit $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \psi \leq 4\pi$.

Wir diskutieren nun **infinitesimale Transformationen** auf der Lie-Gruppe $SU(2)$. Dies führt zum Begriff der **Lie-Algebra** der $SU(2)$. Dazu betrachten wir eine Kurve $\mathbb{R} \ni t \mapsto U(t) \in SU(2)$, die durch das Einselement verläuft, $U(0) = \mathbf{1}$, siehe Abb. 5.1. Für $t \sim 0$ gilt offensichtlich

$$U(t) = \mathbf{1} + t \cdot \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} U(t) + \mathcal{O}(t^2),$$

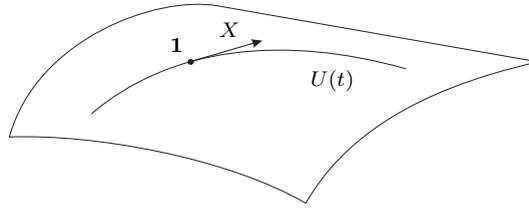


Abbildung 5.1: Die Kurve $U(t)$ in der Lie-Gruppe $SU(2)$ und ihr Tangentialvektor X an der Stelle $\mathbf{1}$

wobei

$$\left. \frac{d}{dt} U(t) \right|_{t=0} = X$$

der Tangentialvektor an die Kurve im Einselement ist. Umgekehrt können wir natürlich zu jedem Tangentialvektor eine Kurve durch das Einselement wählen, deren Ableitung genau X liefert.² Die Gesamtheit dieser Tangentialvektoren spannt den **Tangentialraum im Einselement** auf. Die Dimension dieses Vektorraumes ist offensichtlich gleich der Dimension der unterliegenden Lie-Gruppe.

Wir werten die definierenden Relationen (5.11) und (5.12) der $SU(2)$ infinitesimal aus: Aus $U(t) \cdot U(t)^\dagger = \mathbf{1}$ folgt

$$(\mathbf{1} + Xt + \Theta(t^2)) \cdot (\mathbf{1} + Xt + \Theta(t^2))^\dagger = \mathbf{1}$$

und damit $X = -X^\dagger$. X muß also antihermitesch sein. Aus $\det U(t) = 1$ erhalten wir, unter Verwendung von

$$\det U(t) \equiv \frac{1}{2} \epsilon^{kl} \epsilon_{ij} U_k^i(t) U_l^j(t),$$

die folgende Beziehung:

$$\frac{1}{2} \epsilon^{kl} \epsilon_{ij} (\delta_k^i + tX_k^i + \dots) (\delta_l^j + tX_l^j + \dots) = \frac{1}{2} (\epsilon^{kl} \epsilon_{kl} + 2t \cdot X^k_k + \dots) = 1,$$

und damit $\text{Tr } X = 0$. Wir definieren den Vektorraum

$$su(2) := \{X \in M_{2 \times 2}(\mathbb{C}) : X = -X^\dagger, \text{Tr } X = 0\} \quad (5.18)$$

und versehen ihn mit dem Kommutator als Operation:

$$[X, Y] := X \cdot Y - Y \cdot X. \quad (5.19)$$

Die Punkte auf der rechten Seite bezeichnen die Matrizenmultiplikation. Der Kommutator hat offensichtlich die folgenden Eigenschaften:

- i) Die Abbildung $(X, Y) \mapsto [X, Y]$ ist bilinear.
- ii) $[X, Y] = -[Y, X]$.
- iii) $[X, [Y, Z]] + [Y, [Z, X]] + [Z, [X, Y]] = 0$ (Jacobi- Identität).

Damit ist $su(2)$ eine Lie-Algebra. Diese heißt **Lie-Algebra der Lie-Gruppe $SU(2)$** . Als Vektorraum ist $su(2)$ offensichtlich isomorph zum reellen Vektorraum \mathbb{R}^3 .

²Genauer gesagt, ist mit jedem X eine Äquivalenzklasse von Kurven durch das Einselement assoziiert, die alle die gleiche Ableitung liefern.

Die eben beschriebene Konstruktion funktioniert natürlich für jede Lie-Gruppe, die durch Matrizen gegeben ist. Bei abstrakten Lie-Gruppen wird die Lie-Algebra durch linksinvariante Vektorfelder auf der Gruppe definiert, siehe [Warner].

Wir definieren die **Exponentialabbildung**, $\exp : su(2) \rightarrow SU(2)$, durch

$$\exp(X) := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} X^k.$$

Man zeigt, daß diese Abbildung **lokal** (in einer Umgebung des Einselements) eine Identifizierung von Lie-Gruppe und Lie-Algebra liefert. Die Abbildung

$$t \mapsto U(t) = \exp(tX)$$

definiert eine einparametrische Untergruppe der $SU(2)$. Diese heißt von X erzeugte einparametrische Untergruppe. Als **Basis** der $su(2)$ wählen wir

$$\{s_k\} \equiv \left\{ -\frac{i}{2} \sigma_k \right\}.$$

Sei \vec{e}_k wieder die Standardbasis des \mathbb{R}^3 . Dann liefert die Abbildung $s_k \mapsto e_k$ eine explizite Realisierung des Isomorphismus $su(2) \cong \mathbb{R}^3$. Der Kommutator zwischen Basiselementen hat die Form

$$[s_k, s_l] = \epsilon_{klm} s_m.$$

Die Koeffizienten ϵ_{klm} (des vollständig antisymmetrischen Tensors) heißen in diesem Kontext **Strukturkonstanten** der Lie-Algebra $su(2)$ in der Basis $\{s_k\}$.

Völlig analog können wir im Falle der Drehgruppe $SO(3)$ vorgehen. Bezeichnen wir

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} R(t) = A,$$

dann liefert eine infinitesimale Auswertung der definierenden Relation (5.9):

$$A = -A^T.$$

(Reelle antisymmetrische Matrizen sind natürlich automatisch spurlos, so daß die Bedingung $\det R = 1$ keine zusätzliche Einschränkung liefert.) Wir definieren den 3-dimensionalen reellen Vektorraum

$$so(3) = \{A \in M_{3 \times 3}(\mathbb{R}) : A = -A^T\} \quad (5.20)$$

und versehen diesen wieder mit dem Kommutator (5.19). Auf diese Weise entsteht die **Lie-Algebra** $so(3)$ **der Drehgruppe** $SO(3)$. Differenzieren wir den 2-fachen Überlagerungshomomorphismus (5.16), so erhalten wir $x^k [X, \sigma_k] = (A^k{}_l x^l) \sigma_k$. Zerlegt man $X = X^l s_l$, dann ergibt sich

$$(X^l \epsilon_{lk}{}^m x^k) \sigma_m = (A^m{}_k x^k) \sigma_m$$

und daraus:

$$X^l \epsilon_{lk}{}^m = A^m{}_k. \quad (5.21)$$

Offensichtlich wird durch diese Gleichung ein **Isomorphismus der Lie-Algebren** $su(2)$ **und** $so(3)$ hergestellt. Außerdem erhalten wir daraus eine natürliche Basis $\{t_l\}_{l=1,2,3}$ der $so(3)$,

$$(t_l)^m{}_k = \epsilon_{lk}{}^m,$$

bzw. in Matrixschreibweise:

$$t_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad t_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad t_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Abschließend führen wir einige Grundbegriffe aus der Theorie der **Darstellungen von Lie-Gruppen und Lie-Algebren** ein. Seien G eine Lie-Gruppe und \mathcal{H} ein Vektorraum. Eine Darstellung von G in \mathcal{H} ist ein Homomorphismus

$$G \ni g \mapsto D(g) \in \text{Aut}(\mathcal{H}),$$

von Gruppen, d.h. es gilt

$$D(g_1)D(g_2) = D(g_1, g_2),$$

für alle $g_1, g_2 \in G$. Dabei bezeichnet $\mathbf{1}$ das Einselement in G und $\text{Aut}(\mathcal{H})$ die Gruppe der Automorphismen (bijektive Abbildungen, versehen mit der Operation der Nacheinanderausführung) des Vektorraumes \mathcal{H} . Für unsere weiteren Zwecke wird \mathcal{H} immer ein Hilbertraum sein, d.h. wir haben ein Skalarprodukt $\langle \cdot | \cdot \rangle$ auf \mathcal{H} . Eine Darstellung D der Gruppe G auf dem Hilbertraum \mathcal{H} heißt **unitär**, falls

$$\langle D(g)x | D(g)y \rangle = \langle x | y \rangle. \quad (5.22)$$

für alle $g \in G$ und alle $x, y \in \mathcal{H}$ gilt. Ein Unterraum \mathcal{H}_1 heißt invariant, falls

$$D(g)\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_1,$$

für alle $g \in G$ gilt. Eine Darstellung D heißt **irreduzibel**, falls kein nichttrivialer, unter D invarianter Unterraum $\mathcal{H}_1 \subset \mathcal{H}$ existiert (triviale Unterräume sind $\{0\}$ und \mathcal{H} selbst).

Für kompakte Gruppen beweist man:

- (i) Alle unitären, irreduziblen Darstellungen sind endlich-dimensional.
- (ii) Jede unitäre Darstellung ist eine direkte Summe endlich-dimensionaler, unitärer, irreduzibler Darstellungen.
- (iii) Jede Darstellung einer kompakten Gruppe ist zu einer unitären Darstellung äquivalent, (d.h. es existiert ein Isomorphismus der Darstellungsräume, der die beiden Darstellungen verflieht.)

Diese Aussagen treffen natürlich auf die Darstellungen der kompakten Gruppen $SU(2)$ und $SO(3)$ zu. Wegen der oben diskutierten Beziehung zwischen diesen Gruppen gibt es Beziehungen zwischen ihren Darstellungen:

- (i) Sei D eine Darstellung der $SO(3)$. Dann definiert

$$\tilde{D}(U) := D(\phi(U)), \quad U \in SU(2),$$

auf eindeutige Weise eine Darstellung der $SU(2)$.

- ii) Sei, umgekehrt, \tilde{D} eine irreduzible Darstellung der $SU(2)$. Dann gilt natürlich

$$\tilde{D}(\mathbf{1}) = \mathbf{1}_{\mathcal{H}}, \quad \tilde{D}(-\mathbf{1})\tilde{D}(-\mathbf{1}) = \tilde{D}(\mathbf{1}) = \mathbf{1}_{\mathcal{H}}.$$

Da die Darstellung irreduzibel ist und $\tilde{D}(-\mathbf{1})$ mit allen Operatoren $\tilde{D}(U)$, $U \in SU(2)$, vertauscht, folgt aus dem Lemma von Schur $\tilde{D}(-\mathbf{1}) = \lambda \mathbf{1}$, $\lambda \in \mathbb{C}$, und damit

$$\tilde{D}(-\mathbf{1}) = \pm \mathbf{1}_{\mathcal{H}}.$$

Damit erhalten wir

$$\tilde{D}(-U) = \tilde{D}(-\mathbf{1} \cdot U) = \tilde{D}(-\mathbf{1})\tilde{D}(U) = \pm\mathbf{1}_{\mathcal{H}}\tilde{D}(U) = \pm\tilde{D}(U).$$

Nur wenn $D(-\mathbf{1}) = +\mathbf{1}_{\mathcal{H}}$ gilt, folgt $D(-U) = D(U)$ und damit wird eine **eindeutige** Darstellung der $SO(3)$ definiert.

Im Falle $D(-\mathbf{1}) = -\mathbf{1}_{\mathcal{H}}$ ergibt sich eine ‘‘doppeldeutige Darstellung’’ der $SO(3)$. Die richtige Terminologie lautet: Es liegt eine **Spinordarstellung** der $SO(3)$ bzw. eine Darstellung der **Spingruppe** $Spin(3) \equiv SU(2)$ der $SO(3)$ vor.

- (iii) Beide Sorten von Darstellungen sind physikalisch relevant. Für den Bahndrehimpuls \hat{L} hat man eine eindeutige Darstellung der $SO(3)$, für den halbzahligen Spin \hat{S} (etwa des Elektrons) hat man es mit Darstellungen der Spingruppe zu tun.

Hat man eine Darstellung D einer Lie-Gruppe G , so erhält man eine mit dieser Darstellung assoziierte Darstellung der Lie-Algebra \mathfrak{g} von G durch Differenzieren:

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} D(\exp tX) = D' \left(\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \exp tX \right) = D'(X),$$

für alle $X \in \mathfrak{g}$. Wir erhalten also eine Abbildung

$$\mathfrak{g} \ni X \rightarrow T(X) := D'(X) \in \text{End}(\mathcal{H}), \quad (5.23)$$

die offenbar die folgenden Eigenschaften hat:

- i) $T(X + Y) = T(X) + T(Y)$,
- ii) $T([X, Y]) = [T(X), T(Y)]$.

Eigenschaft i) folgt aus $D(g_1 \cdot g_2) = D(g_1) \cdot D(g_2)$ und ii) ergibt sich aus $D(g g^\lambda g^{-1}) = D(g) D(g^\lambda) D(g^{-1})$. Wir nennen T die durch D induzierte **Darstellung der Lie-Algebra \mathfrak{g}** .

Wir bemerken außerdem: Ist die Darstellung D unitär, dann sind die Operatoren $T(X)$ antihermitesch, (dies erhält man sofort durch Differenzieren von (5.22)).

Der folgende Sachverhalt ist äußerst nützlich:

Endlich-dimensionale irreduzible Darstellungen einer kompakten, einfach zusammenhängenden Lie-Gruppe stehen in **eindeutiger Beziehung** zu endlich-dimensionalen irreduziblen Darstellungen der zugehörigen Lie-Algebra.

Insbesondere gilt dies natürlich für die $SU(2)$, nicht aber für die $SO(3)$.

5.2 Eigenwerte und Eigenvektoren des Drehimpulses. Endlich-dimensionale irreduzible Darstellungen der $su(2)$

Wir befassen uns nun mit der Lösung des Eigenwertproblems für den Drehimpuls. Wie bereits bemerkt, sind die Vertauschungsrelationen

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k$$

identisch mit denen der Lie-Algebra $su(2)$. Aus mathematischer Sicht geht es also um die Bestimmung der irreduziblen Darstellungen dieser Lie-Algebra. Da

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_j] = 0$$

gilt, können wir $\{\hat{J}^2, \hat{J}_3\}$ als System kommutierender Observabler verwenden. Zur Konstruktion der Darstellungen verwenden wir wieder die Methode der Leiteroperatoren. In der mathematischen Terminologie wird diese die Methode des höchsten Gewichts genannt.

Wir definieren die folgenden **Leiteroperatoren**:

$$\hat{J}_\pm := \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2. \quad (5.24)$$

Es gilt:

- i) $[\hat{J}^2, \hat{J}_\pm] = 0,$
- ii) $[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hbar \hat{J}_3,$
- iii) $[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar \hat{J}_\pm,$
- iv) $[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm^n] = \pm n\hbar \hat{J}_\pm^n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$

Eigenschaft i) ist offensichtlich. Wir zeigen ii). Es gilt:

$$\begin{aligned} \hat{J}_\pm \hat{J}_\mp &= (\hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2) (\hat{J}_1 \mp i\hat{J}_2) \\ &= \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 \pm i(\hat{J}_2 \hat{J}_1 - \hat{J}_1 \hat{J}_2) \\ &= \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 \pm \hbar \hat{J}_3 \\ &= \hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 \pm \hbar \hat{J}_3. \end{aligned}$$

Bilden der Differenz dieser Gleichungen liefert:

$$[\hat{J}_+, \hat{J}_-] = \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hat{J}_- \hat{J}_+ = \hbar \hat{J}_3 - (-\hbar \hat{J}_3) = 2\hbar \hat{J}_3.$$

Die Addition der beiden Gleichungen ergibt ebenfalls eine nützliche Formel:

$$\hat{J}^2 = \frac{1}{2} (\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+) + \hat{J}_3^2. \quad (5.25)$$

Wir zeigen iii):

$$[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm] = [\hat{J}_3, \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2] = i\hbar \hat{J}_2 \pm i(-i\hbar \hat{J}_1) = \pm\hbar \hat{J}_\pm.$$

Analog erhalten wir:

$$[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm^2] = [\hat{J}_3, \hat{J}_\pm] \hat{J}_\pm + \hat{J}_\pm [\hat{J}_3, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar \hat{J}_\pm \hat{J}_\pm + \hat{J}_\pm (\pm\hbar \hat{J}_\pm) = \pm 2\hbar \hat{J}_\pm,$$

n -fache Iteration liefert iv).

Wegen

$$\langle \psi | \hat{J}^2 \psi \rangle = \sum_{i=1}^3 \|\hat{J}_i \psi\|^2$$

ist \hat{J}^2 positiv, außerdem gilt:

$$\langle \psi | \hat{J}^2 \psi \rangle \geq \langle \psi | \hat{J}_3^2 \psi \rangle \geq 0, \quad (5.26)$$

für beliebige reine Zustände ψ . Wir bezeichnen die gemeinsamen Eigenvektoren von \hat{J}^2 und \hat{J}_3^2 mit $|n\rangle$:

$$\hat{J}^2 |n\rangle = a\hbar^2 |n\rangle, \quad \hat{J}_3 |n\rangle = m\hbar |n\rangle. \quad (5.27)$$

Wegen der Positivität von \hat{J}^2 gilt $a \geq 0$ und aus iii) folgt:

$$\hat{J}_3 \hat{J}_\pm |n\rangle = (\hat{J}_\pm \hat{J}_3 \pm \hbar \hat{J}_\pm) |n\rangle = (m \pm 1) \hbar \hat{J}_\pm |n\rangle.$$

Also sind J_+ und J_- in der Tat Leiteroperatoren. Andererseits ergibt sich aus i):

$$\hat{J}^2 \hat{J}_\pm |n\rangle = \hat{J}_\pm \hat{J}^2 |n\rangle = a \hbar^2 \hat{J}_\pm |n\rangle.$$

Gleichung (5.26) liefert für $|\psi\rangle \equiv |n\rangle$:

$$a \geq m^2 \geq 0, \quad -\sqrt{a} \leq m \leq \sqrt{a}, \quad (5.28)$$

d.h., m ist von oben und von unten beschränkt. Wir bezeichnen den kleinsten Eigenwert mit m_{\min} und den größten mit m_{\max} . Seien außerdem $|n_{\min/\max}\rangle$ die zugehörigen Eigenvektoren.

Da \hat{J}_+ den Eigenwert um 1 erhöht, muß

$$\hat{J}_+ |n_{\max}\rangle = 0 \quad (5.29)$$

gelten. Damit gilt aber auch

$$0 = \hat{J}_- \hat{J}_+ |n_{\max}\rangle = (\hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 - \hbar \hat{J}_3) |n_{\max}\rangle,$$

d.h.

$$(a - m_{\max}^2 - m_{\max}) = 0.$$

Damit erhalten wir

$$a = m_{\max}(m_{\max} + 1). \quad (5.30)$$

Analog folgt aus $\hat{J}_- |n_{\min}\rangle = 0$ die Beziehung

$$0 = \hat{J}_+ \hat{J}_- |n_{\min}\rangle = (\hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 + \hbar \hat{J}_3) |n_{\min}\rangle,$$

also $(a - m_{\min}^2 + m_{\min}) = 0$, und damit

$$a = m_{\min}(m_{\min} - 1). \quad (5.31)$$

Schließlich verwenden wir die Relation iv):

$$\hat{J}_3 \hat{J}_\pm^n |n_{\max}\rangle = (\hat{J}_\pm^n \hat{J}_3 \pm n \hbar \hat{J}_\pm^n) |n_{\max}\rangle = (m_{\max} \pm n) \hbar \hat{J}_\pm^n |n_{\max}\rangle.$$

Es gilt also

$$\hat{J}_3 \hat{J}_-^n |n_{\max}\rangle = (m_{\max} - n) \hbar \hat{J}_-^n |n_{\max}\rangle.$$

Wegen (5.28) muß aber eine natürliche Zahl $n_0 \in \mathbb{N}$ existieren, so daß gilt:

$$m_{\max} - n_0 = m_{\min}. \quad (5.32)$$

Die Gleichungen (5.30), (5.31) und (5.32) ergeben:

$$m_{\max}(m_{\max} + 1) = a = m_{\min}(m_{\min} - 1) = (m_{\max} - n_0)(m_{\max} - n_0 - 1)$$

also

$$m_{\max} = \frac{n_0}{2}.$$

Damit haben wir die Eigenwerte gefunden. Wir bezeichnen im weiteren den höchsten Eigenwert (das **höchste Gewicht**) mit $m_{\max} \equiv j$. Nach obiger Gleichung nimmt j halbzahlige Werte an,

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

und es gilt $a = j(j+1)$. Die Eigenwerte von \hat{J}_3 laufen von j bis $-j$:

$$m = j, j-1, \dots, -j.$$

Bezeichnen wir die Eigenvektoren zu den Eigenwerten $j(j+1)$ und m mit $|jm\rangle$, so erhalten wir

$$\hat{J}^2 |jm\rangle = j(j+1)\hbar^2 |jm\rangle \quad (5.33)$$

$$\hat{J}_3 |jm\rangle = m\hbar |jm\rangle. \quad (5.34)$$

Bemerkung 5.1

- (i) Man sieht aus obiger Konstruktion, daß jede Darstellung zum höchsten Gewicht j **irreduzibel** ist, denn mit Hilfe der Leiteroperatoren \hat{J}_\pm kann man offensichtlich die gesamte Darstellung durchlaufen. (Es gibt also keinen nichttrivialen invarianten Unterraum.) Insbesondere kann man mit dem höchsten Gewichtsvektor $|jj\rangle$ (oder mit dem niedrigsten Gewichtsvektor $|j-j\rangle$) starten und sukzessive \hat{J}_- (bzw. \hat{J}_+) anwenden. Dann erhält man:

$$|jm\rangle = \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} \left(\frac{\hat{J}_-}{\hbar}\right)^{j-m} |jj\rangle \quad (5.35)$$

$$|jm\rangle = \sqrt{\frac{(j-m)!}{(2j)!(j+m)!}} \left(\frac{\hat{J}_+}{\hbar}\right)^{j+m} |j,-j\rangle. \quad (5.36)$$

Da jede dieser irreduziblen Darstellungen endlich-dimensional ist, ist die Einschränkung des Drehimpulsoperators \hat{J} auf jeden irreduziblen Darstellungsraum ein **beschränkter** Operator.

- (ii) Jede endlich-dimensionale, irreduzible Darstellung T der Lie-Algebra $su(2)$ auf einem Vektorraum \mathcal{H} ist zu einer der obigen höchsten Gewichtsdarstellungen isomorph: Da \hat{L}_3 als endlich-dimensionaler, selbstadjungierter Operator diagonalisierbar ist, finden wir eine Orthonormalbasis aus Eigenvektoren. Wir wählen einen Eigenvektor ψ zum größten Eigenwert und betrachten den invarianten Unterraum \mathcal{H}_1 , der von den Vektoren $\hat{L}_+^n \psi$, $n = 0, 1, 2, \dots$ aufgespannt wird. Die Einschränkung von T auf \mathcal{H}_1 liefert offenbar eine der obigen höchsten Gewichtsdarstellungen. Da T irreduzibel ist, gilt $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}$.
- (iii) Wir berechnen die Wirkung der Leiteroperatoren auf die Eigenvektoren $|jm\rangle$: Da $\hat{J}_\pm |jm\rangle$ der Eigenvektor von \hat{J}_3 zum Eigenwert $(m \pm 1)\hbar$ ist, gilt:

$$\hat{J}_\pm |jm\rangle = c_\pm |j, m \pm 1\rangle.$$

Seien die $|jm\rangle$ nun normiert, $\langle j'm' | jm\rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm}$, dann folgt:

$$\begin{aligned} |c_\pm|^2 &= \langle mj | \hat{J}_\mp \hat{J}_\pm |jm\rangle \\ &= \langle mj | \left(\hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 \mp \hbar \hat{J}_3 \right) |jm\rangle \\ &= (j(j+1) - m(m \pm 1)) \hbar^2, \end{aligned}$$

d.h.: bis auf eine Phase (die wir gleich 1 setzen) erhalten wir:

$$\hat{J}_\pm |jm\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \hbar |j, m \pm 1\rangle. \quad (5.37)$$

(iv) Wir geben die Matrixelemente von \hat{J} in der Basis der Eigenvektoren $|jm\rangle$ an (siehe Hausaufgabe):

$$\begin{aligned}\langle m'j | \hat{J}_1 jm \rangle &= \frac{\hbar}{2} (\delta_{m',m+1} + \delta_{m',m-1}) \sqrt{j(j+1) - mm'} \\ \langle m'j | \hat{J}_2 jm \rangle &= \frac{\hbar}{2i} (\delta_{m',m+1} - \delta_{m',m-1}) \sqrt{j(j+1) - mm'} \\ \langle m'j | \hat{J}_3 jm \rangle &= \hbar \delta_{m'm} \cdot m \\ \langle m'j | \hat{J}^2 jm \rangle &= \hbar^2 \delta_{m'm} \cdot j(j+1).\end{aligned}$$

Insbesondere erhalten wir für $j = 1$:

$$\begin{aligned}\langle m'1 | \hat{J}_1 1m \rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}, & \langle m'1 | \hat{J}_2 1m \rangle &= \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \\ \langle m'1 | \hat{J}_3 1m \rangle &= \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, & \langle m'1 | \hat{J}^2 1m \rangle &= 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

(v) Bezüglich der Eigenwerte j liegt offensichtlich $(2j+1)$ -fache Entartung vor, d.h. nach der Messung von \hat{J}^2 liegt der Zustandsvektor im $(2j+1)$ -dimensionalen Eigenraum. Man spricht in diesem Zusammenhang mitunter von "Richtungsentartung". Mißt man nun zusätzlich \hat{J}_3 , so wird diese Entartung aufgehoben, wir messen einen der Eigenwerte $m\hbar$. Man spricht von "Richtungsquantelung". Nach dieser Messung hat der Zustandsvektor (reiner Zustand) die Richtung des entsprechenden $|jm\rangle$.

5.3 Der Bahndrehimpuls

Wir behandeln den Spezialfall des Bahndrehimpulses, definiert durch Gleichung (5.1),

$$\hat{L} = \hat{x} \times \hat{p}.$$

Natürlich findet die im letzten Abschnitt entwickelte Theorie Anwendung, wir haben also

$$\hat{L}^2 |lm\rangle = l(l+1)\hbar^2 |lm\rangle, \quad \hat{L}_3 |lm\rangle = m\hbar |lm\rangle. \quad (5.38)$$

Der Eigenwert l heißt Bahndrehimpulsquantenzahl und m heißt magnetische Quantenzahl. Wir gehen über zu Kugelkoordinaten,

$$x_1 = r \cos \varphi \sin \theta, \quad x_2 = r \sin \varphi \sin \theta, \quad x_3 = r \cos \theta.$$

In diesen Koordinaten haben die Komponenten von \hat{L} die folgende Form (siehe Hausaufgabe):

$$\begin{aligned}\hat{L}_1 &= i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_2 &= i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_3 &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}.\end{aligned}$$

Daraus ergibt sich

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right).$$

Wir wollen im weiteren die Eigenfunktionen $|lm\rangle$ in der Ortsdarstellung finden. Dazu bezeichnen wir

$$f_{lm}(\vec{x}) := \langle \vec{x} | lm \rangle.$$

Dann gilt

$$\langle \vec{x} | \hat{L}_i | lm \rangle = \langle \vec{x} | \hat{L}_i \int d^3x' |x'\rangle \langle x' | lm \rangle = \langle x | \hat{L}_i | x \rangle \langle \vec{x} | lm \rangle \equiv \langle x | \hat{L}_i | x \rangle f_{lm}(\vec{x}).$$

Die Größen $\langle x | \hat{L}_i | x \rangle$ sind die Komponenten des Bahndrehimpulses in der Ortsdarstellung. Sofern dies nicht zu Mißverständnissen führen kann, schreiben wir im weiteren dafür vereinfachend wieder \hat{L}_i .

Da sowohl die \hat{L}_i als auch \hat{L}^2 nicht von der Radialkoordinate r abhängen, sind die Eigenfunktionen f_{lm} als Funktionen auf der Einheitssphäre zu betrachten. Wir schreiben dafür $(\varphi, \theta) \mapsto f_{lm}(\varphi, \theta)$. Verwenden wir nun obige Formeln für die Drehimpulskomponenten in der Ortsdarstellung, so erhalten wir die folgenden Differentialgleichungen für die Eigenfunktionen:

$$\left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + l(l+1) \right\} f_{lm}(\varphi, \theta) = 0 \quad (5.39)$$

$$\left(i \frac{\partial}{\partial \varphi} + m \right) f_{lm}(\varphi, \theta) = 0. \quad (5.40)$$

Nach Separation der Variablen erhalten wir für \hat{L}_3 die Gleichung

$$\left(i \frac{\partial}{\partial \varphi} + m \right) \Phi_m(\varphi) = 0.$$

Die Lösung dieser Gleichung lautet

$$\Phi_m(\varphi) = c e^{im\varphi}.$$

Wir müssen natürlich fordern, daß Φ_m eindeutig bestimmt sei, d.h.:

$$\Phi_m(\varphi) = \Phi_m(\varphi + 2\pi).$$

Wir folgern, daß die magnetische Quantenzahl m **ganzzahlig** sein muß. Damit muß natürlich auch l **ganzzahlig** sein. Nach Normierung erhalten wir:

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}. \quad (5.41)$$

Wir suchen nun nach gemeinsamen Eigenfunktionen f_{lm} für (5.39) und (5.40) mit dem folgenden Ansatz:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Theta_l^m(\theta) e^{im\varphi}.$$

Einsetzen dieses Ansatzes in (5.39) liefert:

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \Theta_l^m(\theta) \right) + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta_l^m(\theta) = 0. \quad (5.42)$$

Die Y_l^m heißen **Kugelflächenfunktion** und die Θ_l^m heißen **Kugelfunktionen**. Um diese zu berechnen, verwenden wir wieder die Methode der Leiteroperatoren. Wir bezeichnen

$$\hat{L}_{\pm} := \hat{L}_1 \pm i\hat{L}_2.$$

Natürlich gilt

$$\hat{L}_+ |ll\rangle = 0.$$

Aus den Formeln für die Komponenten \hat{L}_i in Kugelkoordinaten erhalten wir:

$$\hat{L}_\pm = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (5.43)$$

und damit

$$\hat{L}_+ Y_l^l(\theta, \varphi) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}} e^{i(l+1)\varphi} \left(\frac{d\Theta_l^l(\theta)}{d\theta} - l \cot \theta \Theta_l^l(\theta) \right) = 0. \quad (5.44)$$

Die Differentialgleichung für die Kugelfunktion zum höchsten Gewicht l hat also die Form

$$\frac{d\Theta_l^l(\theta)}{d\theta} = l \cot \theta \Theta_l^l(\theta).$$

Ihre Lösung lautet

$$\Theta_l^l(\theta) = c_l \sin^l \theta.$$

Es sind noch die Normierungskonstanten zu bestimmen:

$$\int_0^\pi |\Theta_l^l(\theta)|^2 \sin \theta d\theta = |c_l|^2 \int_0^\pi \sin^{2l+1} \theta d\theta = |c_l|^2 \frac{2^{2l+1} l!^2}{(2l+1)!} = 1,$$

also

$$c_l = (-1)^l \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}}.$$

Nun können wir (5.35) verwenden, um aus den Eigenfunktionen $|ll\rangle$ die $|lm\rangle$ zu bestimmen,

$$|lm\rangle = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}} \left(\frac{\hat{L}_-}{\hbar} \right)^{l-m} |ll\rangle.$$

Dies liefert:

$$\Theta_l^m(\theta) e^{im\varphi} = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}} \left(\frac{\hat{L}_-}{\hbar} \right)^{l-m} \Theta_l^l(\theta) e^{il\varphi}$$

und n -fache Anwendung von \hat{L}_- ergibt unter Verwendung von (5.43):

$$\Theta_l^m(\theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} \sin^{2l} \theta. \quad (5.45)$$

Bemerkung 5.2

(i) Die **Legendre–Polynome** sind folgendermaßen definiert:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Mit diesen sind die **zugeordneten Legendre–Polynome** assoziiert:

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x), \quad m = 0, 1, \dots, l$$

$$P_l^{-m}(x) = \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x).$$

(Bei manchen Autoren steht in diesen Definitionen der Faktor $(-1)^m$ auf der rechten Seite der Gleichungen.)

Setzen wir $x = \cos \theta$, so ergibt sich:

$$P_l^m(\cos \theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sin^m \theta \frac{d^{l+m}}{d(\cos \theta)^{l+m}} (\sin^{2l} \theta)$$

und damit

$$\Theta_l^m(\theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta)$$

$$\Theta_l^{-m}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta),$$

mit $0 \leq m \leq l$. Die Kugelfunktionen sind also, bis auf Normierungskonstanten, mit den zugeordneten Legendre-Polynomen identisch.

(ii) Wir machen einige Bemerkungen zu Symmetrien der Kugelflächenfunktionen. Man berechnet leicht:

$$Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_1^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

Wir betrachten die Betragsquadrate $|Y_l^m|^2$:

	Symmetriotyp	Symmetrie
$ Y_0^0 ^2 = \frac{1}{4\pi}$	s	Kugelsymmetrie
$ Y_1^{\pm 1} ^2 = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta$	p_x, p_y	Rotationssymmetrie um die z -Achse
$ Y_1^0 ^2 = \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta$	p_z	Rotationssymmetrie um die z -Achse

(iii) Man zeigt: Die Kugelflächenfunktionen bilden ein vollständiges Orthonormalsystem im $L^2(S^2)$:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \, Y_l^{m*}(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta^{mm'}$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta', \varphi') = \frac{\delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi')}{\sin \theta},$$

d.h., man kann beliebige Funktionen f auf S^2 nach ihnen entwickeln:

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_l^m Y_l^m(\theta, \varphi).$$

5.4 Der Spin

Der erste experimentelle Hinweis für die Existenz eines Eigendrehimpulses ergab sich aus dem **Stern–Gerlach–Versuch** (1921/22), siehe Abb. 5.2. Ein Strahl von Silberatomen (Silber besitzt ein $5s$ -Valenzelektron) mit definierter Geschwindigkeit fliegt durch ein stark inhomogenes Magnetfeld transversal zu den Feldlinien. Man beobachtet eine Aufspaltung des Strahls in zwei Teilstrahlen.

Auf der Basis dieses Experiments formulierten Goudsmit und Uhlenbeck 1925 eine **Hypothese**: Jedes Elektron besitzt einen **Eigendrehimpuls** (oder **Spin**) \vec{S} von der Größe $\frac{1}{2}\hbar$, dem ein **magnetisches Moment**

$$\vec{\mu}_s = g_s \frac{e}{2m_e c} \vec{S}$$

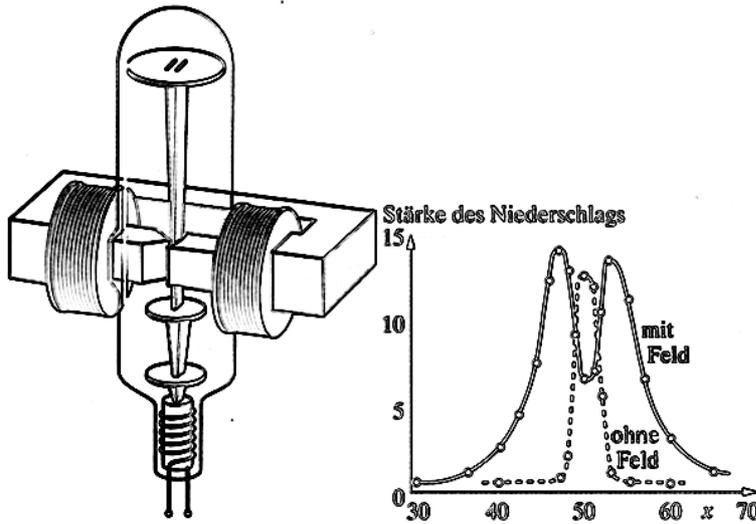


Abbildung 5.2: Schematischer Aufbau eines Stern-Gerlach-Versuchs (links) und Niederschlagsdichte auf dem Schirm (rechts)

zugeordnet ist. Dabei ist $g_s = 2(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \dots)$ die **gyromagnetische Konstante**³ und $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,04}$ die Feinstrukturkonstante.

Wir versuchen, obiges Experiment im Rahmen der klassischen Elektrodynamik zu erklären: Das magnetische Dipolmoment eines geladenen Teilchens mit Masse m_e , Ladung e und Bahndrehimpuls \vec{L} beträgt

$$\vec{\mu} = \frac{e}{2m_e c} \vec{L}$$

und die Wechselwirkungs-Energie zwischen dem Dipol und dem äußeren Magnetfeld \vec{B} ist

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}.$$

Damit ist die Kraft, die auf den Dipol wirkt, gegeben durch

$$\vec{F} = -\nabla \left(-\vec{\mu} \cdot \vec{B} \right) = \frac{e}{2m_e c} \vec{L} \nabla \vec{B}.$$

Wir können für den Stern-Gerlach-Versuch (in guter Näherung) annehmen, daß nur B_3 und $\frac{\partial}{\partial z} B_3$ verschieden von Null sind. Dies liefert eine Kraft in Richtung des Magnetfeldes:

$$F_3 = \frac{e}{2m_e c} L_3 \frac{\partial}{\partial z} B_3.$$

(Wir bemerken, daß nur ein **inhomogenes** Feld eine nichtverschwindende Kraft ergibt.) Klassisch betrachtet, kann F_3 aber zwischen allen Werten im Intervall

$$\left(\frac{e}{2m_e c} |L_3| \frac{\partial}{\partial z} B_3, -\frac{e}{2m_e c} |L_3| \frac{\partial}{\partial z} B_3 \right)$$

stetig variieren, d.h. die klassische Elektrodynamik liefert keine Erklärung für obiges Phänomen. **Quantenmechanisch** betrachtet, ist der Drehimpuls des Teilchens gequantelt, d.h. wir erhalten

$$\langle F_3 \rangle = \frac{e\hbar}{2m_e c} m \left\langle \frac{\partial}{\partial z} B_3 \right\rangle, \quad m = -l, \dots, l.$$

³ $g_s = 2$ ist der klassische, von Einstein und de Haas (1915) angegebene Wert. Im Rahmen der QED wurde dieser Wert von Robi (1947) und Schwinger (1948) präzisiert.

Für das Valenzelektron des Silberatoms im Grundzustand gilt aber $l = 0$. Wäre also nur der Bahndrehimpuls für das Phänomen relevant, so dürfte es weder eine Ablenkung, noch eine Aufspaltung des Strahls geben. Wir folgern: Es muß – in Übereinstimmung mit der Goudsmit/Uhlenbeck-Hypothese – einen zusätzlichen, inneren Drehimpuls \hat{S} des Elektrons geben. An die Stelle des Bahndrehimpulses \hat{L} tritt dann der Gesamtdrehimpuls

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}.$$

Für $l = 0$ und die beiden möglichen Eigenwerte $s = \pm \frac{1}{2}\hbar$ des Spins \hat{S} erhalten wir dann in der Tat eine Aufspaltung des Strahls, entsprechend der ablenkenden Kraft

$$\langle F_3 \rangle = \pm \frac{e\hbar}{2m_e c} \left\langle \frac{\partial}{\partial z} B_3 \right\rangle.$$

Bemerkung 5.3

- (i) Für Silberatome im historischen Stern–Gerlach–Versuch gilt: Für die Wechselwirkung mit dem Magnetfeld ist das $5s$ -Leuchtelektron verantwortlich, die restlichen Elektronen bilden eine kugelsymmetrische Ladungsverteilung. Die Tatsache, daß anstelle eines einzelnen Elektrons ein neutrales Atom verwendet wurde, ist vorteilhaft, denn die Ablenkkraft ist klein im Vergleich zur Lorentzkraft, die auf ein freies, geladenes Elektron wirken würde.
- (ii) Protonen und Neutronen haben auch Spin $\frac{1}{2}$, ihr magnetisches Moment ist aber viel kleiner, z.B. $\mu_N = 5,050\,786\,6(17) \times 10^{-27}$ J/T. Durch die starke Wechselwirkung der Quarkkonstituenten erhält man ein großes intrinsisches magnetisches Moment. Dies führt zu einer starken Modifikation der gyromagnetischen Konstante. Für das Proton hat man $g_s^P = (2 + 3,59)$.
- (iii) Wir geben eine Liste mit den Spinquantenzahlen wichtiger Elementarteilchen an:

Leptonen ($e, \nu_e, \mu, \nu_\mu, \tau, \nu_\tau$): $\frac{1}{2}$

Mediatoren (Gluon, Photon, W^\pm, Z^0): 1

Baryonen: $\begin{cases} p, n, \Lambda, \Sigma^\pm, \Sigma^0, \Xi^0, \Xi^-, \Lambda_c^+ : & \frac{1}{2} \\ \Delta, \Sigma^*, \Xi^*, \Omega^- : & \frac{3}{2} \end{cases}$

Pseudoskalare Mesonen ($\pi^\pm, \pi^0, K^\pm, K^0, \bar{K}^0, \eta, \dots$): 0

Vektormesonen ($\rho, K^*, \omega, \phi, D^*, \dots$): 1

- (iv) Die obige Formel für das Bohrsche Magneton, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$, wurde im CGS-System aufgeschrieben. Man erhält als Zahlenwert $\mu_B = 9,274\,015\,4(31) \times 10^{-21}$ erg/G. Im SI-System hat man $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ und als Zahlenwert $\mu_B = 9,274\,015\,4(31) \times 10^{-24}$ J/T.

Wir kommen zur **theoretischen Beschreibung** eines Teilchens mit Spin. Dies ist ein Beispiel für ein zusammengesetztes System. Hat man zwei kinematisch unabhängige Systeme und will sie als **ein** Quantensystem auffassen, so bildet man das **Tensorprodukt der Hilberträume** dieser Untersysteme und definiert die Wirkung der Observablen der Untersysteme auf diesem Tensorprodukt auf geeignete Weise.⁴

Seien \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 Hilberträume und seien zwei Zustände $\varphi \in \mathcal{H}_1$ und $\psi \in \mathcal{H}_2$ gegeben. Wir definieren die Anti-Bilinearform $\varphi \otimes \psi$ auf $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ durch:

$$(\varphi \otimes \psi)(h_1, h_2) := \langle h_1 | \varphi \rangle \langle h_2 | \psi \rangle, \quad (5.46)$$

für alle $h_1 \in \mathcal{H}_1, h_2 \in \mathcal{H}_2$. Der Vektor $\varphi \otimes \psi$ heißt **Tensorprodukt** der Vektoren φ und ψ .

Sei \mathcal{E} der lineare Raum der **endlichen Linearkombinationen** von Elementen dieser Form. Wir definieren

$$\langle \varphi \otimes \psi | \varphi' \otimes \psi' \rangle = \langle \varphi | \varphi' \rangle \langle \psi | \psi' \rangle \quad (5.47)$$

⁴Ausführlich werden wir uns mit diesem Konzept zu Beginn von Teil II befassen.

und dehnen diese Gleichung auf endliche Linearkombinationen solcher Elemente aus. Man zeigt leicht, daß damit ein **Skalarprodukt** auf \mathcal{E} definiert wird. Damit ist \mathcal{E} ein Prähilbertraum. Die Vervollständigung von \mathcal{E} im Sinne dieses Skalarproduktes heißt **Tensorprodukt der Hilberträume** \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 und wird mit $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ bezeichnet.

Seien \hat{A}_1 und \hat{A}_2 Observable in den Teilsystemen. Wir definieren das **Tensorprodukt der Observablen** \hat{A}_1 und \hat{A}_2 durch

$$(\hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2)|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle := \hat{A}_1|\varphi\rangle \otimes \hat{A}_2|\psi\rangle \quad (5.48)$$

und Fortsetzung (zunächst auf \mathcal{E} und dann auf ganz $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$).

Bemerkung 5.4

i) Die Anti-Linearität der Bilinearform (5.46) folgt aus der Antilinearität des Skalarproduktes, z.B.

$$(\varphi \otimes \psi)(\alpha h_1 + \beta h'_1, h_2) = \langle \alpha h_1 + \beta h'_1 | \varphi \rangle \langle h_2 | \psi \rangle = (\alpha^* \langle h_1 | \varphi \rangle + \beta^* \langle h'_1 | \varphi \rangle) \langle h_2 | \psi \rangle.$$

ii) Seien $\{e_k^{(1)}\}$ und $\{e_k^{(2)}\}$ vollständige Orthonormalsysteme in \mathcal{H}_1 bzw. \mathcal{H}_2 . Dann ist $\{e_k^{(1)} \otimes e_k^{(2)}\}$ offensichtlich ein vollständiges Orthonormalsystem in $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Daraus folgt: Sind \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 endlich-dimensional, dann gilt

$$\dim(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2) = \dim(\mathcal{H}_1) \cdot \dim(\mathcal{H}_2).$$

iii) Im Sinne von (5.48) wird jeder Observablen eines Untersystems, etwa der Observablen \hat{A} des Untersystems \mathcal{H}_1 , durch $\hat{A} \otimes \mathbf{1}$ eine Observable in $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ zugeordnet.

Wenden wir dieses Konzept auf ein Teilchen mit Spin s an, so erhalten wir den folgenden Zustandsraum:

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^{2s+1}. \quad (5.49)$$

Die erste Komponente ist der wohlbekannte Hilbertraum des Teilchens "ohne Spin". Daß der Hilbertraum des Spins \mathbb{C}^{2s+1} ist, folgt aus der Theorie des Drehimpulses. Offensichtlich gilt

$$L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^{2s+1} = \underbrace{L^2(\mathbb{R}^3) \oplus L^2(\mathbb{R}^3) \oplus \dots \oplus L^2(\mathbb{R}^3)}_{(2s+1)\text{-mal}},$$

d.h. Elemente aus \mathcal{H} können folgendermaßen aufgefaßt werden:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_{2s+1} \end{pmatrix} \equiv \psi_1 \otimes \vec{e}_1 + \dots + \psi_{2s+1} \otimes \vec{e}_{2s+1}, \quad (5.50)$$

wobei $\psi_i \in L^2(\mathbb{R}^3)$, für alle $i = 1, \dots, 2s+1$, und $\{\vec{e}_i\}$ die Standardbasis in \mathbb{C}^{2s+1} ist. Der Vektor $\psi \in \mathcal{H}$ heißt **Spinor** oder **Spinorfeld**. Da \mathbb{C}^{2s+1} der $2s+1$ -dimensionale irreduzible Darstellungsraum zum Drehimpuls s ist, trägt auch \mathcal{H} die $(2s+1)$ -dimensionale irreduzible Darstellung der $su(2)$.

Für Elektronen mit Spin $\frac{1}{2}$ haben wir

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}.$$

In der bra-ket-Schreibweise $|sm_s\rangle$ von Abschnitt 5.3 haben wir für $s = \frac{1}{2}$ die Vektoren

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \quad |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

als Basis im Darstellungsraum \mathbb{C}^2 . Wir definieren den **Spinoperator** für Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ durch

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}. \quad (5.51)$$

Dann gilt natürlich

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{S}_k$$

und, in Übereinstimmung mit der Theorie des Drehimpulses,

$$\begin{aligned} \hat{S}_3 |\tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2}\rangle &= \pm\tfrac{1}{2}\hbar |\tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2}\rangle, \\ \hat{S}^2 |\tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2}\rangle &= \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2} + 1)\hbar^2 |\tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2}\rangle = \tfrac{3}{4}\hbar^2 |\tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2}\rangle. \end{aligned}$$

Wir definieren den **Gesamtdrehimpuls** eines Elektrons durch

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}. \quad (5.52)$$

Im Sinne von obiger Bemerkung ist \hat{J} als Operator im Tensorprodukt $L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^{2s+1}$ folgendermaßen aufzufassen:

$$\hat{J} = \hat{L} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \hat{S}.$$

Natürlich gilt

$$[\hat{L}_i, \hat{S}_k] = 0.$$

Damit haben wir für \hat{J} die **gleichen Vertauschungsregeln** wie für \hat{L} bzw. \hat{S} . \hat{J} ist also in der Tat ein wohldefinierter Drehimpuls. Im nächsten Abschnitt werden wir die Frage beantworten, welche Eigenwerte \hat{J} für vorgegebene Eigenwerte von \hat{L} und \hat{S} haben kann.

Abschließend machen wir noch eine Bemerkung zur dynamischen Beschreibung von Teilchen mit Spin. Betrachtet man die Bewegung in einem Potential, welches den Spin “nicht sieht”, dann erhalten wir zwei (oder, für höheren Spin, mehrere) entkoppelte Schrödinger-Gleichungen für die einzelnen L^2 -Komponenten des Spinorfeldes. Diese Verallgemeinerung ist trivial.

Nichttriviale Effekte treten auf, wenn man etwa die Bewegung eines Teilchens mit Spin im äußeren elektromagnetischen Feld betrachtet. Dann kommt es zu einer nichttrivialen Spin-Feld-Kopplung. Ein Beispiel dafür haben wir zu Beginn des Abschnittes gesehen. Nun ist das elektromagnetische Feld natürlich ein relativistisches Phänomen und deshalb sollte eine konsistente Behandlung dieser Problematik im Rahmen der **relativistischen Quantentheorie** erfolgen. Mit dieser werden wir uns im Teil II befassen. Dort werden wir die folgende **Pauli-Gleichung** als nichtrelativistischen Grenzfall der relativistischen **Dirac-Gleichung** herleiten:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ \frac{1}{2m} (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2 - \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + eA_0 \right\} \psi, \quad (5.53)$$

für das Spinorfeld $\psi = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}$. Dabei bezeichnen A_0 und \vec{A} die Null- und die Vektorkomponente des elektromagnetischen Viererpotentials und $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ ist das zugehörige Magnetfeld. Wir erkennen natürlich den Kopplungsterm $\vec{\sigma} \cdot \vec{B}$ vom Beginn des Abschnittes wieder und sehen, daß dieser “nicht-diagonal” als Operator im Spinorraum wirkt. Dies führt zu einer nichttrivialen Kopplung der Komponenten des Spinorfeldes.

5.5 Addition von Drehimpulsen

Seien \hat{J}_1 und \hat{J}_2 Drehimpulse von zwei kinematisch unabhängigen Untersystemen 1 und 2 (z.B. die Bahndrehimpulse von zwei verschiedenen Systemen oder der Spin und der Bahndrehimpuls eines Systems), d.h.:

$$[\hat{J}_{1i}, \hat{J}_{2j}] = 0, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (5.54)$$

Wir betrachten den Operator des Gesamtdrehimpulses

$$\hat{J} := \hat{J}_1 + \hat{J}_2$$

und untersuchen dessen **Eigenwertproblem**.

Nach (5.5) und (5.54) kommutieren $\{\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1z}, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{2z}\}$ paarweise miteinander, d.h.: sie besitzen gemeinsame Eigenvektoren

$$|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle.$$

Diese spannen das $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$ -dimensionalen Tensorprodukt

$$\mathcal{H}^{(j_1, j_2)} = \mathcal{H}^{j_1} \otimes \mathcal{H}^{j_2}$$

der Darstellungsräume \mathcal{H}^{j_1} und \mathcal{H}^{j_2} zu den Drehimpulsen j_1 bzw. j_2 auf. Es gilt:

$$\begin{aligned} \hat{J}_i^2 |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle &= j_i(j_i + 1) \hbar^2 |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \\ \hat{J}_{iz} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle &= m_i \hbar |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle, \end{aligned}$$

für $i = 1, 2$.

Da offenbar

$$[\hat{J}, \hat{J}_i^2] = 0, \quad i = 1, 2,$$

gilt, bilden die Operatoren $\{\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z\}$ ebenfalls ein System kommutierender Observabler. Wir bezeichnen ihre gemeinsamen Eigenvektoren mit $|j_1 j_2 j m\rangle$. Es gilt:

$$\begin{aligned} \hat{J}_i^2 |j_1 j_2 j m\rangle &= j_i(j_i + 1) \hbar^2 |j_1 j_2 j m\rangle, \\ \hat{J}^2 |j_1 j_2 j m\rangle &= j(j + 1) \hbar^2 |j_1 j_2 j m\rangle \\ \hat{J}_z |j_1 j_2 j m\rangle &= m \hbar |j_1 j_2 j m\rangle, \end{aligned}$$

für $i = 1, 2$.

Wir lösen nun das folgende Problem: **Für fixierte j_1 und j_2 bestimmen wir die möglichen Werte für j und m , einschließlich der auftretenden Entartungen.**

Offenbar gilt

$$\hat{J}_z |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = \hbar(m_1 + m_2) |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle,$$

d.h.: jeder der Vektoren $|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$ ist Eigenvektor von \hat{J}_z . Damit kommen als Eigenwerte von \hat{J}_z in $\mathcal{H}^{(j_1, j_2)}$ alle möglichen Summen $m_1 + m_2$, mit $m_1 = j_1, j_1 - 1, \dots, -j_1$ und $m_2 = j_2, j_2 - 1, \dots, -j_2$ in Frage. Für das Spektrum $\sigma(\hat{J}_z)$ von \hat{J}_z folgt daraus:

$$\sigma(\hat{J}_z) \subseteq \{j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, -j_1 - j_2\}. \quad (5.55)$$

Da $m = j, j - 1, \dots, -j$ gilt, sind damit auch alle möglichen Eigenwerte j von \hat{J}^2 bekannt. Wir müssen nun die Entartungen bestimmen. Dazu bezeichnen wir den Unterraum von $\mathcal{H}^{(j_1, j_2)}$ zum Eigenwert m mit $\mathcal{H}_m^{(j_1, j_2)}$. Wir finden die Dimension von $\mathcal{H}_m^{(j_1, j_2)}$, also die Zahl der Zustände $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$, für die $m_1 + m_2 = m$ gilt. Diese lesen wir aus Abb. 5.3 ab: Die Zahl $n(m)$ der Zustände mit $m = m_1 + m_2$ ist gleich der Anzahl der Punkte auf der durch m definierten Geraden. Dies liefert natürlich $n(m) = 0$, für $m > j_1 + j_2$ und für $m < -j_1 - j_2$. Für das *rechte Dreieck*, definiert durch $j_1 - j_2 \leq m \leq j_1 + j_2$, gilt $n(m = j_1 + j_2) = 1$, $n(m = j_1 + j_2 - 1) = 2, \dots$, also $n(m) = j_1 + j_2 + 1 - m$. Im *Parallelogramm*, definiert durch $0 \leq |m| \leq |j_1 - j_2|$, ist $n(m)$ offensichtlich konstant, in unserem Beispiel ($j_2 < j_1$) gilt

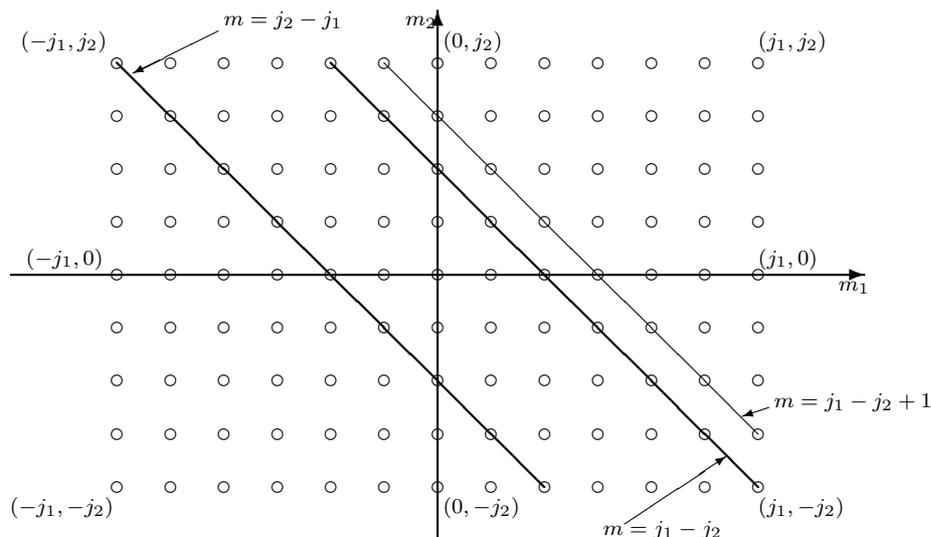


Abbildung 5.3: Das Gitter der Vektoren $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ für $j_1 = 6$ und $j_2 = 4$ sowie die Geraden $m = m_1 + m_2 = \text{const}$ für $m = j_2 - j_1, j_1 - j_2$ und $j_1 - j_2 + 1$.

$n(m) = \dim \mathcal{H}^{j_2} = 2j_2 + 1$. Im *linken Dreieck*, definiert durch $-j_1 - j_2 \leq m \leq j_2 - j_1$, haben wir $n(m) = j_1 + j_2 + 1 + m$. Wir fassen zusammen:

$$n(m) = \dim \mathcal{H}_m^{(j_1, j_2)} = \begin{cases} 0 & \text{für } |m| > j_1 + j_2 \\ j_1 + j_2 + 1 - |m| & \text{für } |j_1 - j_2| \leq |m| \leq j_1 + j_2 \\ \min(2j_1 + 1, 2j_2 + 1) & \text{für } 0 \leq |m| \leq |j_1 - j_2|. \end{cases} \quad (5.56)$$

Nun bemerken wir, daß mit $|j_1 j_2 j m\rangle \in \mathcal{H}^{(j_1, j_2)}$ auch alle Vektoren $|j_1 j_2 j m'\rangle$, mit $m' = -j, -j+1, \dots, j$, in $\mathcal{H}^{(j_1, j_2)}$ liegen, denn dieser Raum ist **invariant** unter der Wirkung der Leiteroperatoren

$$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_{1\pm} + \hat{J}_{2\pm} \equiv \hat{J}_{1\pm} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \hat{J}_{2\pm}.$$

Bezeichne $N(j)$ die Entartung des Eigenwertes j , d.h.: es existieren $N(j)$ linear unabhängige Folgen

$$|j_1 j_2 j m; \alpha\rangle, \quad \alpha = 1, \dots, N(j),$$

von jeweils $2j + 1$ Eigenvektoren des Gesamtdrehimpulses. (Diese liegen alle in $\mathcal{H}^{(j_1, j_2)}$ und gehen durch Anwendung von \hat{J}_{\pm} auseinander hervor.) D.h., zu jedem festen Eigenwert m existieren für jedes $j \geq |m|$ genau $N(j)$ linear unabhängige Vektoren

$$\{|j_1 j_2 j m; 1\rangle, \dots, |j_1 j_2 j m; N(j)\rangle\}$$

in denen m auftritt. Also gilt:

$$n(m) = \sum_{j \geq |m|} N(j) = N(|m|) + N(|m| + 1) + \dots$$

und damit

$$N(j) = n(j) - n(j + 1).$$

Verwenden wir dies, so liefert (5.56):

$$N(j) = n(j) - n(j + 1) = \begin{cases} (j + 1) - j = 1 & \text{für } |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \\ 0 & \text{für } j < |j_1 - j_2|. \end{cases} \quad (5.57)$$

Der Entartungsgrad $N(j)$ kann also nur 0 oder 1 sein.

Wir fassen zusammen:

- i) Für gegebene Werte j_1 und j_2 sind die möglichen Eigenwerte j des Gesamtdrehimpulses \hat{J} aus der Menge

$$\{|j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2\}.$$

- ii) Die Eigenwerte j sind **nicht entartet** ($N(j) = 1$), d.h. für jedes j existiert genau eine Serie von Eigenvektoren $|j_1 j_2 j m\rangle$, mit $m = -j, \dots, j - 1, j$. Man berechnet

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j=j_1+j_2} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1).$$

Da die Eigenvektoren $|j_1 j_2 j m\rangle$ außerdem alle linear unabhängig sind, bilden sie ebenfalls eine Basis in $\mathcal{H}^{(j_1, j_2)}$.

- iii) Wir formulieren obiges Resultat in der Sprache der Gruppentheorie: Das Tensorprodukt $D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)}$ der irreduziblen Darstellungen $D^{(j_1)}$ und $D^{(j_2)}$ der $su(2)$ wurde in seine **irreduziblen Komponenten** zerlegt,

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = \bigoplus_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D^{(j)}. \quad (5.58)$$

- iv) Da sowohl die $\{|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle\}$ als auch die $\{|j_1 j_2 j m\rangle\}$ Basen in $\mathcal{H}^{(j_1, j_2)}$ bilden, gilt:

$$|j_1 j_2 j m\rangle = \sum_{m_1, m_2} C(j_1, j_2, j; m_1, m_2, m) |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle, \quad (5.59)$$

mit

$$C(j_1, j_2, j; m_1, m_2, m) = \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle.$$

Diese Koeffizienten heißen **Clebsch–Gordan–Koeffizienten**. Sie werden in Teil II, bei der Analyse von Systemen mit Symmetrien, eine wichtige technische Rolle spielen.

Kapitel 6

Schrödingergleichung mit Zentralpotential. Gebundene Zustände

Sei V ein Zentralpotential, d.h. V hängt nur vom Abstand $r = |\vec{x}|$ vom Ursprung ab, $V(\vec{x}) = V(r)$. Wichtige Beispiele sind:

freies Teilchen	$V(r) = 0$
Coulomb-Potential	$V(r) = \frac{q_1 q_2}{r}$
Yukawa-Potential	$V(r) = g \frac{e^{-\lambda r}}{r}$
Potentialtopf	$V(r) = \begin{cases} -V_0 \mathbf{1} & \text{für } r < r_0 \\ 0 & \text{für } r > r_0 \end{cases}$
isotroper harmonischer Oszillator	$V(r) = \frac{m\omega^2}{2} r^2$

Wie wir aus der klassischen Mechanik wissen, entstehen solche Potentiale typischerweise, wenn ein Zweikörperproblem vorliegt und die Schwerpunktsbewegung ausreduziert wird. Die klassische Hamiltonfunktion der Relativbewegung hat dann die Gestalt

$$H = \frac{1}{2\mu} \vec{p}^2 + V(r)$$

mit der reduzierten Masse μ . Eine analoge Reduktion kann man auf dem Niveau der Quantenmechanik durchführen. Wir machen dazu später eine Bemerkung. Als Hamiltonoperator der Relativbewegung erhält man natürlich den obiger Hamiltonfunktion entsprechenden Operator der Quantentheorie:

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \hat{p}^2 + V(\hat{r}).$$

In der Ortsdarstellung haben wir:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(r). \quad (6.1)$$

Da $V(r)$ offensichtlich kugelsymmetrisch ist, ist es sinnvoll, zu Kugelkoordinaten überzugehen. Dann erhält man

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + V(r), \quad (6.2)$$

wobei

$$\hat{p}_r := \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \equiv \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \quad (6.3)$$

den **Radialimpuls** bezeichnet.

Wir rechnen zunächst formal mit diesem Differentialoperator (und seinem Quadrat) und diskutieren Fragen der Selbstadjungiertheit im nächsten Abschnitt. Die folgenden Rechnungen sind sicher sinnvoll, wenn wir uns die auftretenden Operatoren in Anwendung auf Funktionen aus $C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ vorstellen. Offenbar gilt

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r} (\hat{x} \cdot \hat{p}) + (\hat{p} \cdot \hat{x}) \frac{1}{r} \right)$$

und

$$[\hat{r}, \hat{p}_r] = i\hbar.$$

Wir zeigen (6.2) unter Verwendung der Heisenbergschen Vertauschungsrelationen $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$. Es gilt:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 &= \epsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k \epsilon_{ilm} \hat{x}_l \hat{p}_m \\ &= (\delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}) \hat{x}_j \hat{p}_k \hat{x}_l \hat{p}_m \\ &= \delta_{jl} \delta_{km} \hat{x}_j (\hat{x}_l \hat{p}_k - i\hbar \delta_{lk}) \hat{p}_m - \delta_{jm} \delta_{kl} (\hat{p}_k \hat{x}_j + i\hbar \delta_{kj}) \hat{x}_l \hat{p}_m \\ &= r^2 \hat{p}^2 - 2i\hbar (\hat{x} \cdot \hat{p}) - (\hat{p} \cdot \hat{x}) (\hat{x} \cdot \hat{p}) \\ &= r^2 \hat{p}^2 - (\hat{x} \cdot \hat{p})^2 + i\hbar (\hat{x} \cdot \hat{p}), \end{aligned}$$

d.h., wir erhalten die folgende Operator-Identität:

$$\hat{L}^2 = r^2 \hat{p}^2 - (\hat{x} \cdot \hat{p})^2 + i\hbar (\hat{x} \cdot \hat{p}). \quad (6.4)$$

Da aber $\sum x_i \frac{\partial}{\partial x_i} = r \frac{\partial}{\partial r}$ gilt, folgt

$$\vec{x} \cdot \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \sum_i x_i \frac{\partial}{\partial x_i} = r \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} = r p_r + i\hbar,$$

also

$$(\hat{x} \cdot \hat{p})^2 - i\hbar (\hat{x} \cdot \hat{p}) = (\hat{x} \cdot \hat{p} - i\hbar) (\hat{x} \cdot \hat{p}) = r \hat{p}_r (r \hat{p}_r + i\hbar) = r \hat{p}_r (r \hat{p}_r + [\hat{r}, \hat{p}_r]) = r^2 \hat{p}_r^2.$$

Daraus lesen wir

$$\hat{L}^2 = r^2 \hat{p}^2 - r^2 \hat{p}_r^2,$$

also

$$\hat{p}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{L}^2}{r^2} \quad (6.5)$$

ab. Damit haben wir (6.2) bewiesen.

6.1 Separation der Variablen. Die Radialgleichung

Wir wissen, daß $[\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0$ gilt. Da die Drehimpulskomponenten \hat{L}_i außerdem keine Ableitungen nach r enthalten, (siehe Abschnitt 5.3), folgt

$$[\hat{L}_i, \hat{H}] = 0,$$

d.h., die Operatoren $\{\hat{H}, \hat{L}_3, \hat{L}^2\}$ bilden ein System kommutierender Observabler. Daraus folgern wir, daß die Darstellung (6.2) des Hamiltonoperators sehr nützlich ist, denn das Eigenwertproblem für den Drehimpuls haben wir bereits gelöst.

Wir suchen also nach Lösungen der Schrödingergleichung, aufgeschrieben in Kugelkoordinaten:

$$\left[\frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] \psi(r, \varphi, \theta) = E \psi(r, \varphi, \theta). \quad (6.6)$$

Für die gemeinsamen Eigenvektoren im Ortsraum verwenden wir folgenden Ansatz:

$$\psi_{Elm}(\vec{x}) = R_{Elm}(r) Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (6.7)$$

Die Funktionen $R_{Elm}(r)$ heißen **radiale Wellenfunktionen** und $Y_l^m(\theta, \varphi)$ sind die aus Abschnitt 5.3 bekannten Kugelflächenfunktionen. Die Zerlegung (6.7) heißt **Partialwellenzerlegung**. Dieser Zerlegung entspricht natürlich eine Zerlegung des Hilbertraumes. Zunächst haben wir

$$L^2(\mathbb{R}^3) = L^2(\mathbb{R}_+, r^2 dr) \otimes L^2(S^2, d\Omega). \quad (6.8)$$

Aus der Theorie des Drehimpulses wissen wir aber, daß die $\{Y_l^m\}$ ein vollständiges Orthonormalsystem bilden, deshalb gilt

$$L^2(S^2, d\Omega) = \bigoplus_{l=0}^{\infty} D^l,$$

wobei D^l der Eigenraum zum Drehimpuls l ist. Daraus folgt:

$$L^2(\mathbb{R}^3) = \bigoplus_{l=0}^{\infty} \mathcal{H}^l, \quad \mathcal{H}^l = L^2(\mathbb{R}_+, r^2 dr) \otimes D^l. \quad (6.9)$$

Setzen wir den Ansatz (6.7) in die Schrödingergleichung (6.6) ein, so ergibt sich:

$$\left[\frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] R_{Elm}(r) = E R_{Elm}(r). \quad (6.10)$$

Der erste Term repräsentiert die radiale kinetische Energie, der zweite die Rotationsenergie und $V(r)$ stellt eine zentrifugale Barriere dar. Für jedes l wirkt der Operator

$$h_l = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r)$$

als $h_l \otimes \mathbf{1}_{D^l}$ im Hilbertraum \mathcal{H}^l . Da

$$\hat{p}_r^2 = -\frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r$$

gilt, erhalten wir

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] R_l = E R_l. \quad (6.11)$$

Die Gleichung (6.10) ist **unabhängig** von der magnetischen Quantenzahl m , also ist der Eigenwert E $(2l+1)$ -fach entartet. Deswegen schreiben wir im weiteren $R_{El}(r)$ bzw. noch einfacher $R_l(r)$. Unter Verwendung der Kugelsymmetrie ist es also gelungen, das Problem auf ein **eindimensionales Problem** zu reduzieren. Man kann also hoffen, daß allgemeine, in Kapitel 4 getroffene Aussagen zu 1-dimensionalen Problemen hier verwendbar sind. Dies trifft im Prinzip zu, allerdings haben wir es hier nicht mit einem System auf ganz \mathbb{R} , sondern auf dem \mathbb{R}_+ zu tun. Es muß also das Verhalten der Operatoren und Wellenfunktionen im Ursprung sorgfältig diskutiert werden.

Dazu ist es nützlich, zur folgenden, modifizierten Wellenfunktion überzugehen:

$$u_l(r) := rR_l(r). \quad (6.12)$$

Dann hat die Radialgleichung die Gestalt:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] u_l(r) = E u_l(r). \quad (6.13)$$

Offensichtlich wird durch Gleichung (6.12) ein unitärer Operator

$$U : L^2(\mathbb{R}_+, r^2 dr) \rightarrow L^2(\mathbb{R}_+, dr) \quad (6.14)$$

definiert, der wegen (6.8) durch

$$(\tilde{U}\psi)(r, \varphi, \theta) := r\psi(r, \varphi, \theta) \quad (6.15)$$

zu einem unitären Operator

$$\tilde{U} : L^2(\mathbb{R}^3) \rightarrow L^2(\mathbb{R}_+, dr) \otimes L^2(S^2, d\Omega) \quad (6.16)$$

fortgesetzt wird. Damit wurde das Problem auf die Untersuchung der in der Radialgleichung (6.13) auftretenden Hamiltonoperatoren

$$U h_l U^{-1} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r)$$

reduziert. Wir bemerken:

$$U \hat{p}_r^2 U^{-1} = -\hbar^2 \frac{d^2}{dr^2}.$$

Wir diskutieren Gleichung (6.13):

- i) Da physikalische Zustände normierbar sein müssen, muß $\|\psi_{Elm}\|^2 < \infty$ gelten. Wegen der Orthogonalität der $\{Y_l^m\}$ gilt aber

$$\|\psi_{Elm}\|^2 = \int_0^\infty dr r^2 |R_l(r)|^2 = \int_0^\infty dr |u_l(r)|^2 = \|u_l\|^2.$$

Wir müssen also fordern

$$\|u_l\|^2 = \int_0^\infty dr |u_l(r)|^2 < \infty. \quad (6.17)$$

- ii) Für die meisten Anwendungen gilt: für $r \rightarrow 0$ überwiegt die kinetische Rotationsenergie $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$ gegenüber $V(r)$ und E , d.h. Gleichung (6.13) vereinfacht sich in der Nähe der Null zu

$$\frac{d^2}{dr^2} u_l(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} u_l(r).$$

Diese Gleichung hat zwei linear unabhängige Lösungen, die wir mit dem Ansatz $u_l(r) = Cr^\alpha$ finden. Es folgt: $\alpha(\alpha-1) = l(l+1)$, also gilt ist $\alpha = (l+1)$ oder $\alpha = -l$. Dies liefert

$$u_l(r) = C_1 r^{l+1} + C_2 r^{-l}.$$

Für $l \neq 0$ ist der Term $C_2 r^{-l}$ wegen der Normierungsbedingung (6.17) zu verwerfen, d.h.:

$$u_l(r) = C r^{l+1}.$$

Für $l = 0$ kann wegen der Normierungsbedingung $Cr^{-l} = \text{const}$ verwendet werden. Aber dann ist $R_l(r) \sim \frac{1}{r}$ und Anwendung von $-\Delta$ produziert die Delta-Distribution $\delta(\vec{x})$. Enthält also V keine Delta-Distribution, so muß $C = 0$ gelten. Wir erhalten also die folgende Bedingung:

$$u_l(0) = 0. \quad (6.18)$$

In der diesen Abschnitt abschließenden Bemerkung werden tiefere funktionalanalytische Gründe für diese Regularitätsforderung angegeben.

Zusammenfassung: Es werden Lösungen gesucht, die

$$\int_0^\infty dr |u_l(r)|^2 < \infty, \quad u_l(0) = 0 \quad (6.19)$$

erfüllen. Dies kann man auch folgendermaßen formulieren. Es liegt ein eindimensionales Problem mit folgendem effektiven Potential vor:

$$U_l^{\text{eff}}(r) = \begin{cases} \infty & \text{für } r < 0 \\ U_l(r) = U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} & \text{für } r > 0 \end{cases},$$

mit $U(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r)$. (Die unendliche Potentialbarriere bei $r = 0$ verhindert ein "Eindringen der Wellenfunktion" in das Gebiet $r < 0$, sie realisiert also die Bedingung (6.18)). Nun kann man die allgemeine Theorie 1-dimensionalen Systeme, wie in Kapitel 4 kurz diskutiert (und zitiert), mit kleinen Modifikationen anwenden. Wir machen zunächst einige qualitative Bemerkungen und vertiefen diese mathematisch etwas am Ende des Abschnitts. Wir erinnern an die Bezeichnungen (4.12):

$$U_0 = \inf U(x) \quad \text{und} \quad U_\pm = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} U(x).$$

Wichtige Beispielklassen:

- i) Gilt $U_l(r) \rightarrow \infty$ für $r \rightarrow \infty$ und erfüllt U_l gewisse zusätzliche Regularitätsforderungen¹, so folgt

$$U_{l-} = \infty, \quad U_{l0} = \inf U_l^{\text{eff}}(r), \quad U_{l+} = \infty.$$

Wir haben dann ein rein diskretes, nichtentartetes Spektrum im Intervall (U_{l0}, ∞) . Dies trifft z.B. auf den 3-dimensionalen harmonischen Oszillator zu.

Für jedes l numeriert man die Eigenwerte mit der **Radialquantenzahl** n , wir schreiben also E_{nl} für die Eigenwerte des Schrödingeroperators (6.6). Im allgemeinen sind die E_{nl} alle verschieden und, für fixiertes l , natürlich $(2l+1)$ -fach entartet – wie schon früher bemerkt. Für spezielle Potentiale kann es geschehen, daß bestimmte Eigenwerte E_{nl} zusammenfallen, man spricht dann von einer **zufälligen Entartung**. Dies passiert beim Wasserstoffatom und beim 3-dimensionalen isotropen harmonischen Oszillator.

- ii) Gilt $U_l(r) \rightarrow 0$ für $r \rightarrow \infty$ und erfüllt U_l gewisse zusätzliche Regularitätsforderungen², so folgt:

$$U_{l-} = \infty, \quad U_{l0} = \inf U_l^{\text{eff}}(r), \quad U_{l+} = 0.$$

D. h., für jedes feste l liegt ein nichtentartetes kontinuierliches Spektrum im Intervall $(0, \infty)$ vor. Gilt $U_{l0} < 0$, so haben wir außerdem ein Punktspektrum im Intervall $(U_{l0}, 0)$.

Jeder Wert E aus dem kontinuierlichen Spektrum des Schrödingeroperators (6.6) ist unendlichfach entartet, denn es gibt für jeden möglichen Wert l des Drehimpulses eine verallgemeinerte Eigenfunktion zum positiven, verallgemeinerten Eigenwert E .

Abschließend machen wir einige mathematische Bemerkungen:

Bemerkung 6.1

- i) Der Operator \hat{p}_r hat zunächst als natürlichen Definitionsbereich $C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$, auf dem er symmetrisch ist. Man kann ihn zu einem symmetrischen Operator auf ganz \mathbb{R}^3 fortsetzen, vorausgesetzt, man definiert den Definitionsbereich geeignet. Es muß gelten:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \psi | \hat{p}_r \psi \rangle - \langle \psi | \hat{p}_r \psi \rangle^* \\ &= \int (\psi^* p_r \psi - (p_r \psi)^* \psi) d^3x \\ &= \frac{\hbar}{i} \int d\Omega \int_0^\infty dr \left[\frac{\partial}{\partial r} |r\psi|^2 \right]. \end{aligned}$$

¹ $U_l \in L_{loc}^1(0, \infty)$, $U_l(r) > -\frac{g}{r^2}$, $g < \frac{1}{4}$, für $r \rightarrow 0$, siehe [Galindo/Pascual] I, S. 230

²siehe [Galindo/Pascual] I, S. 230, Formel (6.38)

Wir folgern: Da ψ quadratintegrabel ist, verschwindet $r\psi$ für $r \rightarrow \infty$. Es muß also

$$\lim_{r \rightarrow 0} r\psi(\vec{x}) = 0 \quad (6.20)$$

erfüllt sein. Auf diesem Bereich ist \hat{p}_r symmetrisch. Dieser Operator besitzt aber **keine selbstadjungierte Erweiterung**: Dazu hat man die Defekt-Indizes

$$n_{\pm} = \dim\{\ker(i \mp \hat{p}_r^{\dagger})\},$$

vgl. Abschnitt 3.6, zu berechnen, also nach Lösungen von

$$\hat{p}_r^{\dagger}\psi = \pm i\hbar\psi$$

im Hilbertraum zu suchen. Man erhält für $+$ keine und für $-$ abzählbar viele Lösungen, also $n_+ = 0$ und $n_- = \infty$. Da n_+ und n_- verschieden sind, existiert keine selbstadjungierte Fortsetzung, d. h., der Operator \hat{p}_r repräsentiert **keine Observable**.

ii) In den Hamiltonoperator geht nur das Quadrat

$$\hat{p}_r^2 = -\frac{\hbar^2}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \quad (6.21)$$

ein. Dieser Operator ist auf $C_0^{\infty}(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ symmetrisch und wegen

$$\langle \psi | \hat{p}_r^2 \psi \rangle = \|\hat{p}_r \psi\|^2 \geq 0, \quad \psi \in C_0^{\infty}(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}),$$

positiv. Damit existiert eine in gewissem Sinne ausgezeichnete selbstadjungierte Fortsetzung von \hat{p}_r^2 , die **Fortsetzung im Sinne von Friedrichs**.³ Man beweist, daß der Definitionsbereich dieser selbstadjungierten Erweiterung folgendermaßen aussieht:

$$D(\hat{p}_r^2) = \{\psi \in L^2[0, \infty) : \psi, \psi' \in AC[0, \infty); \psi', \psi'' \in L^2[0, \infty); \psi(0) = 0\}, \quad (6.22)$$

wobei $AC[0, \infty)$ den Raum der absolut-stetigen Funktionen⁴ auf $[0, \infty)$ bezeichnet. Die **Observable** \hat{p}_r^2 ist, streng genommen, genau in diesem Sinne zu verstehen. Wir sehen, daß die Regularitätsforderung $\psi(0) = 0$ durch diese selbstadjungierte Erweiterung erzwungen wird. Physikalisch gesprochen, entspricht diese Wahl der Erweiterung der Forderung, daß \hat{p}_r^2 für Zustände mit $l = 0$ mit dem Operator \hat{p}^2 übereinstimmt.

iii) Man fragt sich natürlich, unter welchen Bedingungen an das Potential U (bzw. V) die Operatoren h_l selbstadjungiert sind. Dazu gibt es eine reichhaltige mathematische Literatur. Wir verweisen auf [Galindo/Pascual], Teil I, S226 ff., wo man, neben einer Liste wichtiger Klassen gutartiger Potentiale, Hinweise auf die Spezialliteratur findet. Wir verweisen auch auf [Reed/Simon], Bd II, Satz X.11. Für alle Potentiale, mit denen wir uns im weiteren befassen werden, ist die Selbstadjungiertheit garantiert.

6.2 Freies Teilchen und kugelsymmetrischer Potentialtopf

Sei $V(r) = V_0 = \text{const.}$ Wir setzen für $E > V_0$

$$k = \sqrt{\frac{2\mu(E - V_0)}{\hbar^2}}.$$

³vgl. [Reed/Simon], Bd II, Satz X 23

⁴ $f \in AC[0, \infty)$ genau dann, wenn eine meßbare Funktion g existiert, mit $f(x) - f(0) = \int_0^x g(t)dt$, $x \in [0, \infty)$. Dann ist f f.ü. differenzierbar und es gilt $f' = g$ f.ü..

Dann hat die Radialgleichung (6.13) die Form

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) u_l(r) = 0$$

und nach der Skalierung $\varrho = k \cdot r$ erhalten wir:

$$\left(\frac{d^2}{d\varrho^2} - \frac{l(l+1)}{\varrho^2} + 1 \right) u_l(\varrho) = 0. \quad (6.23)$$

Für $l = 0$ haben wir als linear unabhängige Lösungen

$$u_0^{(1)}(\varrho) = \sin \varrho, \quad u_0^{(2)}(\varrho) = -\cos \varrho.$$

Wir bemerken, daß die erste Lösung für $r = 0$ regulär ist, die zweite dagegen nicht. Für $l \neq 0$ setzen wir

$$u_l(\varrho) = \varrho^{l+1} \chi_l(\varrho).$$

Man berechnet

$$u_l''(\varrho) = \frac{l(l+1)}{\varrho^2} \varrho^{l+1} \chi_l(\varrho) + \frac{2(l+1)}{\varrho} \varrho^{l+1} \chi_l'(\varrho) + \varrho^{l+1} \chi_l''(\varrho).$$

Einsetzen in (6.23) liefert

$$\chi_l''(\varrho) + \frac{2(l+1)}{\varrho} \chi_l'(\varrho) + \chi_l(\varrho) = 0. \quad (6.24)$$

Setzen wir nun

$$\chi(\varrho) = \frac{1}{\varrho} \chi_l'(\varrho)$$

und differenzieren Gleichung (6.24) noch einmal nach ϱ , so ergibt sich:

$$\chi''(\varrho) + \frac{2(l+2)}{\varrho} \chi'(\varrho) + \chi(\varrho) = 0. \quad (6.25)$$

Dies ist die Differentialgleichung (6.24) für χ_{l+1} . Wir haben also

$$\chi_{l+1}(\varrho) = \frac{1}{\varrho} \chi_l'(\varrho)$$

und damit

$$\chi_l(\varrho) = \left(\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \chi_0(\varrho). \quad (6.26)$$

Wir erhalten also die folgenden linear unabhängigen Lösungen:

$$\chi_l^{(1)}(\varrho) = \left(\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \frac{\sin \varrho}{\varrho}, \quad \chi_l^{(2)}(\varrho) = - \left(\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \frac{\cos \varrho}{\varrho}. \quad (6.27)$$

Wir erinnern an dieser Stelle an den Zusammenhang mit der ursprünglichen Radialfunktion R_l : Wegen $\varrho^{l+1} \chi_l(\varrho) = u_l(\varrho) = \varrho R_l(\varrho)$ gilt

$$R_l(\varrho) = \varrho^l \chi_l(\varrho).$$

Wir haben damit das folgende Fundamentalsystem für die Radialfunktion R_l :

$$j_l(\varrho) := (-\varrho)^l \left(\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \frac{\sin \varrho}{\varrho}, \quad (6.28)$$

$$n_l(\varrho) := -(-\varrho)^l \left(\frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \right)^l \frac{\cos \varrho}{\varrho}. \quad (6.29)$$

Die Funktionen j_l heißen **sphärische Besselfunktionen** und die n_l heißen **sphärische Neumannfunktionen**. Die Radialgleichung hat, aufgeschrieben für R_l , die Form

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right) R_l(\rho) = 0.$$

Dies ist eine Differentialgleichung vom **Besselschen Typ**. Das folgende, zu j_l, n_l äquivalente Fundamentalsystem ist ebenfalls nützlich:

$$h_l^\pm(\rho) := \pm i (j_l \pm i n_l)(\rho) = (-\rho)^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{e^{\pm i\rho}}{\rho}. \quad (6.30)$$

Die Funktionen h_l^\pm heißen **sphärische Hankelfunktionen**. Man zeigt das folgende asymptotische Verhalten dieser Funktionen

$$\begin{aligned} j_l(kr) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{kr} \\ &\xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} \\ n_l(kr) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{\cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)}{kr} \\ &\xrightarrow{r \rightarrow 0} -(kr)^{-l-1} (2l-1)!! \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} h_l^\pm(k \cdot r) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{e^{\pm i(kr - \frac{l\pi}{2})}}{kr} \\ &\xrightarrow{r \rightarrow 0} -(kr)^{-l-1} (2l-1)!! \end{aligned}$$

Wir bemerken, daß die sphärische Besselfunktion j_l die einzige Lösung ist, die im Ursprung regulär ist.

Für $E < V_0$, ersetzen wir in den obigen Formeln k durch $i\kappa$ mit

$$\kappa = \sqrt{\frac{2\mu(V_0 - E)}{\hbar^2}}.$$

Wir bemerken, daß $h_l^+(i\kappa r)$ in diesem Falle die einzige Radialfunktion ist, die im Sinne von (6.19) im Unendlichen regulär ist. Für $r \rightarrow \infty$ gilt

$$i^l h_l^+(i\kappa r) \rightarrow \frac{e^{-\kappa r}}{\kappa r}.$$

Obige Betrachtungen liefern natürlich insbesondere die Lösung der Schrödinger-Gleichung für das **freie Teilchen** in Kugelkoordinaten, man hat einfach $V_0(r) = 0$ zu setzen. Wir erhalten:

- i) Für $E < 0$ ist die einzige im Unendlichen reguläre Lösung $h_l^+(i\kappa r)$. Diese hat aber im Ursprung einen Pol der Ordnung $l+1$. Es gibt also keine im Ursprung reguläre Lösung, d.h.: wie zu erwarten war, gibt keinen Eigenzustand mit negativer Energie.
- ii) Für $E > 0$ gibt es genau eine **reguläre** Lösung für jeden positiven Wert $E = \frac{\hbar^2}{2\mu} k^2$ und jeden Bahndrehimpuls l , nämlich die sphärische Besselfunktion j_l . Die **verallgemeinerten** Eigenvektoren des Hamilton-Operators zu diesem Eigenwert, mit Drehimpuls (l, m) , sind also der Form $Y_l^m(\theta, \varphi) j_l(kr)$. Man zeigt

$$\int_0^\infty r^2 dr j_l(kr) j_l(k'r) = \frac{2\pi}{(2k)^2} \delta(k - k').$$

Damit haben die **normierten, verallgemeinerten Eigenvektoren in der Ortsdarstellung** die folgende Form:

$$\psi_{klm}(r, \theta, \varphi) = \frac{2k}{\sqrt{2\pi}} Y_l^m(\theta, \varphi) j_l(kr). \quad (6.31)$$

Im bra-ket-Formalismus haben wir mit $\psi_{klm}(r, \theta, \varphi) = \langle \vec{x} | klm \rangle$:

$$\langle k'l'm' | klm \rangle = \delta(k' - k) \delta_{l'l} \delta_{m'm}.$$

Außerdem zeigt man die Vollständigkeitsrelation

$$\int dk \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \psi_{klm}(r, \theta, \varphi) \psi_{klm}^*(r', \theta', \varphi') = \frac{1}{r^2 \sin \theta} \delta(r - r') \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi'). \quad (6.32)$$

Damit bilden die $\{\psi_{klm}\}$ ein vollständiges Orthonormalsystem (im verallgemeinerten Sinne), d.h. wir haben eine verallgemeinerte Eigenfunktionenentwicklung (im Sinne von Abschnitt 3.4.3)

$$|\phi\rangle = \int dk \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l |klm\rangle \langle klm | \phi \rangle,$$

für $\phi \in \mathcal{S} \subset L^2(\mathbb{R}^3)$.

Die zugehörige stationäre Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung lautet:

$$\psi_{klm}(r, \theta, \varphi; t) = \frac{2k}{\sqrt{2\pi}} Y_l^m(\theta, \varphi) j_l(kr) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}. \quad (6.33)$$

Für $r \rightarrow \infty$ erhält man:

$$\psi_{klm}(r, \theta, \varphi; t) \rightarrow \frac{1}{2ikr} \left\{ e^{i(kr - \frac{l\pi}{2} - \frac{Et}{\hbar})} - e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2} + \frac{Et}{\hbar})} \right\} Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (6.34)$$

Der erste Term beschreibt eine **auslaufende** und der zweite eine **einlaufende Kugelwelle**.

Bemerkung 6.2

Da für die freie Schrödinger-Gleichung andererseits die **ebenen Wellen** $e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ verallgemeinerte Eigenfunktionen liefern, müssen diese durch die gerade gefundenen Lösungen darstellbar sein:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = \sum_{l,m} \left\{ a_{lm}(\vec{k}) j_l(kr) + b_{lm}(\vec{k}) n_l(kr) \right\} Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Aus dem Verhalten der Funktionen $e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$, j_l und n_l im Ursprung folgt, dass $b_{lm}(\vec{k}) = 0$ sein muß, d.h.:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = \sum_{l,m} a_{lm}(\vec{k}) j_l(kr) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Es sind nun nur noch die Koeffizienten a_{lm} zu bestimmen, vgl. Hausaufgabe Nr. 29. Man erhält:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \equiv e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (6.35)$$

wobei θ den Winkel zwischen \vec{k} und \vec{x} bezeichnet. Schließlich erhält man aus dem Additionstheorem

$$P_l(\cos \theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\hat{\vec{k}}) Y_{lm}(\hat{\vec{x}})$$

für Kugelflächenfunktionen die folgende **Partialwellenzerlegung einer ebenen Welle**:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\hat{k}) Y_{lm}(\hat{x}). \quad (6.36)$$

Dabei bezeichnen \hat{x} und \hat{k} die durch \vec{x} und \vec{k} definierten Vektoren auf der Einheitssphäre.

Das nächste interessante Beispiel, das man unter Verwendung obiger Resultate behandeln kann, ist der **kugelsymmetrische Potentialtopf**, definiert durch:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } r < a \\ 0 & \text{für } r > a \end{cases}$$

Dieses Beispiel wird im Seminar ausführlich diskutiert. Wir behandeln hier kurz den Fall gebundener Zustände, also $-V_0 < E < 0$:

- i) In der inneren Zone ist $k = \sqrt{\frac{2\mu(E+V_0)}{\hbar^2}}$, die reguläre Lösung lautet $A \cdot j_l(\varrho)$, $\varrho = k \cdot r$.
- ii) In der äußeren Zone haben wir $\kappa = \sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$ und die im Unendlichen reguläre Lösung lautet $B \cdot h_l^+(i\kappa r)$. Die Forderung der Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer ersten Ableitung im Punkt $r = a$ liefert:

$$\frac{1}{h_l^+(i\kappa r)} \frac{d}{dr} \Big|_{r=a} h_l^+(i\kappa r) = \frac{1}{j_l(kr)} \frac{d}{dr} \Big|_{r=a} j_l(kr).$$

Diese Bedingungen kann man unter Verwendung der Rekursionsformeln für die auftretenden Funktionen auswerten. Man erhält

$$i\kappa \frac{h_{l+1}^+(i\kappa r)}{h_l^+(i\kappa r)} = k \frac{j_{l+1}(kr)}{j_l(kr)}.$$

Speziell für $l = 0$ ergibt sich daraus

$$-\kappa a = ka \cot ka.$$

Dies ist dieselbe Gleichung wie für die gebundenen Zustände mit negativer Parität beim eindimensionalen Potentialtopf der Breite $2a$. Wie dort erläutert, kann man die Anzahl N_0 der gebundenen Zustände folgendermaßen abschätzen:

$$N_0 = \left[\frac{1}{2} + \frac{a|U_0|^{1/2}}{\pi} \right].$$

Insbesondere gibt es keine gebundenen Zustände für $|U_0|^{1/2}a < \frac{\pi}{2}$.

Der Fall $E > 0$ wird im Seminar diskutiert.

6.3 Das Coulomb-Potential – Gebundene Zustände des Wasserstoffatoms

Wir betrachten ein Atom mit positiver Kernladung $Z|e|$ und einem (vorläufig spinlosen) Elektron. (Für $Z = 1$ handelt es sich um das Wasserstoffatom, für $Z = 2$ um ein ionisiertes Heliumatom usw.) Die Wechselwirkung wird beschrieben durch das Coulomb-Potential

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

Aus Abschnitt 3.5 ist klar, daß der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V$$

selbstadjungiert auf $D(-\Delta)$ und wesentlich s.a. auf $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ ist. Da V radialsymmetrisch ist, können wir die in den letzten Abschnitten beschriebene Reduktion zu einem 1-dimensionalen Problem durchführen. Wir erhalten:

$$V_l = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2},$$

siehe Abbildung 6.1.

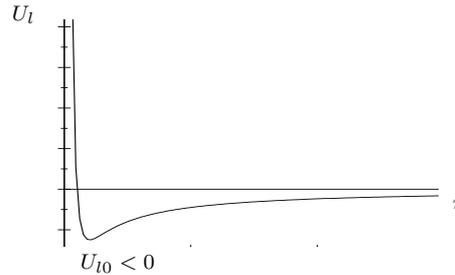


Abbildung 6.1: Das effektive Potential beim Coulombproblem

Wir haben es also mit der in Abschnitt 6.1. diskutierten Beispielklasse ii) zu tun:

$$U_{l-} = \infty, \quad U_{l0} = \inf U_l(r), \quad U_{l+} = 0.$$

D. h., für jedes feste l liegt ein nichtentartetes kontinuierliches Spektrum im Intervall $(0, \infty)$ vor. Da $U_{l0} < 0$ gilt, haben wir ein Punktspektrum im Intervall $(U_{l0}, 0)$. Mit diesem befassen wir uns in diesem Abschnitt.

Einerseits kann man zur Bestimmung des Spektrums die radiale Wellengleichung lösen, dies wird im Seminar erläutert.

Wir verwenden hier eine **zusätzliche** Symmetrie des Coulomb-Potentials. Dies erlaubt eine **rein algebraische Lösung des Eigenwertproblems**, zu der wir nun übergehen:

Diese zusätzliche Symmetrie ist verknüpft mit einer bereits aus der klassischen Mechanik bekannten Bewegungskonstante, dem Lenz-Runge-Vektor

$$\vec{F} = \vec{p} \times \vec{L} - \mu k \frac{\vec{x}}{r}.$$

Wir führen das **quantenmechanische Analogon des Lenz-Runge-Vektors** ein:

$$\hat{F} = \frac{1}{2} \left(\hat{p} \times \hat{L} - \hat{L} \times \hat{p} \right) + \mu \kappa \frac{\hat{x}}{r}, \quad \kappa = -Ze^2. \quad (6.37)$$

Man zeigt nun leicht, daß sich seine klassischen Eigenschaften sinngemäß auf das quantenmechanische Niveau übertragen. Insbesondere ist \hat{F} eine Bewegungskonstante. Es gilt:

$$[\hat{H}, \hat{L}_m] = 0, \quad (6.38)$$

$$[\hat{L}_m, \hat{F}_l] = i\hbar \epsilon_{mls} \hat{F}_s, \quad (6.39)$$

$$[\hat{H}, \hat{F}_m] = 0, \quad (6.40)$$

$$[\hat{F}_m, \hat{F}_l] = -2i\hbar \mu \hat{H} \epsilon_{mls} \hat{L}_s, \quad (6.41)$$

$$\hat{L} \cdot \hat{F} = \hat{F} \cdot \hat{L} = 0, \quad (6.42)$$

$$\hat{F}^2 = 2\mu \hat{H} \left(\hat{L}^2 + \hbar^2 \right) + \mu^2 \kappa^2. \quad (6.43)$$

Gleichung (6.38) wurde bereits im vorletzten Abschnitt gezeigt. Wir beweisen Gleichung (6.39)⁵. Wir verwenden dazu die bereits früher bewiesene Relation

$$[\hat{L}_m, \hat{V}_r] = i\hbar \epsilon_{mrs} \hat{V}_s, \quad (6.44)$$

für $\hat{V} = \hat{L}$, \hat{x} , \hat{p} , siehe (5.6) und (5.7), sowie die offensichtliche Identität

$$[\hat{a}, \hat{b}\hat{c}] = \hat{b}[\hat{a}, \hat{c}] + [\hat{a}, \hat{b}]\hat{c}.$$

Wir zerlegen $\hat{F} = \hat{X} + \hat{Y}$, mit $\hat{X} = \frac{1}{2}(\hat{p} \times \hat{L} - \hat{L} \times \hat{p})$ und $\hat{Y} = \mu\kappa \frac{\hat{x}}{r}$, und berechnen:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_m, \hat{X}_l] &= \frac{1}{2}[\hat{L}_m, \epsilon_{ljk}(\hat{p}_j \hat{L}_k - \hat{L}_j \hat{p}_k)] \\ &= \frac{1}{2} \epsilon_{ljk} \left\{ [\hat{L}_m, \hat{p}_j] \hat{L}_k + \hat{p}_j [\hat{L}_m, \hat{L}_k] - [\hat{L}_m, \hat{L}_j] \hat{p}_k - \hat{L}_j [\hat{L}_m, \hat{p}_k] \right\} \\ &= \frac{1}{2} i\hbar \epsilon_{ljk} \left\{ \epsilon_{mjr} \hat{p}_r \hat{L}_k - \epsilon_{kmr} \hat{p}_j \hat{L}_r - \epsilon_{mjr} \hat{L}_r \hat{p}_k + \epsilon_{kmr} \hat{L}_j \hat{p}_r \right\} \\ &= \frac{1}{2} i\hbar \left\{ (\delta_{lm} \delta_{kr} - \delta_{lr} \delta_{km}) \hat{p}_r \hat{L}_k - (\delta_{lm} \delta_{jr} - \delta_{lr} \delta_{jm}) \hat{p}_j \hat{L}_r \right. \\ &\quad \left. - (\delta_{lm} \delta_{kr} - \delta_{lr} \delta_{km}) \hat{L}_r \hat{p}_k + (\delta_{lm} \delta_{jr} - \delta_{lr} \delta_{jm}) \hat{L}_j \hat{p}_r \right\} \\ &= \frac{1}{2} i\hbar \left\{ \hat{p}_m \hat{L}_l - \hat{p}_l \hat{L}_m + \hat{L}_l \hat{p}_m - \hat{L}_m \hat{p}_l \right\} \\ &= \frac{1}{2} i\hbar \epsilon_{mlr} \epsilon_{rjk} (\hat{p}_j \hat{L}_k - \hat{L}_j \hat{p}_k) = i\hbar \epsilon_{mlr} \hat{X}_r. \end{aligned}$$

Zur Berechnung des zweiten Kommutators verwenden wir, daß die Komponenten von \hat{L}_m mit jeder Funktion von r kommutieren, also gilt

$$[\hat{L}_m, \hat{Y}_l] = \mu\kappa [\hat{L}_m, \frac{\hat{x}_l}{r}] = \frac{\mu\kappa}{r} [\hat{L}_m, \hat{x}_l] = i\hbar \epsilon_{mlj} \frac{\mu\kappa \hat{x}_j}{r} = i\hbar \epsilon_{mlj} \hat{Y}_j.$$

Der Beweis der Identitäten (6.40) – (6.43) ist zunächst Hausaufgabe (Nr. 32 und Nr. 33). Später wird der Beweis im Skriptum erscheinen.

Wir definieren

$$\hat{A}_k := \frac{1}{2} \left(\hat{L}_k + \frac{\hat{F}_k}{\sqrt{-2\mu\hat{H}}} \right) \hat{P}, \quad \hat{B}_k := \frac{1}{2} \left(\hat{L}_k - \frac{\hat{F}_k}{\sqrt{-2\mu\hat{H}}} \right) \hat{P}, \quad (6.45)$$

wobei \hat{P} der Projektor auf die negativen Spektralwerte des Hamiltonoperators \hat{H} bezeichnet. Auf diesem Bereich ist $(-2\mu\hat{H})^{-\frac{1}{2}}$ eine wohldefinierte Operatorfunktion. Da der Hamiltonoperator \hat{H} mit \hat{L} und \hat{F} kommutiert, kommutiert er natürlich auch mit \hat{A} und \hat{B} . Aus den obigen Vertauschungsrelationen erhalten wir:

$$[\hat{A}_k, \hat{A}_j] = i\hbar \epsilon_{kjm} \hat{A}_m \quad (6.46)$$

$$[\hat{B}_k, \hat{B}_j] = i\hbar \epsilon_{kjm} \hat{B}_m \quad (6.47)$$

$$[\hat{A}_k, \hat{B}_j] = 0 \quad (6.48)$$

$$\hat{A}^2 = \hat{B}^2 = -\frac{1}{4} \left(\hbar^2 + \frac{\mu\kappa^2}{2\hat{H}} \right) \hat{P}. \quad (6.49)$$

⁵Im Teil II werden wir sehen, daß \hat{F} ein Vektoroperator der Drehgruppe ist, daraus folgt diese Identität automatisch

Die Beweise von (6.46)–(6.48) sind trivial, z.B:

$$\begin{aligned} [\hat{A}_k, \hat{A}_j] &= \frac{1}{4} \left[\hat{L}_k + \frac{\hat{F}_k}{\sqrt{-2\mu\hat{H}}}, \hat{L}_j + \frac{\hat{F}_j}{\sqrt{-2\mu\hat{H}}} \right] \hat{P} \\ &= \frac{1}{4} \left\{ i\hbar \epsilon_{kjl} \hat{L}_l + 2i\hbar \epsilon_{kjl} \frac{\hat{F}_l}{\sqrt{-2\mu\hat{H}}} + \frac{1}{-2\mu\hat{H}} (-2i\hbar) \mu \hat{H} \epsilon_{kjl} \hat{L}_l \right\} \hat{P} \\ &= \frac{i\hbar}{2} \epsilon_{kjl} \left(\hat{L}_l + \frac{\hat{F}_l}{\sqrt{-2\mu\hat{H}}} \right) \hat{P} = i\hbar \epsilon_{kjl} \hat{A}_l. \end{aligned}$$

Auch (6.49) folgt, unter Verwendung von (6.42), sofort:

$$\begin{aligned} \hat{A}_k \hat{A}_k &= \frac{1}{4} \left(\hat{L}^2 + \frac{\hat{F}^2}{-2\mu\hat{H}} \right) \hat{P} = \frac{1}{4} \left\{ \hat{L}^2 + \frac{1}{-2\mu\hat{H}} \left(2\mu\hat{H}\hat{L}^2 + 2\mu\hat{H}\hbar^2 + \mu^2\kappa^2 \right) \right\} \hat{P} \\ &= -\frac{1}{4} \left(\hbar^2 + \frac{\mu\kappa^2}{2\hat{H}} \right) \hat{P}. \end{aligned}$$

Aus (6.49) ergibt sich die folgende, äußerst nützliche Darstellung des Hamiltonoperators, eingeschränkt auf die negativen Spektralwerte:

$$\hat{H}\hat{P} = -\frac{\mu\kappa^2}{2} \frac{1}{\hbar^2\hat{P} + 2\left(\hat{A}^2 + \hat{B}^2\right)}. \quad (6.50)$$

Bemerkung 6.3

- (i) Die Formeln (6.46)–(6.48) zeigen, daß \hat{A} und \hat{B} jeweils die Lie-Algebra $su(2)$ erzeugen und wegen (6.48) erzeugen \hat{A} und \hat{B} zusammen die direkte Summe

$$su(2) \oplus su(2) \cong so(4),$$

d.h. wir haben als **Symmetriegruppe** auf Quantenniveau die $SO(4)$ gefunden. Die Eigenwerte von $\hat{A}^2 = \hat{B}^2$ sind jeweils $j(j+1)\hbar^2$, $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$. Damit erhalten wir mit der Bezeichnung $n = 2j + 1$ aus (6.50) die folgenden Eigenwerte des Hamiltonoperators:

$$E_n = -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{\mu c^2 \alpha^2 Z^2}{2n^2}, \quad (6.51)$$

mit $n = 1, 2, 3, \dots$, (α bezeichnet die Feinstrukturkonstante.) Dies ist die **Balmersche Formel**.

- (ii) Wir kehren zurück zum System kommutierender Observabler $\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_3\}$ und bezeichnen deren gemeinsame Eigenvektoren mit $|nlm\rangle$. Wir werten die Identität (6.43) auf diesen Eigenvektoren aus:

$$\begin{aligned} \hat{F}^2 |nlm\rangle &= \left\{ -2\mu \frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2 n^2} (\hbar^2 l(l+1) + \hbar^2) + \mu^2 \kappa^2 \right\} |nlm\rangle \\ &= \mu^2 \kappa^2 \left(1 - \frac{l^2 + l + 1}{n^2} \right) |nlm\rangle. \end{aligned}$$

Da \hat{F}^2 ein positiver Operator ist, muß $n^2 \geq l^2 + l + 1$ gelten. Damit sind die möglichen Werte für l :

$$l = 0, 1, \dots, n-1.$$

- (iii) Wir berechnen die Entartung des Eigenwertes E_n des Hamiltonoperators:
Für jede feste n haben wir zunächst $l = 0, 1, \dots, n-1$, also zerfällt der Unterraum $\mathcal{H}_n \subset \mathcal{H}$ zum Eigenwert E_n in

$$\mathcal{H}_n = \bigoplus_{l=0}^{n-1} \mathcal{H}_l.$$

Aber für jedes feste l haben wir eine $(2l+1)$ -fache Entartung, denn $m = -l, \dots, l$, also

$$\mathcal{H}_l = \bigoplus_{m=-l}^l \mathcal{H}_m^l.$$

Wir erhalten also

$$\mathcal{H}_n = \bigoplus_{l=0}^{n-1} \bigoplus_{m=-l}^l \mathcal{H}_m^l \quad \text{und} \quad \mathcal{H} = \bigoplus_{n=1}^{\infty} \mathcal{H}_n. \quad (6.52)$$

Die Entartung des Eigenwertes E_n ist gleich der Dimension von \mathcal{H}_n . Wir erhalten:

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

d.h., die Entartung ist n^2 .

- (iv) Aus obiger Diskussion ergibt sich das in Abb. 6.2 skizzierte Punktspektrum von \hat{H} .

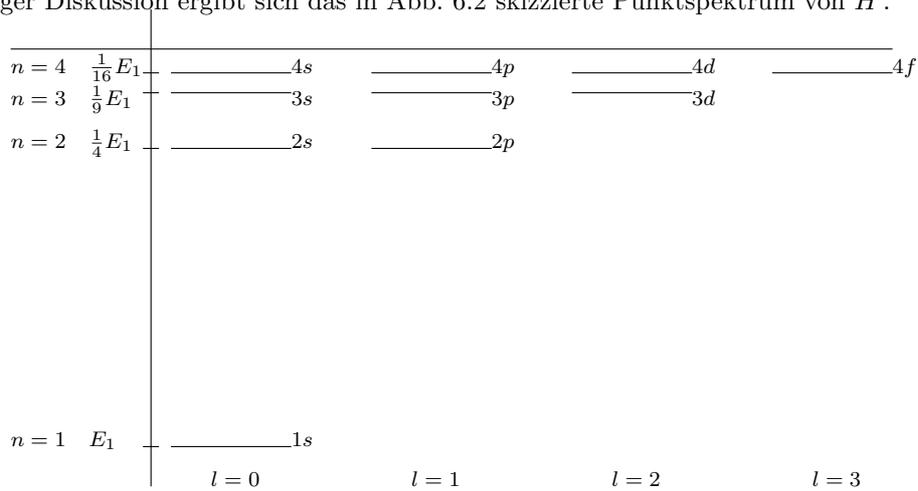


Abbildung 6.2: Spektrum des Wasserstoffatoms

Die Atomspektren entstehen durch Übergänge zwischen den diskreten Niveaus. Mit der Bezeichnung

$$E_n = 2\pi\hbar\nu_n$$

erhalten wir:

$$\nu_{n_1 n_2} = \frac{\mu(\alpha c Z)^2}{4\pi\hbar} \cdot \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right), \quad n_1 > n_2. \quad (6.53)$$

Oft verwendet man die Bezeichnung

$$E_1(Z=1) = -\frac{\mu(\alpha c)^2}{2} \equiv -1\text{Ry},$$

wobei Ry für Rydberg steht. Dann erhalten wir für die Übergänge des Wasserstoffs:

$$\nu_{n_1 n_2} = \frac{1Ry}{2\pi\hbar} \cdot \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right), \quad n_1 > n_2. \quad (6.54)$$

Dieser Formel entsprechend können die auftretenden Spektrallinien in Serien eingeteilt werden. Jede Serie entspricht einem festen n_2 und n_1 durchläuft die Werte $n_2 + 1, n_2 + 2, \dots$. Wir führen die klassischen Serien auf:

- $n_2 = 1$: Lyman-Serie
- $n_2 = 2$: Balmer-Serie (sichtbarer Bereich)
- $n_2 = 3$: Paschen-Serie
- $n_2 = 4$: Brackett-Serie
- $n_2 = 5$: Pfund-Serie

Im Experiment beobachtet man hauptsächlich Übergänge, die der **Auswahlregel** $l \rightarrow (l \pm 1)$ genügen. In Teil II werden wir diese Regel im Rahmen der Dipolnäherung beweisen.

Wir berechnen die **Eigenvektoren von \hat{H}** :

Ausgangspunkt ist die Lie-Algebra $su(2) \oplus su(2)$, erzeugt von den Operatoren (\hat{A}, \hat{B}) , mit den Vertauschungsrelationen (6.40)–(6.42) und der Identität (6.43).

Mit ihnen bilden wir ein System kommutierender Observabler

$$\left\{ \hat{A}^2, \hat{A}_3, \hat{B}_3 \right\},$$

genau wie in der Theorie des Drehimpulses. Die zugehörigen Eigenvektoren sind $|j m^A m^B\rangle$. Wegen (6.49) können wir obiges System durch $\{\hat{H}, \hat{A}_3, \hat{B}_3\}$ mit den Eigenvektoren $|n m^A m^B\rangle$, $n = 2j + 1$, ersetzen. Außerdem bilden wir die Leiteroperatoren

$$\hat{A}_\pm = \hat{A}_1 \pm i\hat{A}_2, \quad \hat{B}_\pm = \hat{B}_1 \pm i\hat{B}_2.$$

Aus der Theorie des Drehimpulses wissen wir, daß $|jjj\rangle$ der Zustand höchsten Gewichtes für das System $\{\hat{A}^2, \hat{A}_3, \hat{B}_3\}$ ist. Alle anderen Zustände erhalten wir durch Wirkung mit $\hat{A}_\pm^p \hat{B}_\pm^q$ auf den Vektor des höchsten Gewichtes. Damit ist das Problem prinzipiell gelöst.

Wir möchten natürlich Eigenfunktionen in der Ortsdarstellung und in Termen der üblichen Quantenzahlen n, l und m finden. Zu diesem Zwecke gehen wir über zu den ursprünglichen physikalischen Größen:

$$\left(\hat{A}, \hat{B} \right) \rightarrow \left(\hat{L}, \frac{\hat{F}}{\sqrt{-2\hat{H}}} \right),$$

mit $\hat{F}^2 = 2m\hat{H}(\hat{L}^2 + \hbar^2) + m^2\alpha^2$ und verwenden das System kommutierender Observabler $\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_3\}$ mit den Eigenvektoren $|nlm\rangle$. Wir bilden

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_1 \pm i\hat{L}_2, \quad \hat{F}_\pm = \hat{F}_1 \pm i\hat{F}_2$$

und suchen nach einem Zustand höchsten Gewichtes $|nl_0 m_0\rangle$, für jedes feste n . Für diesen muß gelten:

$$\hat{L}_+ |nl_0 m_0\rangle = 0 = \hat{F}_+ |nl_0 m_0\rangle.$$

Aus der bekannten Wirkung von \hat{L}_+ folgern wir, daß der Zustand höchsten Gewichtes die Gestalt $|nl_0 l_0\rangle$ hat. Es ist also die Wirkung von \hat{F}_+ auf Vektoren der Form $|nl\rangle$ zu berechnen. Aber aus der Definition (6.37) folgt sofort:

$$\hat{F}_+ = \frac{i}{2\hbar} [\hat{p}_+, \hat{L}^2] + \mu\kappa \frac{\hat{x}_+}{r}$$

und damit

$$\hat{F}_+ |nll\rangle = \frac{i}{2\hbar} \left(\hbar^2 l(l+1) - \hat{L}^2 \right) \hat{p}_+ |nll\rangle + \frac{\mu\kappa}{r} \hat{x}_+ |nll\rangle.$$

Es ist also die Wirkung von \hat{p}_+ und \hat{x}_+ auf $|nll\rangle$ zu berechnen. Wir tun dies in der Ortsdarstellung, also in der Wirkung auf die Ortswellenfunktionen

$$\langle \vec{x} |nll\rangle = R_{nl}(r) Y_l^l(\theta, \varphi) = R_{nl}(r) \sin^l \theta e^{il\varphi}.$$

Nun sind \hat{p}_+ und \hat{x}_+ in der Ortsdarstellung zu berechnen. In Kugelkoordinaten erhält man:

$$\hat{x}_+ = r \sin \theta e^{i\varphi}$$

und

$$\hat{p}_+ = \frac{\hbar}{i} e^{i\varphi} \left\{ \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\cos \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right\}.$$

Die Anwendung dieser Operatoren auf die Ortswellenfunktion liefert:

$$(\hat{x}_+ R_{nl} Y_l^l)(r, \theta, \varphi) = r R_{nl}(r) Y_{l+1}^{l+1}(\theta, \varphi) \quad (6.55)$$

und

$$(\hat{p}_+ R_{nl} Y_l^l)(r, \theta, \varphi) = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right) R_{nl}(r) Y_{l+1}^{l+1}(\theta, \varphi). \quad (6.56)$$

Wir sehen, daß der Leiteroperator \hat{F}_+ die Quantenzahl l um 1 erhöht. Damit ist $|n(n-1)(n-1)\rangle$ der gesuchte höchste Gewichtsvektor. Die Gleichung $\hat{F}_+ |n(n-1)(n-1)\rangle = 0$ hat in der Ortsdarstellung folgende Form:

$$\frac{1}{2} \left(\hbar^2 (n-1)n - \hat{L}^2 \right) \left(\frac{d}{dr} - \frac{n-1}{r} \right) R_{n(n-1)l}(r) Y_n^n(\theta, \varphi) + \mu\kappa R_{n(n-1)}(r) Y_n^n(\theta, \varphi) = 0,$$

also

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{n-1}{r} - \frac{\mu\kappa}{n\hbar^2} \right) R_{n(n-1)}(r) = 0. \quad (6.57)$$

Die Lösung (bis auf einen Normierungsfaktor) lautet:

$$R_{n(n-1)}(r) = r^{n-1} \cdot e^{\frac{\mu\kappa}{\hbar^2} \cdot \frac{r}{n}}, \quad (6.58)$$

wobei natürlich $k < 0$ ist. Der (nicht normierte) höchste Gewichtsvektor hat also die Form:

$$\langle \vec{x} |n(n-1)(n-1)\rangle = r^{n-1} e^{\frac{\mu\kappa}{\hbar^2} \cdot \frac{r}{n}} \cdot Y_{n-1}^{n-1}(\theta, \varphi). \quad (6.59)$$

Damit haben wir für jedes n den höchsten Gewichtsvektor gefunden. Alle anderen Vektoren des durch n definierten Multipletts werden durch Anwendung von \hat{L}_- und \hat{F}_- gefunden⁶. Führt man diese Rechnung aus, so erhält man in der Ortsdarstellung folgende **normierte Wellenfunktionen**:

$$\psi_{nlm}(\vec{x}) = R_{nl}(\varrho) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (6.60)$$

mit

$$R_{nl}(\varrho) = \frac{2}{r_0^{3/2} n^2} \left[\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \right]^{1/2} \varrho^l \cdot e^{-\varrho/2} L_{n-l-1}^{2l+1}(\varrho), \quad \varrho = \frac{2r}{r_0 \cdot n}. \quad (6.61)$$

Dabei ist r_0 der Bohrsche Radius⁷ und L_{n-l-1}^{2l+1} sind **Laguerre-Polynome**. Diese sind definiert durch:

$$L_n(\varrho) = \frac{1}{n!} e^\varrho \frac{d^n}{d\varrho^n} (\varrho^n e^{-\varrho}) \equiv \sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{n!}{(k!)^2 (n-k)!} \varrho^k, \quad (6.62)$$

$$L_n^k(\varrho) = (-1)^k \frac{d^k}{d\varrho^k} L_{n+k}(\varrho), \quad n, k = 0, 1, 2, \dots \quad (6.63)$$

⁶siehe z.B. [Thirring], Bd II, S.189

⁷ $r_0 = \hbar(Z\mu\alpha c)^{-1} \equiv \hbar^2(Z\mu e^2)^{-1}$, für $Z = 1$ und $\mu = m_e$ ist $r_0 = 0,529177249(24) \times 10^{-10}$ m ($\approx \frac{1}{2}$ Å)

Bemerkung 6.4

Abschließend machen wir einige Bemerkungen zu **Korrekturen**, die sich ergeben, wenn man eine genauere Beschreibung des Wasserstoffatoms verwendet.

- i) Das Wasserstoffatom ist ein 2-Körper-System, bestehend aus Kern und Elektron. Die reduzierte Masse ist gegeben durch

$$\mu = \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{m_K}},$$

wobei m_K die Kernmasse bezeichnet. Es gilt

$$1 + \frac{m_e}{m_K} = 1.00054463 \dots$$

- ii) Es gibt natürlich relativistische Korrekturen⁸. Diese liefern die **Feinstruktur**. Die im obigen nichtrelativistischen Zugang auftretende hohe Entartung wird durch diese Korrekturen aufgehoben. So spaltet sich etwa das entartete Niveau $2p$ in $2p^{3/2}$ und $2p^{1/2}$ auf, vgl. Abb. 6.3. Es gilt

$$E(p^{3/2}) - E(p^{1/2}) \sim 0,453 \times 10^{-4} \text{ eV}.$$

Diese Modifikationen der ursprünglichen Niveaus sind von der Größenordnung α^2 . Insbesondere wird im Rahmen des relativistischen Zugangs auf natürliche Weise der Spin des Elektrons mitberücksichtigt. Dies führt zu bekannten Effekten, wie dem der Spin-Bahn-Kopplung, siehe Teil II.

- iii) Berücksichtigt man die sogenannten Strahlungskorrekturen im Rahmen der Quantenelektrodynamik (Wechselwirkung des Elektrons mit dem elektromagnetischen Strahlungsfeld), so erhält man die **Lamb-Shift**, siehe Abb. 6.3. Diese Korrekturen sind von der Größenordnung $\alpha^3 \ln \alpha \sim 10^{-5} \text{ eV}$.

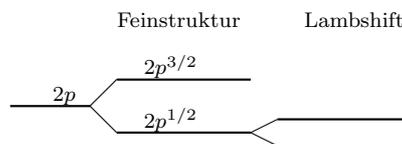


Abbildung 6.3: Aufspaltung der entarteten Energieniveaus

- iv) Die Berücksichtigung der Wechselwirkung der magnetischen Momente von Elektron und Kern liefert schließlich die **Hyperfeinstruktur**. Sie liefert Korrekturen von der Größenordnung 10^{-6} eV .

⁸siehe Teil II dieser Vorlesung

Kapitel 7

Zeitentwicklung

7.1 Der Zeitentwicklungsoperator

Wir betrachten die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle.$$

In Abschnitt 4.1 hatten wir aus der Eigenschaft

$$\frac{d}{dt} \|\psi(t)\|^2 = 0$$

von Lösungen der Schrödingergleichung die Existenz eines linearen **isometrischen** Operators $\hat{U}(t, t_0)$ gefolgert, so daß gilt

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \mathbf{1}. \quad (7.1)$$

Der **Zeitentwicklungsoperator** $\hat{U}(t, t_0)$ erfüllt offensichtlich die folgende Differentialgleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0). \quad (7.2)$$

Für den in Abschnitt 4.1 diskutierten Fall, daß \hat{H} nicht explizit zeitabhängig ist, lautet die Lösung dieser Gleichung:

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}\right).$$

Bemerkung 7.1

(i) Gleichung (7.2) ist, mit der Anfangsbedingung (7.1), äquivalent zur folgenden Integralgleichung:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \hat{U}(t', t_0). \quad (7.3)$$

(ii) Es gilt

$$\hat{U}(t_3, t_1) = \hat{U}(t_3, t_2) \hat{U}(t_2, t_1).$$

Insbesondere haben wir für $t_1 \equiv t_3 \equiv t_0$, $t_2 \equiv t$ bzw. $t_1 \equiv t_3 \equiv t$, $t_2 \equiv t_0$:

$$\hat{U}(t_0, t) \hat{U}(t, t_0) = \mathbf{1} \quad \text{bzw.} \quad \hat{U}(t, t_0) \hat{U}(t_0, t) = \mathbf{1}. \quad (7.4)$$

Wir sehen, daß der Operator $\hat{U}(t_0, t)$ links- und rechtsinvers zu $\hat{U}(t, t_0)$ ist. Damit ist \hat{U} bijektiv. Da es außerdem isometrisch ist, ist es ein **unitärer** Operator. Wegen (7.4) gilt

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}^{-1}(t_0, t) = \hat{U}^\dagger(t_0, t).$$

(iii) Für konservative Systeme haben wir

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\hat{H}\right) \equiv \hat{U}(t - t_0). \quad (7.5)$$

Die Familie $\hat{U}(t - t_0)$ von unitären Operatoren bildet eine (stark stetige) einparametrische Gruppe:

$$\hat{U}(\tau_1 + \tau_2) = \hat{U}(\tau_1)\hat{U}(\tau_2) \quad \hat{U}(0) = 1, \quad \hat{U}^\dagger(\tau) = \hat{U}(-\tau).$$

Nach dem Theorem von Stone¹ existiert, umgekehrt, für jede stark stetige einparametrische Gruppe von unitären Operatoren ein selbstadjungierter Generator \hat{H} , so daß (7.5) erfüllt ist. Ist also der Zeitentwicklungsoperator vorgegeben, so kann man \hat{H} daraus zurückgewinnen.

Wir befassen uns mit der Lösung der Integralgleichung (7.3). Gehen wir **iterativ** vor, so erhalten wir:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \hat{H}(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_2) \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_n),$$

d.h. der n -te Term dieser Summe hat folgende Gestalt:

$$\hat{U}^{(n)}(t, t_0) = \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \dots \hat{H}(t_n),$$

mit $t \geq t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq t_n \geq t_0$. Verwenden wir die Heaviside-Funktion

$$\Theta(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0 \\ 1 & \text{für } t \geq 0, \end{cases} \quad (7.6)$$

so können wir die Terme in obiger Summe folgendermaßen umschreiben:

$$\begin{aligned} \hat{U}^{(n)}(t, t_0) &= \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \Theta(t_1 - t_2)\Theta(t_2 - t_3) \dots \Theta(t_{n-1} - t_n) \hat{H}(t_1) \dots \hat{H}(t_n) \\ &= \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \sum_{\pi} \{ \Theta(t_{\pi(1)} - t_{\pi(2)}) \dots \Theta(t_{\pi(n-1)} - t_{\pi(n)}) \hat{H}(t_{\pi(1)}) \dots \hat{H}(t_{\pi(n)}) \}, \end{aligned}$$

wobei \sum_{π} die Summe über alle Permutationen der Zahlen $1, \dots, n$ bezeichnet. Es ist klar, daß jeder Term in dieser Summe gleich ist, denn jede Permutation kann durch eine entsprechende Variablentransformation kompensiert werden. (Dabei wird angenommen, daß die Reihenfolge der Integrationen unwichtig ist.)

Wir definieren das **Dysonsche Zeitordnungsprodukt**:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(\hat{H}(t_1) \dots \hat{H}(t_n)) &:= \sum_{\pi} \Theta(t_{\pi(1)} - t_{\pi(2)}) \dots \Theta(t_{\pi(n-1)} - t_{\pi(n)}) \hat{H}(t_{\pi(1)}) \dots \hat{H}(t_{\pi(n)}) \\ &\equiv \hat{H}(t_i) \dots \hat{H}(t_j) \dots \hat{H}(t_k) \end{aligned} \quad (7.7)$$

mit $t_i \geq \dots \geq t_j \geq \dots \geq t_k$. Dies liefert die **Dyson-Reihe**:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \mathcal{T}(\hat{H}(t_1) \dots \hat{H}(t_n)). \quad (7.8)$$

Dafür schreibt man formal:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathcal{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right]. \quad (7.9)$$

Bemerkung 7.2

Gleichung (7.9) definiert im allgemeinen eine **formale Reihe**, die man Ordnung für Ordnung auswerten kann. Nur wenn $\hat{H}(t)$ beschränkt und stark stetig ist, hat man starke Konvergenz dieser Reihe.

Die in diesem Abschnitt entwickelte Sicht auf die Dynamik des Quantensystems nennen wir im weiteren **Schrödinger-Bild**.

¹siehe [Reed/Simon], Bd. I, Satz VIII.8

7.2 Das Heisenberg-Bild

Wir bezeichnen hier einen Zustand bzw. eine Observable im obigen Schrödinger-Bild mit $|\psi_S(t)\rangle$ bzw. $\hat{A}_S(t)$. Nach Postulat III aus Kapitel 3 sind die statistischen Mittelwerte für die Messung von Observablen durch deren Erwartungswerte

$$\langle \psi(t) | \hat{A}(t) \psi(t) \rangle$$

gegeben. Wir betrachten unitäre Transformationen

$$\begin{aligned} |\psi'(t)\rangle &:= \hat{V}(t) |\psi(t)\rangle \\ \hat{A}'(t) &:= \hat{V}(t) \hat{A}(t) \hat{V}^\dagger(t), \end{aligned} \quad (7.10)$$

Die Erwartungswerte sind unter solchen Transformationen offenbar **invariant**. Insbesondere können wir für $\hat{V}(t)$ den zum Operator der Zeitentwicklung im Schrödinger-Bild adjungierten wählen,

$$\hat{V}(t) := \hat{U}^\dagger(t, t_0).$$

Die dann durch (7.10) erhaltene Darstellung heißt **Heisenberg-Bild** der Quantenmechanik,

$$\begin{aligned} |\psi_H(t)\rangle &= \hat{U}^\dagger(t, t_0) |\psi_S(t)\rangle \\ \hat{A}_H(t) &= \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A}_S(t) \hat{U}(t, t_0). \end{aligned} \quad (7.11)$$

Für $t = t_0$ stimmen, wegen der Anfangsbedingung (7.1), die Zustandsvektoren im Heisenberg-Bild und im Schrödinger-Bild überein. Da $|\psi_S(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_S(t_0)\rangle$ gilt, folgt

$$|\psi_H(t)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle \equiv |\psi_H\rangle,$$

d.h: im Heisenberg-Bild ändert sich der Zustandsvektor im Laufe der Zeitentwicklung nicht.

Die Dynamik wird in diesem Bild von den Observablen getragen. Unter Verwendung von (7.2) erhalten wir:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) &= i\hbar \frac{d\hat{U}^\dagger(t, t_0)}{dt} \hat{A}_S(t) \hat{U}(t, t_0) + i\hbar \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A}_S(t) \frac{d\hat{U}(t, t_0)}{dt} + i\hbar \hat{U}^\dagger(t, t_0) \frac{d\hat{A}_S(t)}{dt} \hat{U}(t, t_0) \\ &= \hat{U}^\dagger(t, t_0) [\hat{A}_S(t), \hat{H}_S(t)] \hat{U}(t, t_0) + i\hbar \hat{U}^\dagger(t, t_0) \frac{d\hat{A}_S(t)}{dt} \hat{U}(t, t_0) \\ &= [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H(t). \end{aligned}$$

Der Term $\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H$ bezeichnet den Operator $\frac{d\hat{A}_S}{dt}$ im Heisenberg-Bild. Man sollte eigentlich exakter schreiben:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right)_H = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \frac{d\hat{A}_S}{dt} \hat{U}(t, t_0).$$

Wir haben durch obige Rechnung die **Heisenberg-Gleichung** gefunden:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)] + \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right)_H. \quad (7.12)$$

Bemerkung 7.3

i) Für konservative Systeme gilt

$$\hat{H}_H(t) = \hat{H}_S \equiv \hat{H}.$$

- ii) Wenn \hat{A}_S im Schrödinger-Bild nicht explizit zeitabhängig ist, dann verschwindet der Term $\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}\right)_H$ und wir haben:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)].$$

Wählen wir insbesondere anstelle von \hat{A} die Observablen \hat{x} bzw. \hat{p} , so ergibt sich:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}\hat{x}_H(t) &= [\hat{x}_H(t), \hat{H}_H(t)] \\ i\hbar\frac{d}{dt}\hat{p}_H(t) &= [\hat{p}_H(t), \hat{H}_H(t)]. \end{aligned}$$

Wir bemerken die Analogie zu den Hamiltonschen Gleichungen der klassischen Mechanik.

- iii) Wir vertiefen die Analogie zur klassischen Mechanik noch etwas:

Das ‘‘Schrödinger-Bild der klassischen Mechanik’’ kann man folgendermaßen beschreiben: Zustände sind Punkte im Phasenraum $\mathcal{P} = T^*M$, wobei M den Konfigurationsraum des Systems bezeichnet. Die Dynamik ist gegeben durch ein Hamiltonsches Vektorfeld X_H . Dessen Integralkurven sind die Trajektorien der Teilchen auf \mathcal{P} . Führt man verallgemeinerte Koordinaten (x^i, p_i) ein, so erhalten wir die Trajektorien durch Lösung der Hamiltonischen Gleichungen.

Eine Observable A ist eine Funktion auf dem Phasenraum, $A \in C^\infty(\mathcal{P})$. Dem Bilden von Erwartungswerten in der Quantenmechanik entspricht in der klassischen Mechanik die Analyse von A entlang der Trajektorien.

Im ‘‘Heisenberg-Bild der klassischen Mechanik’’ wird die Bewegung aufgefaßt als kanonische Transformation der verallgemeinerten Koordinaten:

$$(x, p)_{t=0} \rightarrow (X_t(x_0, p_0), P_t(x_0, p_0)) \equiv (x, p)_t.$$

Da jede Trajektorie eindeutig durch die Anfangswerte $(x, p)_{t=0}$ bestimmt ist, ist die gesamte Information über die Dynamik in obiger Transformation enthalten. Der Zustand eines Teilchens besteht aus dieser Sicht aus der gesamten Weltlinie des Teilchens. Jede Observable A geht unter obiger Transformation über zu einer einparametrischen Familie A_t von Observablen und der Berechnung von Erwartungswerten entspricht hier die Auswertung der Familie A_t auf dem Zustand des Systems.

- (iv) In Abschnitt 4.1 hatten wir den Begriff der **Bewegungskonstanten** im Schrödinger-Bild definiert. Nach (4.10) muß gelten:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{A}_S(t) + [\hat{A}_S, \hat{H}_S] = 0.$$

Aus obiger Herleitung der Heisenberg-Gleichung folgt, daß diese Bedingung im Heisenberg-Bild die folgende Form hat:

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_H = 0. \quad (7.13)$$

Dies ist für nicht explizit zeitabhängige Observable äquivalent zu

$$[\hat{A}_H, \hat{H}_H] = 0.$$

- (v) Die zeitliche Änderung von Erwartungswerten ist im Heisenberg-Bild besonders leicht zu berechnen:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}_H\rangle = \frac{d}{dt}\langle\psi_H|\hat{A}_H\psi_H\rangle = \langle\psi_H|\frac{d\hat{A}_H}{dt}\psi_H\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{A}_H, \hat{H}_H]\rangle + \left\langle\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}\right)_H\right\rangle.$$

Aufgrund der Invarianz der Erwartungswerte unter Bildwechsel, ist diese Größe natürlich identisch mit der zeitlichen Ableitung des Erwartungswertes der Observablen \hat{A} im Schrödingerbild. Für

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\vec{x})$$

erhalten wir daraus sofort die **Ehrenfestschen Gleichungen**²:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\vec{x}\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{x}, \hat{H}]\rangle = \frac{1}{2i\hbar m}\langle[\hat{x}, \hat{p}^2]\rangle = \frac{1}{m}\langle\vec{p}\rangle \\ \frac{d}{dt}\langle\vec{p}\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{p}, \hat{H}]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{p}, V(\vec{x})]\rangle = -\langle\nabla V(\vec{x})\rangle = \langle\vec{F}\rangle.\end{aligned}$$

Als weitere Anwendung leiten wir die Energie-Zeit-Unschärferelation her: Sei \hat{H} konservativ und \hat{A} nicht explizit zeitabhängig. Dann liefert die allgemeine Unschärferelation (3.11) aus Abschnitt 3.3 für \hat{A} und \hat{H} :

$$\Delta_\psi\hat{A} \cdot \Delta_\psi\hat{H} \geq \frac{1}{2} \left| \langle i[\hat{A}, \hat{H}] \rangle \right|.$$

Verwenden wir die Heisenberg-Gleichung, so ergibt sich:

$$\Delta_\psi\hat{A} \cdot \Delta_\psi\hat{H} \geq \frac{\hbar}{2} \left| \left\langle \frac{d}{dt}\hat{A}_H \right\rangle \right|.$$

Sei

$$\tau_{A,\psi} := \frac{\Delta_\psi A}{\left| \left\langle \frac{d}{dt}\hat{A}_H \right\rangle \right|}.$$

Diese Größe kann als ein für die Änderung der statistischen Verteilung von \hat{A} charakteristisches Zeitintervall interpretiert werden. Genauer, $\tau_{A,\psi}$ ist die Zeit, in der sich der Schwerpunkt $\langle\hat{A}\rangle$ der Verteilung um ΔA verschiebt, d.h., die Zeit, die für eine nennenswerte Änderung dieser statistischen Verteilung mindestens nötig ist. Wir definieren

$$\tau_\psi := \inf_{\hat{A} \in \{\hat{A}\}} \{ \tau_{A,\psi} \},$$

wobei $\{\hat{A}\}$ die Menge der Observablen ist, die nicht explizit von der Zeit abhängig sind. Die Größe $\tau_\psi(t)$ kann als für die Zeitentwicklung des Systems charakteristisches Zeitintervall zum Zeitpunkt t aufgefaßt werden. Gilt $|t' - t| \ll \tau_\psi(t)$, so sind die statistischen Verteilungen von \hat{A} zu den Zeitpunkten t und t' im wesentlichen gleich.

Wir erhalten aus obiger Betrachtung die folgende **Energie-Zeit-Unschärferelation**:

$$\tau_\psi \cdot \Delta_\psi E \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (7.14)$$

wobei $\Delta_\psi E \equiv \Delta_\psi \hat{H}$ gesetzt wurde. Für stationäre ψ gilt $\Delta_\psi E = 0$, also muß $\tau_\psi = \infty$ gelten. Dies ist erfüllt, denn $\frac{d}{dt}\langle\hat{A}_H\rangle = 0$. Man kann τ_ψ als **Lebensdauer** eines angeregten Zustandes und $\Delta_\psi E$ als für den Zustand charakteristische Linienbreite interpretieren.

Achtung: Es wurde **kein Zeitoperator** definiert, diese Relation ist von einem anderen Typ als die bisher betrachteten Unschärferelationen.

Beispiel: Wir erinnern an die Behandlung des **harmonischen Oszillators** in Termen von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren³:

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

mit

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}, \quad [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \mathbf{1}, \quad [\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger.$$

²vgl. mit (2.12) und Abschnitt 2.5 Gl. (2.37)

³Siehe Abschnitt 4.3

Wir untersuchen die Dynamik des harmonischen Oszillators im Heisenberg-Bild:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{a}(t) = [\hat{a}(t), \hat{H}] = \hbar\omega [\hat{a}(t), \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}] = \hbar\omega \hat{a}(t).$$

Die Integration dieser Gleichung (und der analogen Gleichung für \hat{a}^\dagger) ist trivial:

$$\hat{a}(t) = e^{-i\omega t} \hat{a}(0), \quad \hat{a}^\dagger(t) = e^{i\omega t} \hat{a}^\dagger(0).$$

Umschreiben dieser Gleichungen liefert die Dynamik für \hat{x} und \hat{p} im Heisenberg-Bild:

$$\begin{aligned} \hat{x}(t) &= \hat{x}(0) \cos \omega t + \frac{\hat{p}(0)}{m\omega} \sin \omega t \\ \hat{p}(t) &= \hat{p}(0) \cos \omega t - m\omega \hat{x}(0) \sin \omega t. \end{aligned}$$

Diese Gleichungen haben exakt die gleiche Form, wie die klassischen Bewegungsgleichungen, d.h. insbesondere: Für den harmonischen Oszillator folgen die Mittelwerte exakt den klassischen Trajektorien, (dies liest man auch sofort aus den Ehrenfestschen Gleichungen ab.)

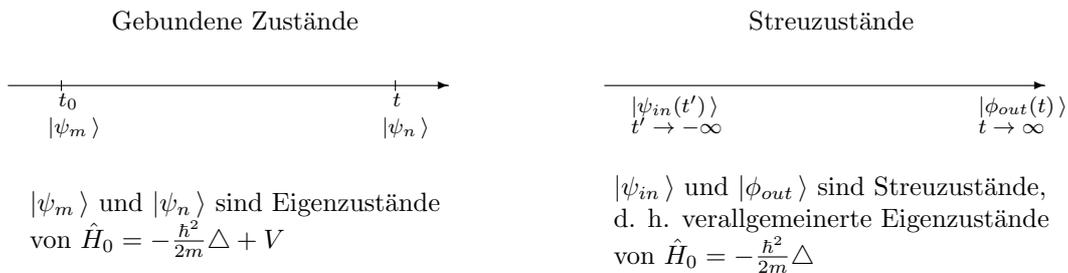
Bemerkung: Im folgenden wird der Index S an den Objekten im Schrödinger-Bild weggelassen.

7.3 Wechselwirkungsbild und Übergangswahrscheinlichkeiten

Im weiteren werden wir es oft mit folgender Problemstellung zu tun haben: Es wird ein Quantensystem mit Hamiltonoperator

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$$

untersucht, wobei \hat{H}_0 konservativ ist und $\hat{H}_1(t)$ eine "kleine Störung" bezeichnet, die explizit zeitabhängig sein kann. Es wird angenommen, daß das Spektrum von \hat{H}_0 exakt bestimmbar ist. Es soll untersucht werden, wie die zeitliche Evolution des Systems durch $\hat{H}_1(t)$ gestört wird. Diese Frage stellt sich sowohl im Zusammenhang mit der Untersuchung der **Störung gebundener Zustände** als auch im Kontext der **Streutheorie**. Letztere wird im nächsten Kapitel behandelt, die Störung gebundener Zustände im Teil II der Vorlesung. Wir ziehen einen schematischen Vergleich:



Besitze \hat{H}_0 ein Punktspektrum. Wir bezeichnen Eigenwerte und Eigenvektoren von \hat{H}_0 wie üblich:

$$\hat{H}_0 \psi_n = E_n \psi_n.$$

Die zeitliche Evolution des ungestörten Systems wird beschrieben durch

$$\hat{U}_0(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t-t_0)}.$$

Die Eigenzustände sind natürlich stationär,

$$\psi_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} \psi_n(t_0).$$

Wegen der Orthogonalität der Eigenzustände für $m \neq n$ und aufgrund der Stationarität gilt:

$$|\langle \psi_n(t) | \psi_m(t) \rangle|^2 = |\langle \psi_n(t_0) | \psi_m(t_0) \rangle|^2 = 0.$$

Schalten wir nun die Störung ein, so wird im allgemeinen

$$|\langle \psi_n(t) | \psi_m(t) \rangle|^2 = |\langle \psi_n(t) | \hat{U}(t, t_0) \psi_m(t_0) \rangle|^2 \neq 0$$

gelten, wobei $\hat{U}(t, t_0)$ den Zeitentwicklungsoperator von \hat{H} bezeichnet. Im Sinne der in Kapitel 3 eingeführten Terminologie⁴ ist

$$|\langle \psi_n(t) | \psi_m(t) \rangle|^2 = |\langle \psi_n(t) | \hat{U}(t, t_0) \psi_m(t_0) \rangle|^2 \quad (7.15)$$

die **Übergangswahrscheinlichkeit**, d. h., die Wahrscheinlichkeit dafür, das System bei einer Messung zum Zeitpunkt t im Eigenzustand ψ_n von \hat{H}_0 vorzufinden, wenn es zum Zeitpunkt t_0 im Zustand ψ_m war. Die Größe $\langle \psi_n(t) | \psi_m(t) \rangle$ heißt Übergangsamplitude. Oft verwendet man die Bezeichnung ψ_i (i für "initial") und ψ_f (f für "final") für Anfangs- und Endzustand des Systems im Zeitintervall (t_0, t) . Dann ist $|\langle \psi_f | \hat{U}(t, t_0) \psi_i \rangle|^2$ der entsprechende Ausdruck für die Übergangswahrscheinlichkeit.

Im Falle der Streutheorie stehen, wie oben bereits bemerkt, für ψ_i und ψ_f die (verallgemeinerten) Eigenzustände ψ_{in} und ϕ_{out} des freien Hamiltonoperators. In beiden betrachteten Fällen kann man $\hat{U}(t, t_0)$ im allgemeinen nicht exakt bestimmen, man muß also Näherungsmethoden entwickeln. Dafür ist das **Wechselwirkungsbild**⁵ besonders gut geeignet.

Wir betrachten die unitäre Transformation:

$$\begin{aligned} |\psi_I(t)\rangle &:= \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) |\psi(t)\rangle \\ \hat{A}_I(t) &:= \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) \hat{A}(t) \hat{U}_0(t, t_0), \end{aligned} \quad (7.16)$$

wobei $|\psi(t)\rangle$ und $\hat{A}(t)$ Zustandsvektor und Observable im Schrödinger-Bild bezeichnen. Mit $\hat{U}_0(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)}$ erhalten wir:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle &= i\hbar \frac{d}{dt} \left(e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0} |\psi(t)\rangle \right) = -\hat{H}_0 |\psi_I(t)\rangle + e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0} \hat{H} |\psi(t)\rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0} \left(-\hat{H}_0 + \hat{H} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0} |\psi_I(t)\rangle \equiv \hat{H}_{1I}(t) |\psi_I(t)\rangle, \end{aligned}$$

also haben wir im Wechselwirkungsbild:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = \hat{H}_{1I}(t) |\psi_I(t)\rangle. \quad (7.17)$$

Die zugehörige Integralgleichung lautet:

$$|\psi_I(t)\rangle = |\psi_I(t_0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_{1I}(t') |\psi_I(t')\rangle,$$

und deren Lösung ist nach Gleichung (7.9) gegeben durch:

$$|\psi_I(t)\rangle = \mathcal{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_{1I}(t') \right] |\psi_I(t_0)\rangle.$$

Wir sehen, daß der Übergang zum Wechselwirkungsbild zu einer Abkopplung von \hat{H}_0 führt. Man löst nun obige Integralgleichung wieder iterativ, wie bereits früher beschrieben. Wir bezeichnen:

$$\hat{U}_I(t, t_0) = \mathcal{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_{1I}(t') \right].$$

⁴vgl. Bem. 3.2 (ii) nach Postulat III

⁵mitunter auch als Dirac-Bild bezeichnet

Dann gilt natürlich

$$|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}_I(t, t_0) |\psi_I(t_0)\rangle$$

und mit $\psi_I(t_0) = \psi(t_0)$ folgt:

$$\hat{U}_0^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = \hat{U}_I(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle,$$

also

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}_0(t, t_0) \cdot \hat{U}_I(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}_0} \cdot \mathcal{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_I(t') \right]. \quad (7.18)$$

Wir entwickeln die Dyson-Reihe, wie in Abschnitt 7.1 beschrieben:

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}_0(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}_n(t, t_0), \quad (7.19)$$

wobei

$$\begin{aligned} \hat{U}_n(t, t_0) &= \hat{U}_0(t, t_0) \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}_{1I}(t_1) \cdots \hat{H}_{1I}(t_n), \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{U}_0(t, t_0) \left(\hat{U}_0^\dagger(t_1, t_0) \hat{H}_1(t_1) \hat{U}_0(t_1, t_0) \right) \cdots \\ &\quad \cdots \left(\hat{U}_0^\dagger(t_{n-1}, t_0) \hat{H}_1(t_{n-1}) \hat{U}_0(t_{n-1}, t_0) \right) \left(\hat{U}_0^\dagger(t_n, t_0) \hat{H}_1(t_n) \hat{U}_0(t_n, t_0) \right) \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \left\{ \hat{U}_0(t, t_1) \hat{H}_1(t_1) \hat{U}_0(t_1, t_2) \hat{H}_1(t_2) \hat{U}_0(t_2, t_3) \cdots \right. \\ &\quad \left. \cdots \hat{H}_1(t_{n-1}) \hat{U}_0(t_{n-1}, t_n) \hat{H}_1(t_n) \hat{U}_0(t_n, t_0) \right\}, \end{aligned} \quad (7.20)$$

mit $t \geq t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq t_n \geq t_0$. Die Entwicklung (7.19) heißt **Bornsche Reihe** für den Evolutionsoperator. Indem wir die einzelnen Terme dieser Reihe **diagrammatisch** interpretieren, finden wir die Grundidee der **zeitabhängigen Störungstheorie**, siehe Abb. 7.1. Dazu lese man Gleichung (7.20) von rechts nach links mit folgender Interpretation: Von t_0 bis t_n findet "freie", d.h. durch \hat{U}_0 beschriebene Zeitentwicklung statt, zum Zeitpunkt t_n gibt es eine Wechselwirkung mit $\hat{H}_1(t_n)$, dann wieder freie Zeitentwicklung bis t_{n-1} , dann Wechselwirkung mit $\hat{H}_1(t_{n-1})$ zum Zeitpunkt t_{n-1} usw..

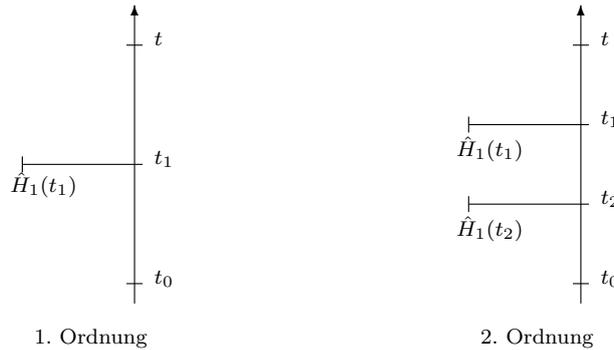


Abbildung 7.1: Diagrammatische Darstellung der Zeitentwicklung

Sei $\{|\psi_n\rangle\}$ ein Orthonormalsystem von Eigenvektoren zu den Eigenwerten $E_n^{(0)}$ des ungestörten Operators \hat{H}_0 . Wir bezeichnen die Matrixelemente von \hat{H}_1 in diesem System mit

$$V_{lk}(t) = \langle \psi_l | \hat{H}_1(t) | \psi_k \rangle.$$

Wir berechnen die Übergangsamplituden $A_{i \rightarrow f}(t, t_0)$ zwischen Anfangszustand ψ_i und Endzustand ψ_f , indem wir die Bornsche Reihe von links mit $\langle \psi_f |$ und von rechts mit $|\psi_i\rangle$ multiplizieren (und nach jedem $\hat{H}_1(t_j)$ eine Zerlegung der $\mathbf{1}$ gebildet aus obigem Orthonormalsystem einfügen):

$$A_{i \rightarrow f}^{(n)}(t, t_0) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \sum_{k_1} \sum_{k_2} \cdots \sum_{k_{n-1}} \\ \times \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_1)E_f^{(0)}} V_{fk_1}(t_1) e^{-\frac{i}{\hbar}(t_1-t_2)E_{k_1}^{(0)}} V_{k_1 k_2}(t_2) \right. \\ \left. \cdots e^{-\frac{i}{\hbar}(t_{n-1}-t_n)E_{k_{n-1}}^{(0)}} V_{k_{n-1} i}(t_n) e^{-\frac{i}{\hbar}(t_n-t_0)E_i^{(0)}} \right\}.$$

Natürlich haben wir eine diagrammatische Interpretation wie oben. In erster Ordnung erhalten wir:

$$A_{i \rightarrow f}^{(1)}(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_1)E_f^{(0)}} V_{fi}(t_1) e^{-\frac{i}{\hbar}(t_1-t_0)E_i^{(0)}}$$

und damit die Übergangswahrscheinlichkeit

$$P_{i \rightarrow f}^{(1)}(t, t_0) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t dt_1 e^{\frac{i}{\hbar}(E_f^{(0)} - E_i^{(0)})t_1} V_{fi}(t_1) \right|^2. \quad (7.21)$$

Dies ist die **Übergangswahrscheinlichkeit in Bornscher Näherung**.

Kapitel 8

Elemente der Streutheorie

8.1 Møller-Operatoren. Der Limes $t \rightarrow \pm\infty$

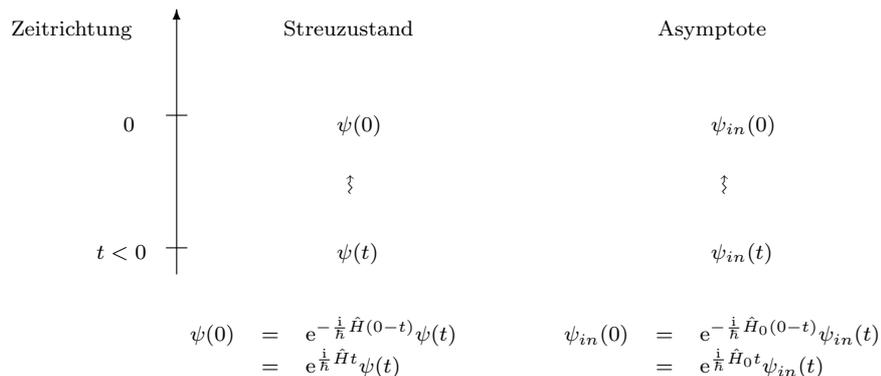
Wir betrachten ein spinloses Teilchen im Potential V , das im Unendlichen hinreichend schnell verschwindet, beschrieben durch den (nicht explizit zeitabhängigen) Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V, \quad \hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta.$$

\hat{H} wirkt auf dem Hilbertraum $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ und damit \hat{H} selbstadjungiert wird, wählen wir V aus einer der in Abschnitt 3.5 diskutierten Klassen aus. Sei also $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$ oder, allgemeiner, $V \in \mathcal{R} + L^\infty(\mathbb{R}^3)$. Die Zeitevolution im Schrödinger-Bild ist gegeben durch

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle, \quad \hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H} \cdot t\right).$$

“Außerhalb der Reichweite” des Potentials sollten sich die Wellenpakete frei bewegen, d.h. ein Streuzustand soll als Asymptote für $t \rightarrow \pm\infty$ einen freien Zustand ψ_{in} haben. Wir veranschaulichen dies:



Für $t \rightarrow -\infty$ soll im Normsinne $\psi \rightarrow \psi_{in}$ gelten, d.h.:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \|\hat{U}(t)\psi(0) - \hat{U}_0(t)\psi_{in}(0)\| = 0,$$

also

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \|\psi(0) - \hat{U}^\dagger(t)\hat{U}_0(t)\psi_{in}(0)\| = 0. \tag{8.1}$$

Analog soll für $t \rightarrow +\infty$ ein asymptotischer Zustand ψ_{out} existieren, so daß gilt:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \|\psi(0) - \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}_0(t) \psi_{out}(0)\| = 0. \quad (8.2)$$

Diese Gleichungen legen die Betrachtung der sogenannten **Møller-Operatoren** nahe:

$$\hat{\Omega}_\pm := s\text{-}\lim_{t \rightarrow \mp\infty} \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}_0(t) \equiv s\text{-}\lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 \cdot t}, \quad (8.3)$$

wobei s-lim, wie früher eingeführt, den starken Limes bezeichnet. Es gilt

$$|\psi(0)\rangle = \hat{\Omega}_+ |\psi_{in}\rangle(0) = \hat{\Omega}_- |\psi_{out}\rangle(0).$$

Man ist nun mit zwei schwierigen Problemen konfrontiert:

- i) Das Problem der **Existenz** der Møller-Operatoren: Sind $\hat{\Omega}_+$ und $\hat{\Omega}_-$ auf ganz \mathcal{H} definiert? Physikalisch gesprochen: Sind alle freien Zustände des Systems Asymptoten von Streuzuständen?
- ii) Das Problem der **asymptotischen Vollständigkeit**: Angenommen, die Møller-Operatoren existieren. Wir definieren

$$\mathcal{H}_+ \equiv \mathcal{H}_{in} := \hat{\Omega}_+(\mathcal{H}), \quad \mathcal{H}_- \equiv \mathcal{H}_{out} := \hat{\Omega}_-(\mathcal{H}).$$

Man sagt, die Møller-Operatoren seien asymptotisch vollständig, falls gilt:

$$\mathcal{H}_+ = \mathcal{H}_- = \mathcal{H}_{ac}, \quad (8.4)$$

$$\sigma_{sing}(\hat{H}) = \emptyset, \quad (8.5)$$

wobei \mathcal{H}_{ac} den dem absolut-stetigen Spektrum von \hat{H} entsprechenden Teilraum¹ und $\sigma_{sing}(\hat{H})$ das singuläre Spektrum von \hat{H} bezeichnet. Dann gilt natürlich $\mathcal{H}_{ac} = \mathcal{H} \ominus \mathcal{H}_{pp}$. Es ist zu fragen, für welche Klassen von Schrödingeroperatoren dies gilt. Physikalisch gesprochen: Existieren für alle Streuzustände (alle nicht gebundenen Zustände) Asymptoten?

Wir machen am Ende des Abschnittes einige mathematische Bemerkungen zu Klassen von Potentialen, die Existenz und asymptotische Vollständigkeit liefern. Zunächst nehmen wir an, daß die Møller-Operatoren existieren.

Satz 8.1 *Angenommen, die Møller-Operatoren $\hat{\Omega}_\pm : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_\pm$ existieren. Seien $D(\hat{H}_0)$ und $D(\hat{H})$ die Definitionsbereiche von \hat{H}_0 und \hat{H} . Dann gilt:*

a) $\hat{\Omega}_\pm$ sind Isometrien, d.h.:

$$\hat{\Omega}_\pm^\dagger \hat{\Omega}_\pm = \mathbf{1}, \quad \hat{\Omega}_\pm \hat{\Omega}_\pm^\dagger = \hat{P}_\pm, \quad (8.6)$$

wobei \hat{P}_\pm der Projektor auf $\mathcal{H}_\pm \subset \mathcal{H}$ ist.

b)

$$\hat{H} \hat{\Omega}_\pm = \hat{\Omega}_\pm \hat{H}_0. \quad (8.7)$$

Außerdem gilt $\hat{H} \mathcal{H}_\pm \subset \mathcal{H}_\pm$ und $\hat{\Omega}_\pm D(\hat{H}_0) \subset D(\hat{H})$.

c)

$$\mathcal{H}_\pm \subset \hat{P}_{ac}(\hat{H}) \mathcal{H}, \quad (8.8)$$

wobei $\hat{P}_{ac}(\hat{H})$ den Orthoprojektor auf den dem absolut-stetigen Spektrum von \hat{H} entsprechenden Teilraum von \mathcal{H} bezeichnet.

¹siehe Abschnitt 3.4.2

Beweis:

a) Sei $\varphi \in \mathcal{H}$. Bezeichne $\hat{\Omega}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot t}$. Aus der Unitarität der Zeitentwicklungsoperatoren für alle t folgt $\|\hat{\Omega}(t)\varphi\| = \|\varphi\|$. Da, nach Annahme, der starke Limes von $\hat{\Omega}(t)$ für $\lim_{t \rightarrow \mp\infty}$ existiert, erhalten wir im Grenzwert

$$\|\hat{\Omega}_{\pm}\varphi\| = \|\varphi\|.$$

b) Sei $\varphi \in \mathcal{H}$, $\tau \in \mathbb{R}^1$. Es gilt:

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot\tau} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot t} \varphi = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(\tau+t)} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t+\tau)} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot\tau} \varphi,$$

und damit im starken Limes $t \rightarrow \mp\infty$:

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot\tau} \hat{\Omega}_{\pm} = \hat{\Omega}_{\pm} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot\tau}. \quad (8.9)$$

Daraus lesen wir $\hat{H}\mathcal{H}_{\pm} \subset \mathcal{H}_{\pm}$ und $\Omega_{\pm}D(\hat{H}_0) \subset D(\hat{H})$ ab. Schließlich erhalten wir durch Differenzieren von (8.9) nach τ an der Stelle $\tau = 0$ (und unter Verwendung des Satzes von Stone):

$$\hat{H}\hat{\Omega}_{\pm} = \hat{\Omega}_{\pm}\hat{H}_0.$$

c) Nach Punkt b) ist \hat{H} , eingeschränkt auf \mathcal{H}_{\pm} unitär äquivalent (unter $\hat{\Omega}_{\pm} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_{\pm}$) zu \hat{H}_0 . Da $\hat{H}_0 = -\Delta$ nur ein absolut-stetiges Spektrum hat, ist die Einschränkung von \hat{H} auf \mathcal{H}_{\pm} auch absolut-stetig. Damit ist der Satz bewiesen.

Aus (8.7) sehen wir, daß die $\hat{\Omega}_{\pm}$ (verallgemeinerte) Eigenzustände von \hat{H}_0 in (verallgemeinerte) Eigenzustände von \hat{H} umwandeln. Für $\hat{H}_0|E\rangle = E|E\rangle$ gilt also

$$\hat{H}(\hat{\Omega}_{\pm}|E\rangle) = \hat{\Omega}_{\pm}\hat{H}_0|E\rangle = E(\hat{\Omega}_{\pm}|E\rangle),$$

d.h. jeder (verallgemeinerte) Eigenvektor von \hat{H}_0 liefert einen (verallgemeinerten) Eigenvektor von \hat{H} , aber nicht umgekehrt.

Sei \hat{A} eine nicht explizit zeitabhängige Erhaltungsgröße bezüglich \hat{H}_0 und \hat{H} , d.h.:

$$[\hat{H}, \hat{A}] = 0 = [\hat{H}_0, \hat{A}].$$

Dann gilt

$$[\hat{A}, \hat{\Omega}_{\pm}] = 0.$$

Zum Abschluß dieses Abschnittes machen wir einige mathematische Zusatzbemerkungen ².

Bemerkung 8.1

- i) Relativ leicht zeigt man (Cook), daß $V \in L^2(\mathbb{R}^3)$ hinreichend für die Existenz der Møller-Operatoren ist³. Eine weitere Klasse (Hack/Kuroda) von Potentialen⁴ ist definiert durch $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^r(\mathbb{R}^3)$, $2 \leq r \leq 3$. Ein anderes hinreichendes Kriterium ist

$$(1 + |\vec{x}|)^{-\frac{1}{2}+\epsilon} V \in L^2(\mathbb{R}^3).$$

Diese ist insbesondere für Potentiale mit dem asymptotischen Verhalten

$$V \sim O(|\vec{x}|^{-1-\delta})$$

für $x \rightarrow \infty$ erfüllt⁵. Im Limes $\delta \rightarrow 0$ geht die Existenz der Møller-Operatoren verloren, d.h. für das **Coulomb-Potential** existieren die Møller-Operatoren **nicht**. Wir werden dies später noch kommentieren. (Grob gesagt, ist das Coulomb-Potential "zu langreichweitig", ein Teilchen spürt auch im Unendlichen noch die Wirkung dieses Potentials.)

²siehe [Reed/Simon], Bd. III, Abschnitte XI.3 und XI.4 und [Simon], Kapitel IV

³siehe [Simon], Satz IV.7

⁴siehe [Reed/Simon], Bd. III, Satz XI.24

⁵siehe [Simon], Satz IV.8

- ii) Der Beweis der asymptotischen Vollständigkeit ist das schwierigste Problem der Streutheorie. Wir führen hier zwei wichtige Resultate an: Für $V \in L^1(\mathbb{R}^3)$ mit der Eigenschaft⁶

$$\int \frac{|V(\vec{x})||V(\vec{y})|}{|\vec{x} - \vec{y}|^2} d^3x d^3y < (4\pi)^2$$

sowie für Potentiale aus der sogenannten **Enss-Klasse**⁷, zu der z. B. Potentiale mit der Eigenschaft

$$|V(\vec{x})| \leq C \cdot (1 + |x|)^{-1-\varepsilon}, \quad \varepsilon > 0,$$

gehören, existieren die Møller-Operatoren, sind asymptotisch vollständig und \hat{H} hat insbesondere kein singuläres Spektrum.

8.2 Der Streuoperator (S-Matrix)

Wir schreiben im weiteren meist $|\psi_{out}(0)\rangle = |\psi_{out}\rangle$. Wegen $\hat{\Omega}_+|\psi_{in}\rangle = |\psi(0)\rangle = \hat{\Omega}_-|\psi_{out}\rangle$ gilt $\hat{\Omega}_-^\dagger \hat{\Omega}_+|\psi_{in}\rangle = |\psi_{out}\rangle$. Dies legt die Definition des folgenden Operators nahe:

$$\hat{S} := \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{\Omega}_+. \quad (8.10)$$

Dann gilt

$$|\psi_{out}\rangle = \hat{S}|\psi_{in}\rangle.$$

\hat{S} heißt **Streuoperator** oder **S-Matrix**. Wir veranschaulichen diesen wichtigen Begriff in Abb. 8.1.

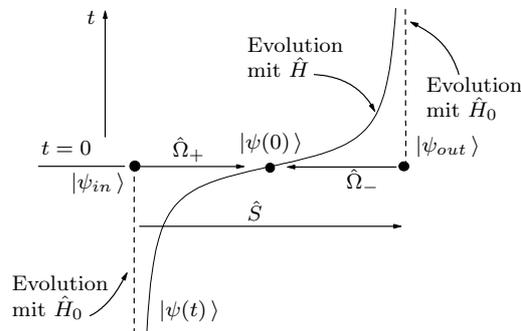


Abbildung 8.1: Der Streuoperator

Elementare Eigenschaften der Streumatrix:

- i) \hat{S} ist **unitär**: Seien \hat{P}_\pm die Projektoren auf $\mathcal{H}_\pm \subset \mathcal{H}$. Es gilt

$$\hat{S}^\dagger \hat{S} = \hat{\Omega}_+^\dagger \hat{\Omega}_- \hat{\Omega}_+^\dagger \hat{\Omega}_+ = \hat{\Omega}_+^\dagger \hat{P}_- \hat{\Omega}_+ = \hat{\Omega}_+^\dagger \hat{\Omega}_+ = \mathbf{1},$$

denn $\hat{P}_- \hat{\Omega}_+ = \hat{\Omega}_+$, wegen $\mathcal{H}_+ = \mathcal{H}_-$. Analog zeigt man $\hat{S} \hat{S}^\dagger = \mathbf{1}$.

⁶siehe [Simon], Satz IV.35

⁷siehe [Reed/Simon], Bd. III, Satz XI.112

ii) Wir berechnen, unter Verwendung von Satz 8.1 b)

$$\begin{aligned}\hat{S}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot t} &= \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{\Omega}_+ e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot t} = \hat{\Omega}_-^\dagger e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot t} \hat{\Omega}_+ \\ &= \left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot t} \hat{\Omega}_- \right)^\dagger \hat{\Omega}_+ = \left(\hat{\Omega}_- e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot t} \right)^\dagger \hat{\Omega}_+ = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot t} \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{\Omega}_+ \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot t} \hat{S}.\end{aligned}$$

Wir lesen daraus, wieder durch Differenzieren (und Anwenden des Satzes von Stone) ab:

$$[\hat{S}, \hat{H}_0] = 0. \quad (8.11)$$

Diese Gleichung besagt, daß die Energie im Streuprozess erhalten bleibt. Dies wird später ausführlicher kommentiert.

Achtung: \hat{H} und \hat{S} kommutieren nicht.

iii) Sei \hat{U} eine nicht explizit zeitabhängige, unitäre Erhaltungsgröße, d.h. $[\hat{U}, \hat{H}] = [\hat{U}, \hat{H}_0] = 0$. Dann gilt

$$\hat{S}\hat{U} = \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{\Omega}_+ \hat{U} = \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{U} \hat{\Omega}_+ = \hat{U} \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{\Omega}_+ = \hat{U} \hat{S},$$

denn aus $\hat{\Omega}_- \hat{U} = \hat{U} \hat{\Omega}_-$ folgt $\hat{U}^\dagger \hat{\Omega}_-^\dagger = \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{U}^\dagger$, und nach Multiplizieren dieser Gleichung von links und von rechts mit \hat{U} aus der Unitarität $\hat{\Omega}_-^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{\Omega}_-^\dagger$. Wir erhalten also:

$$[\hat{S}, \hat{U}] = 0. \quad (8.12)$$

Diese Relation ist von großer praktischer Bedeutung. Sie besagt, daß sich Symmetrien der Hamiltonoperatoren \hat{H} und \hat{H}_0 , realisiert durch unitäre Darstellungen, auf die Streumatrix übertragen. Ist etwa V rotationssymmetrisch, so hat auch \hat{S} diese Eigenschaft.

Physikalische Interpretation der S-Matrix:

Eine **Quelle** emittiert Teilchen im (präparierten) Zustand $\psi_{in}(-\infty)$. Fände keine Wechselwirkung mit dem Potential V statt, würde sich ψ frei entwickeln, d.h. mit der Asymptote

$$\psi_{in}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot t} \psi_{in}(0)$$

für alle Zeiten identisch bleiben. Die wirkliche Evolution von ψ in Anwesenheit eines Potentials ist aber

$$\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot t} \psi(0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot t} \hat{\Omega}_+ \psi_{in}(0).$$

Sei ein **Detektor** gegeben, der den Zustand $\phi_{out}(+\infty)$ registriert. Wir fragen: Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, daß das Teilchen registriert wird, d.h. daß ψ für $t \rightarrow +\infty$ asymptotisch mit $\phi_{out}(+\infty)$ übereinstimmt? Die zu $\psi_{out}(+\infty)$ gehörige Asymptote ist

$$\phi_{out}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot t} \phi_{out}(0).$$

Dazu ist die folgende **Übergangsamplitude** zu berechnen:

$$A_{\psi_{in} \rightarrow \phi_{out}}(t) = \langle \phi_{out}(t) | \psi(t) \rangle = \langle e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot t} \phi_{out}(0) | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot t} \hat{\Omega}_+ \psi_{in}(0) \rangle = \langle \phi_{out}(0) | \Omega(t)^\dagger \hat{\Omega}_+ \psi_{in}(0) \rangle$$

für $t \rightarrow +\infty$ zu berechnen. Wir erhalten

$$A_{\psi_{in} \rightarrow \phi_{out}} = \langle \phi_{out}(0) | \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{\Omega}_+ \psi_{in}(0) \rangle = \langle \phi_{out}(0) | \hat{S} \psi_{in}(0) \rangle.$$

Daraus erhalten wir die folgende **Übergangswahrscheinlichkeit**:

$$P_{\psi_{in} \rightarrow \phi_{out}} = |\langle \phi_{out}(0) | \hat{S} \psi_{in}(0) \rangle|^2. \quad (8.13)$$

Schematisch können wir uns dies wieder wie folgt vorstellen: ψ_{in} entwickelt sich bis zum Zeitpunkt $t = 0$ frei, dann erfolgt zum Zeitpunkt $t = 0$ die Wechselwirkung mit dem Potential, beschrieben durch \hat{S} :

$$|\psi_{in}(0)\rangle \rightarrow \hat{S} |\psi_{in}(0)\rangle,$$

und danach fliegt das Teilchen wieder frei weiter. Wir sehen, daß \hat{S} die gesamte Information über den Streuvorgang in sich trägt.

Bemerkung 8.2

(i) Der Zeitpunkt $t = 0$ ist natürlich **nicht** ausgezeichnet. Da $[\hat{S}, \hat{H}_0] = 0$ gilt, folgt:

$$\begin{aligned} |\langle \phi_{out}(t) | \hat{S} \psi_{in}(t) \rangle|^2 &= |\langle e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \phi_{out}(0) | \hat{S} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \psi_{in}(0) \rangle|^2 \\ &= |\langle \phi_{out}(0) | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{S} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \psi_{in}(0) \rangle|^2 \\ &= |\langle \phi_{out}(0) | \hat{S} \psi_{in}(0) \rangle|^2. \end{aligned}$$

(ii) Wir berechnen den **Streuoperator \hat{S} im Wechselwirkungsbild**: Dazu bezeichnen wir die Møller-Operatoren im Wechselwirkungsbild wie üblich:

$$\hat{\Omega}_{\pm}^I(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{\Omega}_{\pm} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot t} \hat{\Omega}_{\pm}.$$

Damit gilt⁸

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\Omega}_{\pm}^I(t) = \hat{H}_I(t) \hat{\Omega}_{\pm}^I(t), \quad \text{mit} \quad \hat{H}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} V e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}, \quad (8.14)$$

und wir lesen ab:

$$\begin{aligned} \hat{\Omega}_+^I(-\infty) &= \mathbf{1} \\ \hat{\Omega}_+^I(+\infty) &= \hat{S}. \end{aligned}$$

Die Lösung von (8.14) mit der Anfangsbedingung $\mathbf{1}$ für $\hat{\Omega}_+^I(t)$ ist:

$$\hat{\Omega}_+^I(t) = \mathcal{T} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \hat{H}_I(t') \right\}.$$

Damit erhalten wir die folgende nützliche Darstellung für die Streumatrix:

$$\hat{S} = \mathcal{T} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \hat{H}_I(t) \right\}. \quad (8.15)$$

Diese Formel kann natürlich wieder störungstheoretisch interpretiert werden, genauso wie in Abschnitt 7.3 beschrieben. Sie liefert also eine Möglichkeit zur systematischen Auswertung des Streuprozesses “Ordnung für Ordnung” der Störungstheorie.

(iii) Sei \hat{A} eine Observable. Existiert der starke Limes

$$\hat{A}_{\pm} := s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot t} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot t} \quad (8.16)$$

von \hat{A} in der Heisenberg-Darstellung, so heißt \hat{A} **asymptotische Konstante**. Wir bezeichnen

$$\tau_{\pm}(\hat{A}) := \hat{A}_{\pm}.$$

⁸vgl. mit Abschnitt 7.3

Bezeichne \mathcal{A} die Algebra der asymptotischen Konstanten und \mathcal{A}_\pm die von den \hat{A}_\pm erzeugte Algebra. Dann ist $\tau_\pm : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}_\pm$ ein surjektiver Homomorphismus. Man zeigt⁹, daß \hat{A}_\pm mit der Kommutante von \hat{H} in \mathcal{A} zusammenfällt. Sei \hat{A} eine Observable, die mit \hat{H}_0 kommutiert. Dann existieren

$$\hat{A}_\pm = \text{s-lim}_{t \rightarrow \pm\infty} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot t} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot t} = \text{s-lim}_{t \rightarrow \pm\infty} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot t} \hat{A} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot t} = \hat{\Omega}_\mp \hat{A} \hat{\Omega}_\mp^\dagger.$$

Die Abbildung τ_\pm wird also für solche Observable durch die Møller-Operatoren realisiert,

$$\tau_\pm(\hat{A}) = \hat{\Omega}_\mp \hat{A} \hat{\Omega}_\mp^\dagger. \quad (8.17)$$

(iv) Da \hat{S} mit \hat{H}_0 kommutiert, gilt $\hat{S} \in \mathcal{A}$ und wir können das Bild unter τ_- betrachten:

$$\tau_-(\hat{S}) = \hat{\Omega}_+ \hat{S} \hat{\Omega}_+^\dagger = \hat{\Omega}_+ \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{\Omega}_+ \hat{\Omega}_+^\dagger = \hat{\Omega}_+ \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{P},$$

wobei \hat{P} wieder den Projektor auf das kontinuierliche Spektrum von \hat{H} bezeichnet. Wir definieren den **Streuoperator in der Heisenberg-Darstellung**:

$$\hat{S}' := \hat{\Omega}_+ \hat{\Omega}_-^\dagger. \quad (8.18)$$

Dies ist ein unitärer Operator auf \mathcal{H}_{ac} und es gilt

$$\hat{S} = \hat{\Omega}_+^\dagger \hat{S}' \hat{\Omega}_+. \quad (8.19)$$

Außerdem folgt aus (8.9) sofort, daß \hat{S}' mit \hat{H} kommutiert,

$$[\hat{S}', \hat{H}] = 0.$$

Da \hat{S} im Raum der freien Zustände operiert, sind seine Matrixelemente leichter zu berechnen. Aus der Sicht der Quantenfeldtheorie ist aber \hat{S}' wichtiger: Dort ist \hat{H} oft nicht streng konstruierbar und (oder) die Zerlegung $\hat{H} = \hat{H}_0 + V$ nicht durchführbar oder sinnvoll. Aber \hat{S}' ist auch in der Quantenmechanik nützlich, siehe Abschnitt 8.6. Dies hängt mit der folgenden wichtigen Bemerkung zusammen: Sei \hat{A} wieder eine Observable, die mit \hat{H}_0 kommutiert. Dann gilt wegen

$$\hat{A}_+ = \hat{\Omega}_- \hat{A} \hat{\Omega}_-^\dagger, \quad \hat{A}_- = \hat{\Omega}_+ \hat{A} \hat{\Omega}_+^\dagger$$

offenbar

$$\hat{A}_+ = \hat{\Omega}_- \hat{\Omega}_+^\dagger \hat{A}_- \hat{\Omega}_+ \hat{\Omega}_-^\dagger,$$

also

$$\hat{A}_+ = \hat{S}'^\dagger \hat{A}_- \hat{S}'. \quad (8.20)$$

Der Streuoperator \hat{S}' beschreibt für die asymptotische Konstante \hat{A} die zeitliche Evolution von $t = -\infty$ bis $t = +\infty$.

8.3 Die Lippmann-Schwinger-Gleichung

Sei $\{|\psi_E\rangle\}$ ein vollständiges Orthonormalsystem verallgemeinerter Eigenvektoren von \hat{H}_0 ,

$$\hat{H}_0 |\psi_E\rangle = E |\psi_E\rangle,$$

in \mathcal{H}_{ac} . Wir schreiben auch $|\vec{k}\rangle \equiv |\psi_E\rangle$ mit $E = \frac{\vec{k}^2 \hbar^2}{2m}$. Jede Asymptote kann nach diesem Orthonormalsystem entwickelt werden:

$$|\psi_{out}^{in}\rangle = \int d^3k C_{out}^{in}(\vec{k}) |\vec{k}\rangle,$$

⁹siehe [Thirring], Bd III, 3.4.7/ 2

wobei $C_{out}(\vec{k})$ die Profile der ein- bzw. auslaufenden Wellenpakete beschreibt. Wegen der Linearität gilt **formal**:

$$\hat{\Omega}_{\pm} |\psi_{in}\rangle = \int d^3k C_{out}(\vec{k}) \hat{\Omega}_{\pm} |\vec{k}\rangle. \quad (8.21)$$

Die Wirkung von $\hat{\Omega}_{\pm}$ wurde aber nur auf Elementen des $L^2(\mathbb{R}^3)$ definiert, auf Distributionen wirken die Møller-Operatoren a priori **nicht**. Es stellt sich das folgende schwierige mathematische **Problem**: Unter welchen Bedingungen kann man den Definitionsbereich von $\hat{\Omega}_{\pm}$ auf verallgemeinerte Eigenfunktionen ausdehnen, so daß tatsächlich (8.21) im mathematisch strengen Sinne gilt? Eine Klasse von Potentialen, für die dies gilt¹⁰ ist folgendermaßen definiert:

$$V \in \mathcal{R} \cap L^1(\mathbb{R}^3).$$

Dabei ist \mathcal{R} die bereits in Abschnitt 3.5 definierte Rollnik-Klasse,

$$(V \in \mathcal{R}) \Leftrightarrow \int_{\mathbb{R}^6} \frac{|V(\vec{x})V(\vec{y})|}{|\vec{x}-\vec{y}|^2} d^3x d^3y < \infty.$$

Wir nehmen im weiteren an, diese Bedingung sei erfüllt. Dann gilt (8.21) und die folgende Rechnung ist sinnvoll:

$$\begin{aligned} \hat{\Omega}_{\pm} |\psi_E\rangle &= \lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot t} |\psi_E\rangle \\ &= \left\{ \mathbf{1} + \lim_{t \rightarrow \mp\infty} \int_0^t d\tau \frac{d}{d\tau} \left(e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot\tau} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot\tau} \right) \right\} |\psi_E\rangle \\ &= \left\{ \mathbf{1} + \frac{i}{\hbar} \lim_{t \rightarrow \mp\infty} \int_0^t d\tau e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot\tau} V e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0\cdot\tau} \right\} |\psi_E\rangle \\ &= \left\{ \mathbf{1} + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \lim_{t \rightarrow \mp\infty} \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{H}-E \mp i\varepsilon)\tau} V \right\} |\psi_E\rangle \\ &= \left\{ \mathbf{1} - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\hat{H} - E \mp i\varepsilon} V \right\} |\psi_E\rangle \end{aligned}$$

Bemerkung 8.3

- (i) Der Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ heißt ‘‘Abelscher Limes’’¹¹. Er dient als Regularisator für obige Integrale. Im weiteren wird $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0}$ der Einfachheit wegen oft weggelassen.
- (ii) Der Operator

$$\left(\hat{H} - E \mp i\varepsilon \right)^{-1} = R_{\hat{H}}(E \pm i\varepsilon)$$

ist die Resolvente von \hat{H} . Ist \hat{H} selbstadjungiert, dann ist $R_{\hat{H}}(z)$ analytisch für $z \notin \sigma(\hat{H})$, d.h. für $\varepsilon > 0$ wohldefiniert. Der $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} R_{\hat{H}}(E \pm i\varepsilon)$ existiert im Distributionssinne.

Im Distributionensinne, als Operator auf dem Raum der verallgemeinerten Eigenfunktionen von \hat{H}_0 , gilt also im Grenzwert $\varepsilon \rightarrow 0$:

$$\hat{\Omega}_{\pm} = \mathbf{1} - \frac{1}{\hat{H} - E \mp i\varepsilon} V. \quad (8.22)$$

Wir verwenden die Resolventenidentität

$$\frac{1}{\hat{H} - z} = \frac{1}{\hat{H}_0 - z} - \frac{1}{\hat{H}_0 - z} V \frac{1}{\hat{H} - z} = \frac{1}{\hat{H}_0 - z} - \frac{1}{\hat{H} - z} V \frac{1}{\hat{H}_0 - z}.$$

¹⁰siehe [Reed/Simon], Bd. III, Abschnitt XI.6

¹¹siehe [Simon], Abschnitt V.3 für eine ausführliche Diskussion

(Man beweist sie indem man von links mit $\hat{H}_0 - z$ und von rechts mit $\hat{H} - z$ multipliziert.) Damit erhalten wir aus (8.22):

$$\begin{aligned}\hat{\Omega}_{\pm} &= \mathbf{1} - \frac{1}{\hat{H}_0 - E \mp i\epsilon} V + \frac{1}{\hat{H}_0 - E \mp i\epsilon} V \frac{1}{\hat{H} - E \mp i\epsilon} V \\ &= \mathbf{1} - \frac{1}{\hat{H}_0 - E \mp i\epsilon} V \left(\mathbf{1} - \frac{1}{\hat{H} - E \mp i\epsilon} V \right),\end{aligned}$$

also

$$\hat{\Omega}_{\pm} = \mathbf{1} - \frac{1}{\hat{H}_0 - E \mp i\epsilon} V \hat{\Omega}_{\pm}. \quad (8.23)$$

Dies ist die **Lippmann–Schwinger–Gleichung** für die Møller–Operatoren. Durch Anwendung von $\hat{\Omega}_{\pm}$ auf den verallgemeinerten Eigenvektor $|\psi_E\rangle$ erhalten wir den verallgemeinerten Eigenvektor (Streuzustand)

$$|\psi_{\pm, E}\rangle = \hat{\Omega}_{\pm} |\psi_E\rangle$$

des Hamiltonoperators \hat{H} zum gleichen (verallgemeinerten) Eigenwert E . Aus (8.23) erhalten wir die folgende **Lippmann–Schwinger–Gleichung** für Streuzustände:

$$|\psi_{\pm, E}\rangle = |\psi_E\rangle - \frac{1}{\hat{H}_0 - E \mp i\epsilon} V |\psi_{\pm, E}\rangle. \quad (8.24)$$

Wie in Abschnitt 7.3. erhält man durch Iteration die folgenden (abstrakten) **Bornschen Reihen**:

$$\hat{\Omega}_{\pm} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-1}{\hat{H}_0 - E \mp i\epsilon} V \right)^n, \quad (8.25)$$

$$|\psi_{\pm, E}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-1}{\hat{H}_0 - E \mp i\epsilon} V \right)^n |\psi_E\rangle, \quad (8.26)$$

(natürlich jeweils im Grenzwert $\epsilon \rightarrow 0$.)

Bemerkung 8.4

- i) Wir finden die **Lippmann–Schwinger–Gleichung in der Ortsdarstellung**. Unter Verwendung von (8.24) haben wir:

$$\langle \vec{x} | \psi_{\pm, E} \rangle = \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle - \int d^3 x' \left\{ \langle \vec{x} | \frac{1}{\hat{H}_0 - E \mp i\epsilon} | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | \psi_{\pm, E} \rangle V(\vec{x}') \right\}.$$

Es sind also die Matrixelemente der Resolvente in der Ortsdarstellung zu berechnen. Unter Verwendung von $\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}$ und mit $\vec{p} \equiv \hbar \vec{k}$ ergibt sich:

$$\begin{aligned}\langle \vec{x} | \frac{1}{\hat{H}_0 - E - i\epsilon} | \vec{x}' \rangle &= \iint d^3 p' d^3 p'' \langle \vec{x} | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}'' | \frac{1}{\hat{H}_0 - E - i\epsilon} | \vec{p}'' \rangle \langle \vec{p}'' | \vec{x}' \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \iint d^3 p' d^3 p'' e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{x}} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p}'' \cdot \vec{x}'} \frac{1}{E_{p'} - E - i\epsilon} \delta^3(\vec{p}' - \vec{p}'') \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p' e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} \frac{1}{E_{p'} - E - i\epsilon} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k' \frac{e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}}{\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k}'^2 - \vec{k}^2) - i\epsilon}.\end{aligned}$$

Dieses Integral berechnet man durch Übergang zu Kugelkoordinaten. Die Abintegration der Winkelkoordinaten ist trivial. Bei der Berechnung des radialen Anteils verwendet man den Residuensatz. Nach geeigneter Wahl der Kontur sieht man, daß ein einfacher Pol im Punkt $k' = k + i\varepsilon$ eingeschlossen wird. Damit erhält man:

$$\langle \vec{x} | \frac{1}{\hat{H}_0 - E} | \vec{x}' \rangle = \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}, \quad (8.27)$$

mit $k \equiv |\vec{k}|$. Dies liefert:

$$\psi_{+,\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} V(\vec{x}') \psi_{+,\vec{k}}(\vec{x}'). \quad (8.28)$$

Dies ist die Integralgleichung zur Berechnung des Streuzustandes $\psi_{+,\vec{k}}$ mit der Asymptote $e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ (einlaufende ebene Welle).

- ii) Der Integralkern $-\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}$ ist eine **Greensche Funktion** des inhomogenen Laplace-Operators¹²,

$$(\Delta + k^2)G_k(\vec{x}, \vec{x}') = \delta^3(\vec{x} - \vec{x}').$$

Für Streuzustände der Form

$$\psi(\vec{x}, t) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^{3/2}} \psi_{+,\vec{k}}(\vec{x}) C(\vec{k}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t}$$

folgt aus der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$(\Delta + k^2)\psi_{+,\vec{k}}(\vec{x}) = \tilde{V}(\vec{x}) \psi_{+,\vec{k}}(\vec{x}), \quad \tilde{V} \equiv \frac{2m}{\hbar^2} V.$$

Diese Gleichung ist äquivalent zur Integralgleichung

$$\psi_{+,\vec{k}}(\vec{x}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) + \int d^3x' G(\vec{x}, \vec{x}') \tilde{V}(\vec{x}') \psi_{+,\vec{k}}(\vec{x}'),$$

d.h. die obige Greensche Funktion liefert die Lippmann-Schwinger-Gleichung in der Ortsdarstellung. Die Møller-Operatoren sind also das abstrakte Pendant zu Greenschen Funktionen.

- iii) Die Lippmann-Schwinger-Gleichung erlaubt folgende Darstellung der Matrixelemente des Streuoperators:

$$\begin{aligned} \langle \phi_E | \hat{S} \psi_{E'} \rangle &= \langle \hat{\Omega}_- \phi_E | \hat{\Omega}_+ \psi_{E'} \rangle \\ &= \langle \hat{\Omega}_+ \phi_E | \hat{\Omega}_+ \psi_{E'} \rangle + \langle (\hat{\Omega}_- - \hat{\Omega}_+) \phi_E | \hat{\Omega}_+ \psi_{E'} \rangle \\ &= \langle \phi_E | \psi_{E'} \rangle - \langle \phi_E | V \left(\frac{1}{\hat{H} - E - i\varepsilon} - \frac{1}{\hat{H} - E + i\varepsilon} \right) \hat{\Omega}_+ \psi_{E'} \rangle \\ &= \langle \phi_E | \psi_{E'} \rangle - \langle \phi_E | V \hat{\Omega}_+ \left(\frac{1}{E' - E - i\varepsilon} - \frac{1}{E' - E + i\varepsilon} \right) \psi_{E'} \rangle \\ &= \langle \phi_E | \psi_{E'} \rangle - \frac{2i\varepsilon}{(E - E')^2 + \varepsilon^2} \langle \phi_E | V \hat{\Omega}_+ \psi_{E'} \rangle. \end{aligned}$$

Dabei wurde (8.7) verwendet, sowie die Tatsache, daß \hat{H} selbstadjungiert ist und daß die Møller-Operatoren Isometrien sind. Man zeigt leicht, daß

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{2i\varepsilon}{(E - E')^2 + \varepsilon^2} = 2\pi i \delta(E - E')$$

¹²siehe Elektrodynamik-Vorlesung

gilt. Wir bezeichnen

$$\hat{T} := V\hat{\Omega}_+. \quad (8.29)$$

Dieser Operator heißt **T-Operator**. Damit erhalten wir:

$$\langle \phi_E | \hat{S} \psi_{E'} \rangle = \langle \phi_E | \psi_{E'} \rangle - 2\pi i \delta(E - E') \langle \phi_E | \hat{T} \psi_{E'} \rangle. \quad (8.30)$$

Der Term $\langle \phi_E | \psi_{E'} \rangle$ ist natürlich proportional zu $\delta(E - E')$. Damit lesen wir aus (8.30) die **Energieerhaltung** im Streuprozeß ab¹³. Wegen

$$\hat{T} = V\hat{\Omega}_+ = V \left(\mathbf{1} - \frac{1}{\hat{H} - E - i\varepsilon} \right) V$$

genügt natürlich auch \hat{T} einer Lippmann-Schwinger-Gleichung:

$$\hat{T} = V - V \frac{1}{\hat{H}_0 - E - i\varepsilon} \hat{T}.$$

Damit erhält man für \hat{T} folgende Bornsche Reihe:

$$\hat{T} = V \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-1}{\hat{H}_0 - E - i\varepsilon} V \right)^n.$$

8.4 Streuamplitude und Streuquerschnitt

Wir bezeichnen $r \equiv |\vec{x}|$, $r' \equiv |\vec{x}'|$ und $\vec{n} \equiv \frac{\vec{x}}{r}$. Da nach Annahme das Potential V hinreichend schnell abklingt, können wir aus der Lippmann-Schwinger-Gl. (8.28) das asymptotische Verhalten der Streuzustände für $r \gg r'$ ableiten. Aus der Taylorentwicklung

$$|\vec{x} - \vec{x}'| = r \sqrt{1 + \frac{r'^2}{r^2} - 2 \frac{\vec{n} \cdot \vec{x}'}{r}} \simeq r \sqrt{1 - 2 \frac{\vec{n} \cdot \vec{x}'}{r}} \simeq r \left(1 - \frac{\vec{n} \cdot \vec{x}'}{r} \right) = r - \vec{n} \cdot \vec{x}'$$

folgt

$$\frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} \sim \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik\vec{n}\cdot\vec{x}'}$$

Setzen wir dies in (8.28) ein, so ergibt sich:

$$\psi_{+, \vec{k}}(\vec{x}) \underset{|\vec{x}| \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left\{ e^{i\vec{k}\vec{x}} + f(\vec{k}, \vec{k}') \frac{e^{ikr}}{r} \right\}, \quad (8.31)$$

mit

$$f(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi} \int d^3x' e^{-i\vec{k}'\vec{x}'} \tilde{V}(\vec{x}') \psi_{+, \vec{k}}(\vec{x}'). \quad (8.32)$$

Dabei wurden die Bezeichnungen $\tilde{V} \equiv \frac{2m}{\hbar^2} V$ und $\vec{k}' = \vec{n} \cdot \vec{k}$ verwendet. Die Größe $f(\vec{k}, \vec{k}')$ heißt **Streuamplitude**.

Bemerkung 8.5

(i) Offensichtlich gilt

$$f(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | V \psi_{+, \vec{k}} \rangle = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | V \hat{\Omega}_+ \vec{k} \rangle = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{T} \vec{k} \rangle,$$

¹³Siehe auch Eigenschaft ii) der Streumatrix in Abschnitt 8.2

also

$$f(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle. \quad (8.33)$$

Bis auf einen Normierungsfaktor ist die Streuamplitude durch die Matrixelemente des T-Operators gegeben.

- (ii) Die Formel (8.31) ist in Analogie zur Streuung in einer Dimension¹⁴ zu interpretieren: Der erste Term beschreibt eine **einlaufende ebene Welle** und der zweite Term eine **auslaufende Kugelwelle**. Die Funktion f trägt die gesamte Information über die Wechselwirkung mit dem Streuzentrum.

Wir betrachten nun ein Wellenpaket, gebildet aus Streuzuständen $\psi_{+, \vec{k}}$, für die wir der Einfachheit wegen $\psi_{\vec{k}}$ schreiben:

$$\psi(\vec{x}, t) = \int d^3k c(\vec{k}, t) \psi_{\vec{k}}$$

mit dem Profil

$$c(\vec{k}, t) = c(\vec{k}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k \cdot t}, \quad E_k = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}.$$

Einsetzen der Lippmann-Schwinger-Gleichung (8.31) für $\psi_{\vec{k}}$ liefert:

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi_{in}(\vec{x}, t) + \psi_S(\vec{x}, t), \quad (8.34)$$

wobei

$$\psi_{in}(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{i\vec{k}\vec{x}} c(\vec{k}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k \cdot t} \quad (8.35)$$

ein freies, auf das Streuzentrum fallendes Wellenpaket und

$$\psi_S(\vec{x}, t) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3k c(\vec{k}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_k \cdot t} \int d^3x' \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} V(\vec{x}') \psi_{+, \vec{k}}(\vec{x}') \quad (8.36)$$

die gestreute Welle bezeichnet. Das Einsetzen der asymptotischen Entwicklung (8.31) liefert

$$\psi_S(\vec{x}, t) \underset{|\vec{x}| \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k f(\vec{k}, \vec{k}') c(\vec{k}) \frac{1}{r} e^{\frac{i}{\hbar}(p \cdot r - E_p \cdot t)}, \quad p \equiv \hbar k. \quad (8.37)$$

Die auslaufende Welle ist also eine **Superposition von Kugelwellen**, wobei das Profil $c(\vec{k})$ des einlaufenden Wellenpaketes durch $f(\vec{k}, \vec{k}')$ modifiziert wird.

Wir stellen den **Bezug zum Experiment** her. Es werden natürlich nicht Wahrscheinlichkeiten vom Typ (8.13) gemessen, sondern Detektoren messen die Winkelverteilung der gestreuten Teilchen, bezogen auf den einfallenden Teilchenfluß. Die typische experimentelle Situation wird durch Abb. 8.2 veranschaulicht. Damit die weiteren Ausführungen sinnvoll sind, sollten die folgenden Annahmen über die im Experiment auftretenden typischen Längenskalen erfüllt sein:

$$\begin{aligned} a, \sqrt{\lambda D} &\ll l \\ a, \sqrt{\lambda D} &\ll d \ll D. \end{aligned} \quad (8.38)$$

Insbesondere sichert (8.38), daß praktisch **keine Interferenz** zwischen der einlaufenden und der gestreuten Welle stattfindet, $d \ll D \sin \theta$. (Die "nach vorn gestreute Welle", $\theta = 0$, liefert natürlich immer Interferenz. Wir werden dies noch in Zusammenhang mit dem optischen Theorem kommentieren.) Eine ausführliche Diskussion obiger Bedingungen findet man bei [Messiah], Bd.I, S. 334.

¹⁴Siehe Abschnitt 4.5

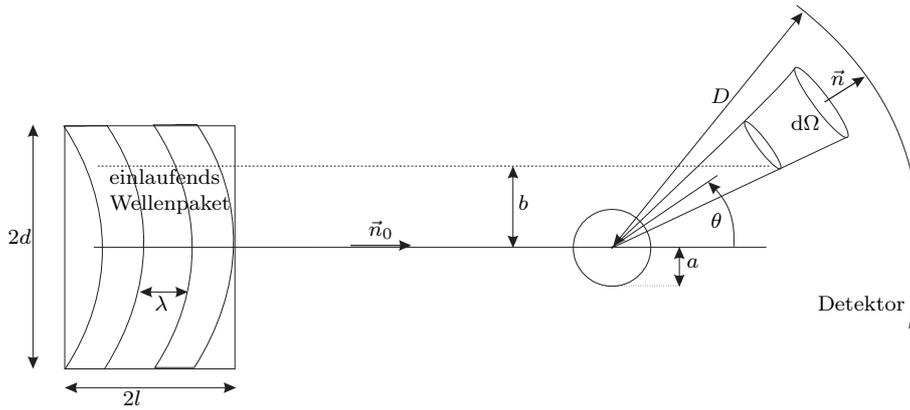


Abbildung 8.2: Streuexperiment

Das infinitesimale Flächenelement $d\vec{F} = \vec{n} dF$ ist in Kugelkoordinaten gegeben durch:

$$dF = r^2 d\Omega = r^2 \sin \theta d\theta d\varphi.$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß ein gestreutes Teilchen pro Sekunde durch das Flächenelement $d\vec{F}$ fliegt, ist $\vec{j}_S \cdot d\vec{F}$, wobei \vec{j}_S die Wahrscheinlichkeitsstromdichte für das gestreute Wellenpaket ψ_S bezeichnet. Also ist

$$P(d\Omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \vec{j}_S \cdot d\vec{F} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt r^2 d\Omega \vec{j}_S \cdot \vec{n}$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein gestreutes Teilchen zwischen $t = -\infty$ und $t = +\infty$ durch $d\Omega$ fliegt. Ist N die Zahl der Teilchen im auf das Streuzentrum fallenden Strahl, so ist

$$dN = NP(d\Omega)$$

die Zahl der in das Raumwinkelement $d\Omega$ gestreuten Teilchen. Bezeichnen wir die Wahrscheinlichkeitsstromdichte des einlaufenden Wellenpaketes ψ_{in} mit \vec{j}_{in} , so ist

$$D_{in} = \int_{-\infty}^{\infty} dt \vec{j}_{in} \cdot \vec{n}_0$$

die Wahrscheinlichkeit, daß ein Teilchen zwischen $t = -\infty$ und $t = +\infty$ durch eine Flächeneinheit senkrecht zum Teilchenstrahl fliegt. Also ist $I = ND_{in}$ die Zahl der durch diese Flächeneinheit fliegenden Teilchen zwischen $t = -\infty$ und $t = +\infty$. Das Verhältnis

$$d\sigma = \frac{dN}{I} \equiv \frac{P(d\Omega)}{D_{in}} \quad (8.39)$$

heißt **differentieller Wirkungsquerschnitt**. Wir erhalten

$$d\sigma = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dt r^2 \vec{j}_S \cdot \vec{n}}{\int_{-\infty}^{\infty} dt \vec{j}_{in} \cdot \vec{n}_0} d\Omega. \quad (8.40)$$

Man berechnet¹⁵ aus (8.35) und (8.37):

$$\vec{j}_{in}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2m} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k d^3k' \left\{ c^*(\vec{k}) c(\vec{k}') e^{\frac{i}{\hbar}(E_k - E_{k'})t} e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\vec{x}} \left(\vec{k} + \vec{k}' \right) \right\} \quad (8.41)$$

$$\begin{aligned} \vec{j}_S(\vec{x}, t) &= \frac{\hbar}{2m r^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k d^3k' \left\{ f^*(\vec{k}, \vec{n}k) f(\vec{k}', \vec{n}k') c^*(\vec{k}) c(\vec{k}') \right. \\ &\quad \left. \times e^{\frac{i}{\hbar}(E_k - E_{k'})t} e^{i(k' - k)r} (k + k') \frac{\vec{x}}{r} \right\}. \end{aligned} \quad (8.42)$$

Auf der Sphäre vom Radius R ergibt sich im Punkt $\vec{x} = R\vec{n}$:

$$\vec{j}_S(R\vec{n}, t) = \frac{\hbar}{2m R^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k d^3k' \left\{ f^*(\vec{k}, \vec{n}k) f(\vec{k}', \vec{n}k') c^*(\vec{k}) c(\vec{k}') e^{\frac{i}{\hbar}(E_k - E_{k'})t} e^{i(k' - k)R} \left(\vec{k} + \vec{k}' \right) \vec{n} \right\}.$$

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} P(d\Omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt R^2 d\Omega \vec{j} \cdot \vec{n} \\ &= \frac{\hbar^2}{m} \frac{d\Omega}{4\pi^2} \int d^3k d^3k' \left\{ f^*(\vec{k}, \vec{n}k) f(\vec{k}', \vec{n}k') c^*(\vec{k}) c(\vec{k}') \delta(E_k - E_{k'}) \frac{k + k'}{2} \right\}. \end{aligned}$$

Annahme: Sei das Profil c der einlaufenden Welle scharf um $\vec{k}_0 = k_0 \vec{n}_0$ konzentriert. Dann dominieren in obigem Integral die Beiträge aus einer kleinen Umgebung dieses Vektors und in guter Näherung gilt:

$$P(d\Omega) \cong D_S \cdot |f(\vec{k}_0, \vec{n}k_0)|^2 d\Omega,$$

mit

$$D_S = \frac{\hbar^2 k_0}{m 4\pi^2} \int d^3k d^3k' c^*(\vec{k}') c(\vec{k}) \delta(E_k - E_{k'}).$$

Andererseits berechnet man aus (8.41):

$$D_{in}(\vec{x}) = \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{4\pi^2} \int d^3k d^3k' \delta(E_k - E_{k'}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{x}} c^*(\vec{k}') c(\vec{k}) \vec{n}_0 \cdot \frac{\vec{k} + \vec{k}'}{2}.$$

Mit obiger Annahme, $\vec{k} \cong \vec{k}_0 \cong \vec{k}'$, ergibt sich

$$D_{in} \cong D_S.$$

Damit erhalten wir für den **differentiellen Wirkungsquerschnitt**

$$d\sigma = |f(\vec{k}_0, k_0 \vec{n})|^2 d\Omega, \quad (8.43)$$

wobei $\hbar \vec{k}_0$ der Impuls des einfallenden Teilchens und $\hbar k_0 \vec{n}$ der Impuls des gestreuten Teilchens in \vec{n} -Richtung ist. Wir definieren den **totalen Wirkungsquerschnitt** durch

$$\sigma_{\text{tot}}(\vec{k}_0) := \int d\sigma(\vec{k}_0, k_0 \vec{n}). \quad (8.44)$$

Bemerkung 8.6

- (i) Um die Theorie mit dem Experiment zu vergleichen, ist die Streuamplitude zu berechnen. Diese stellt andererseits über (8.33) und (8.30) die direkte Verbindung zur Streumatrix \hat{S} her.

¹⁵siehe Hausaufgabe Nr. 38

- (ii) Ein Beweis von (8.43) unter Verwendung der Beziehung (8.30) ist auch möglich, aber weniger anschaulich.¹⁶
- (iii) Eine Analyse des gesamten Flusses durch die Sphäre im Unendlichen führt zur Miteinbeziehung der Interferenzterme von einlaufender und auslaufender Welle. Wir integrieren zunächst die Kontinuitätsgleichung für den Wahrscheinlichkeitsstrom über eine Kugel mit Radius R :

$$\partial_t \int_{K_R} d^3x \varrho + \int_{\partial K_R} d\vec{S} \cdot \vec{j} = 0,$$

also

$$\int_{K_R} d^3x \varrho|_{t=+\infty} - \int_{K_R} d^3x \varrho|_{t=-\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{\partial K_R} d\vec{S} \cdot \vec{j} = 0.$$

Für $R \rightarrow \infty$ gilt natürlich $\int_{K_R} d^3x \varrho = 1$, so daß die totale Flußbilanz folgendermaßen aussieht:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{\partial K_R} d\vec{S} \cdot \vec{j} = 0. \quad (8.45)$$

Wie oben zerlegen wir $\psi = \psi_{in} + \psi_S$. Man hat nun \vec{j} unter Verwendung dieser Zerlegung in (8.45) einzusetzen und diese Gleichung auszuwerten. Man erhält die Summe von drei Termen

$$n_{in} + n_S + n_{in,S} = 0,$$

wobei n_{in} und n_S die Beiträge von \vec{j}_{in} und \vec{j}_S sind. Der Term $n_{in,S}$ beschreibt die Interferenz von einlaufender und auslaufender Welle. Natürlich gilt $n_{in} = 0$, denn ψ_{in} ist Lösung der freien Schrödingergleichung. Wir erhalten also

$$n_S = -n_{in,S}.$$

Eine längere, aber einfache Berechnung dieser beiden Flüsse liefert, wieder mit der Annahme, daß das Profil des Wellenpaketes streng um \vec{k}_0 konzentriert ist, das **optische Theorem**:

$$\sigma_{\text{tot}}(\vec{k}_0) = \frac{4\pi}{k_0} \Im f(\vec{k}_0, \vec{k}_0). \quad (8.46)$$

Der totale Wirkungsquerschnitt ist gegeben durch den Imaginärteil der Streuamplitude für die **Vorwärtsstreuung** ($\theta = 0$).

8.5 Streuung eines Teilchens am Zentralpotential

Aus Abschnitt 6.1 wissen wir, daß $\{\hat{H}_0, \hat{L}^2, \hat{L}_3\}$ für ein freies, spinloses Teilchen ein vollständiges System kommutierender Observabler bildet. Das zugehörige vollständige Orthonormalsystem, gebildet aus gemeinsamen verallgemeinerten Eigenvektoren wird wieder mit $\{|klm\rangle\}$ bezeichnet. Für die Ortsdarstellung gilt:

$$\langle \vec{x} | klm \rangle = \sqrt{\frac{2}{\pi}} i^l j_l(kr) Y_l^m(\hat{x}), \quad \hat{x} = \hat{x}(\theta, \varphi). \quad (8.47)$$

Dabei haben wir aus Konventionsgründen im Vergleich zu (6.31) die Normierung geändert, so daß

$$\langle k'l'm' | klm \rangle = \frac{\delta(k-k')}{k^2} \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

¹⁶siehe [Galindo/Pascual], Bd. II, Abschnitt 8.9

gilt. Andererseits haben wir nach (6.35) die folgende Partialwellenzerlegung für eine ebene Welle:

$$\begin{aligned} (2\pi)^{3/2} \langle \vec{x} | \vec{k} \rangle &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} i^l j_l(kr) \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\hat{\vec{k}}) Y_l^m(\hat{\vec{x}}) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta), \end{aligned} \quad (8.48)$$

wobei θ den Winkel zwischen \vec{k} und \vec{x} bezeichnet. Aus (8.47) und (8.48) liest man wegen

$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \int k'^2 dk' \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \langle \vec{x} | k'lm \rangle \langle k'lm | \vec{k} \rangle$$

die Gestalt der verallgemeinerten Eigenfunktionen in der Impulsdarstellung ab:

$$\langle \vec{k}' | klm \rangle = \frac{\delta(k' - k)}{k^2} Y_l^m(\hat{\vec{k}}'). \quad (8.49)$$

Wir erinnern an $[\hat{S}, \hat{H}_0] = 0$, siehe (8.11). Außerdem haben wir aus der Rotationsinvarianz des Zentralpotentials $[\hat{H}, \hat{L}] = 0$, und wegen $[\hat{H}_0, \hat{L}] = 0$ folgt aus (8.12):

$$[\hat{S}, \hat{L}] = 0, \quad (8.50)$$

d.h. \hat{S} ist auch rotationssymmetrisch. Damit kommutiert \hat{S} mit allen Operatoren des obigen vollständigen Systems kommutierender Observabler und die Eigenvektoren $|klm\rangle$ diagonalisieren \hat{S} . Da aber \hat{S} unitär ist, folgt

$$\hat{S} |klm\rangle = e^{2i\delta_{lm}(k)} |klm\rangle.$$

Schließlich bemerken wir, daß wegen (8.50) \hat{S} auch mit den aus \hat{L} gebildeten Leiteroperatoren kommutiert, $\hat{L}_{\pm}\hat{S} = \hat{S}\hat{L}_{\pm}$. Damit erhalten wir $\delta_{l,m} = \delta_{l,m\pm 1} \pmod{\pi}$, d.h. die Phasen $\delta_{lm}(k)$ sind unabhängig von m . Wir haben

$$\hat{S} |klm\rangle = e^{2i\delta_l(k)} |klm\rangle. \quad (8.51)$$

Die Größen $\delta_l(k)$ heißen **Streuphasen**.

Nun werten wir die grundlegende Beziehung (8.30),

$$\langle \vec{k}' | \hat{S} \vec{k} \rangle = \langle \vec{k}' | \vec{k} \rangle - 2\pi i \delta(E - E') \langle \vec{k}' | \hat{T} \vec{k} \rangle = \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') + \frac{i}{2\pi k} \delta(k - k') f(\vec{k}, \vec{k}'),$$

zwischen den Matrixelementen der Streumatrix und der Streuamplitude für den Fall des Zentralpotentials in der Basis $|klm\rangle$ aus: Für die linke Seite der Gleichung erhalten wir:

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}' | \hat{S} \vec{k} \rangle &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \int_0^{\infty} q^2 dq \langle \vec{k}' | qlm \rangle e^{2i\delta_l(q)} \langle qlm | \vec{k} \rangle \\ &= \frac{\delta(k' - k)}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} e^{2i\delta_l(k)} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\hat{\vec{k}}') Y_l^{m*}(\hat{\vec{k}}) \\ &= \frac{\delta(k' - k)}{k^2} \frac{1}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{2i\delta_l(k)} P_l(\hat{\vec{k}}' \cdot \hat{\vec{k}}). \end{aligned}$$

Die rechte Seite ergibt:

$$\begin{aligned} \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') + \frac{i}{2\pi k} \delta(k - k') f(\vec{k}, \vec{k}') &= \frac{\delta(k' - k)}{k^2} \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\hat{\vec{k}}') Y_l^{m*}(\hat{\vec{k}}) + \frac{ik}{2\pi} f(\vec{k}, \vec{k}') \right\} \\ &= \frac{\delta(k' - k)}{k^2} \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\hat{\vec{k}}' \cdot \hat{\vec{k}}) + \frac{ik}{2\pi} f(\vec{k}, \vec{k}') \right\}. \end{aligned}$$

Der Vergleich beider Seiten liefert:

$$2ik f(\vec{k}, \vec{k}') = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(e^{2i\delta_l(k)} - 1 \right) P_l(\hat{k}' \cdot \hat{k}).$$

Bezeichnen wir den Winkel zwischen \hat{k}' und \hat{k} mit θ , so erhalten wir die folgende **Partialwellenzerlegung der Streuamplitude**:

$$f(k, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos \theta), \quad (8.52)$$

mit

$$f_l(k) = \frac{1}{k} e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k). \quad (8.53)$$

Diese hängt nur von $k \equiv |\vec{k}|$ und θ ab. Aus (8.52) berechnet man unter Verwendung der Orthogonalitätsrelationen für die Legendre Polynome den **totalen Wirkungsquerschnitt**:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{tot}}(k) &= \int |f(k, \theta)|^2 d\Omega = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) f_l(k) f_{l'}(k) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) d\varphi d(\cos \theta) \\ &= 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |f_l(k)|^2, \end{aligned}$$

also

$$\sigma_{\text{tot}}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k). \quad (8.54)$$

Andererseits bemerken wir, daß wegen $P_l(1) = 1$

$$\Im f(k, 0) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{k} \sin^2 \delta_l(k),$$

gilt, also ist

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

Für den Fall des Zentralpotentials ist die Herleitung des optischen Theorems also trivial.

Bemerkung 8.7

Die Gleichungen (8.52) und (8.54) reduzieren die Lösung des Streuproblems auf die **Berechnung der Streuphasen**:

- i) Eine systematische Berechnung der Streuphasen ist natürlich möglich mit Hilfe der in Abschnitt 7.3 behandelten Störungstheorie. Nach (8.33) ist

$$f(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | V \hat{\Omega}_+ | \vec{k}' \rangle = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | V \psi_{+, \vec{k}} \rangle,$$

bzw. in der Ortsdarstellung, vgl mit (8.32):

$$f(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi} \int d^3 x' e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{x}'} \tilde{V}(\vec{x}') \psi_{+, \vec{k}}(\vec{x}'), \quad \tilde{V}(\vec{x}') \equiv \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{x}').$$

Nun ist Ordnung für Ordnung die Lippmann–Schwinger–Gleichung für die Streuzustände $|\psi_{+, \vec{k}}\rangle$ zu lösen und einzusetzen. Wir empfehlen dem Leser in diesem Zusammenhang die Lösung von Hausaufgabe Nr. 36.

- ii) In einfachen Beispielen gelingt eine Berechnung von f durch direkten Vergleich der Asymptotik des Streuzustandes mit der Asymptotik der freien Lösung. Wir erläutern dies etwas ausführlicher. Unter Verwendung von (8.31), (6.35) und (8.52) erhalten wir den folgenden Ausdruck für die Asymptote der Streuzustände:

$$\psi_{+, \vec{k}}(\vec{x}) \underset{|\vec{x}| \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left\{ e^{i\vec{k}\vec{x}} + f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right\} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left\{ i^l j_l(kr) + f_l(k) \frac{e^{ikr}}{r} \right\} P_l(\cos \theta).$$

Setzen wir die Asymptotik der sphärischen Besselfunktionen ein, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \psi_{+, \vec{k}}(\vec{x}) \underset{|\vec{x}| \rightarrow \infty}{\sim} & \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left\{ i^l \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} + \frac{e^{i\delta_l(k)}}{k} \sin \delta_l(k) \frac{e^{ikr}}{r} \right\} P_l(\cos \theta) \\ & = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{e^{i\delta_l(k)}}{kr} \sin\left(\delta_l(k) - l\frac{\pi}{2} + kr\right) P_l(\cos \theta), \end{aligned}$$

also

$$\frac{1}{r} u_{l,k}(r) \underset{|\vec{x}| \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^{i\delta_l(k)}}{kr} \sin\left(\delta_l(k) + kr - l\frac{\pi}{2}\right). \quad (8.55)$$

Durch Vergleich mit der Asymptotik

$$j_{l,k}(r) \underset{|\vec{x}| \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr}$$

der Besselfunktion ergibt sich die geometrische Interpretation der Streuphasen als Phasenverschiebung.

Die **effektive Streulänge** ist definiert als

$$\tilde{a} = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta_0(k)}{k}.$$

Beispiel 1: Die ideal harte Kugel. Dies ist ein sehr einfaches Modell für die Streuung mikroskopischer Teilchen am Atomkern. Wir setzen

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{für } r \leq R_0 \\ 0 & \text{für } r > R_0, \end{cases}$$

mit R_0 als Kernradius. Sei u_l eine reguläre Lösung der Radialgleichung, d.h. es muß gelten:

$$u_l(r) = 0 \quad \text{für } r \leq R_0 \quad \text{und} \quad \int_0^{\infty} |u_l|^2 dr < \infty.$$

Im Sinne der letzten Bemerkung hat u_l die folgende Asymptotik:

$$u_l \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k)\right). \quad (8.56)$$

Im Gebiet $r > R_0$ ist aber $V = 0$, d.h. u_l ist der Gestalt¹⁷:

$$u_l(kr) = kr (a_l h_l^+(kr) + b_l h_l^-(kr)) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} a_l e^{i(kr - l\frac{\pi}{2})} + b_l e^{-i(kr - l\frac{\pi}{2})}. \quad (8.57)$$

Der Vergleich mit (8.56) liefert

$$a_l = \frac{e^{i\delta_l}}{2i}, \quad b_l = -\frac{e^{-i\delta_l}}{2i},$$

¹⁷Siehe Abschnitt 6.2

also

$$u_l(kr) = \frac{kr}{2i} (e^{i\delta_l} h_l^+ - e^{-i\delta_l} h_l^-).$$

Die Randbedingung $u_l(R_0) = 0$ liefert

$$e^{i\delta_l} = \frac{h_l^-(kR_0)}{h_l^+(kR_0)} = \frac{n_l(kR_0) + i j_l(kR_0)}{n_l(kR_0) - i j_l(kR_0)},$$

also $\tan \delta_l = \frac{j_l(kR_0)}{n_l(kR_0)}$ bzw.

$$\delta_l = \arctan \frac{j_l(kR_0)}{n_l(kR_0)} + n\pi. \quad (8.58)$$

Für $l = 0$ ergibt sich

$$\delta_0 = n\pi - kR_0$$

und damit für die effektive Streulänge

$$\tilde{a} = R_0.$$

Mit $\sin^2 \delta_l = \frac{\tan^2 \delta_l}{1 + \tan^2 \delta_l}$ erhalten wir den folgenden totalen Wirkungsquerschnitt:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \frac{j_l^2(kR_0)}{n_l^2(kR_0) + j_l^2(kR_0)}. \quad (8.59)$$

Dieses Resultat kann man für die Grenzfälle hoher bzw. niedriger Energien weiter auswerten, vgl. Hausaufgabe Nr. 37.

Beispiel 2: Der kugelsymmetrische Potentialtopf Hier ist

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } r < r_0, \\ 0 & \text{für } r \geq r_0. \end{cases}$$

Wir bezeichnen $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ und $k_0^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)$. Für die radiale Wellenfunktion setzen wir an

$$R_l(r) = \begin{cases} A j_l(k_0 r) & \text{für } r < r_0, \\ B h_l^+(kr) + C h_l^-(kr) & \text{für } r \geq r_0, \end{cases}$$

vgl. Abschnitt 6.2. Vergleichen wir die Asymptotik für $r \rightarrow \infty$ von R_l mit (8.55), so erhalten wir

$$B = \frac{e^{i2\delta_l}}{2i}, \quad C = -\frac{l}{2i}$$

und damit

$$R_l(r) = e^{i\delta_l} (\cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l n_l(kr)), \quad r \geq r_0.$$

Als nächstes werten wir die Anschlußbedingungen bei $r = r_0$ aus. Die Stetigkeit von R_l legt A fest. Dies wird im weiteren nicht benötigt. Die Stetigkeit der logarithmischen Ableitung $\frac{1}{R_l} \frac{d}{dr} R_l \Big|_{r=r_0}$ liefert

$$k_0 \frac{j_l'(k_0 r_0)}{j_l(k_0 r_0)} = k \frac{j_l'(kr_0) \cos \delta_l - n_l'(kr_0) \sin \delta_l}{j_l(kr_0) \cos \delta_l - n_l(kr_0) \sin \delta_l}.$$

Wir stellen dies nach δ_l um und erhalten die allgemeine Formel für die Streuphase dieses Problems:

$$\tan \delta_l = \frac{k_0 j_l'(k_0 r_0) j_l(kr_0) - k j_l'(kr_0) j_l(k_0 r_0)}{k_0 j_l'(k_0 r_0) n_l(kr_0) - k n_l'(kr_0) j_l(k_0 r_0)}. \quad (8.60)$$

Wir berechnen die modifizierte Streuamplitude

$$\tilde{f}_l := \frac{k}{2l+1} f_l = e^{i\delta_l} \sin \delta_l = \tan \delta_l \frac{1 + i \tan \delta_l}{1 + \tan^2 \delta_l}.$$

Bezeichnen wir Zähler und Nenner der rechten Seite von (8.60) mit A bzw. B , so gilt $\tan \delta_l = \frac{A}{B}$ und damit

$$\begin{aligned} \tilde{f}_l &= \frac{AB + iA^2}{B^2 + A^2} \\ &= \frac{A(B + iA)}{(B + iA)(B - iA)} \\ &= \frac{A}{B - iA} \\ &= \frac{k_0 j_l'(k_0 r_0) j_l(kr_0) - k j_l'(kr_0) j_l(k_0 r_0)}{k_0 j_l'(k_0 r_0) n_l(kr_0) - k n_l'(kr_0) j_l(k_0 r_0) - i(k j_l'(kr_0) j_l(k_0 r_0) - k_0 j_l'(k_0 r_0) j_l(kr_0))} \\ &= \frac{k j_l'(kr_0) j_l(k_0 r_0) - k_0 j_l'(k_0 r_0) j_l(kr_0)}{k j_l'(kr_0) h_l^{+'}(kr_0) - k_0 j_l'(k_0 r_0) h_l^+(kr_0)} \end{aligned} \quad (8.61)$$

Wir werten (8.60) für $l = 0$, also für s -Wellenstreuung aus. Durch Einsetzen von $j_0 = \frac{\sin \varrho}{\varrho}$ und $n_0 = -\frac{\cos \varrho}{\varrho}$ und Kürzen des Ausdrucks $\frac{\cos(k_0 r_0) \cos(kr_0)}{k a^2}$ ergibt sich

$$\tan \delta_l = \frac{\frac{k}{k_0} \tan(k_0 r_0) - \tan(kr_0)}{1 + \frac{k}{k_0} \tan(k_0 r_0) \tan(kr_0)}.$$

Daraus ergibt sich

$$\delta_0(k) = \arctan \left(\frac{k}{k_0} \tan(k_0 r_0) \right) - kr_0 + n\pi. \quad (8.62)$$

Die effektive Streulänge ist damit

$$\tilde{a} = r_0 \left(1 - \frac{\tan(\kappa_0 r_0)}{\kappa_0 r_0} \right),$$

wobei wir

$$\kappa_0 \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0}$$

gesetzt haben.

Als nächstes betrachten wir die niederenergetische Streuung am tiefen Topf. Sei $E \ll V_0$ und $kr_0 \ll 1$, d. h. sei die de Broglie-Wellenlänge groß gegenüber dem Potentialradius. Durch Einsetzen des asymptotischen Verhaltens für $kr_0 \rightarrow 0$ aus Abschnitt 6.2,

$$\begin{aligned} j_l(kr_0) &\sim \frac{(kr_0)^l}{(2l+1)!!}, & j_l'(kr_0) &\sim \frac{l(kr_0)^{l-1}}{(2l+1)!!}, \\ n_l(kr_0) &\sim \frac{(2l-1)!!}{(kr_0)^{l+1}}, & n_l'(kr_0) &\sim -\frac{(l+1)(2l-1)!!}{(kr_0)^{l+2}}, \end{aligned}$$

in (8.60) erhalten wir

$$\tan \delta_l \sim \frac{(kr_0)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \frac{k_0 r_0 j_l'(k_0 r_0) - l j_l(k_0 r_0)}{(l+1) j_l(k_0 r_0) + k_0 r_0 j_l'(k_0 r_0)}. \quad (8.63)$$

Man kann hier k_0 durch κ_0 ersetzen. Die modifizierte Streuamplitude $\tilde{f}_l(k)$ hat exakt dieselbe Asymptotik, da n_l und h_l^+ für $kr_0 \rightarrow 0$ die gleichen Asymptoten haben.

Wir nehmen zunächst an, daß der Nenner für kein l verschwindet (keine Resonanz). Dann ist

$$\sigma_{\text{tot}} \sim \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0,$$

d. h. die s -Wellenstreuung dominiert. Aus (8.62) lesen wir

$$\delta_0 \sim kr_0 \left(\frac{\tan \kappa_0 r_0}{\kappa_0 r_0} - 1 \right) + n\pi = n\pi - k\tilde{a}$$

ab. Damit ergibt sich

$$\sigma_{\text{tot}} \sim \frac{4\pi}{k^2} (k\tilde{a})^2 = 4\pi\tilde{a}^2, \quad (8.64)$$

also ein analoges Resultat wie für die harte Kugel aus Beispiel 1, nur mit einer anderen effektiven Streulänge $\tilde{a} \neq a$. (Diese Formel ist typisch für alle Potentiale endlicher Reichweite bei niedrigen Energien außerhalb von Resonanzen.)

Wir betrachten nun Energien in der Nähe einer Resonanzenergie E_R , d. h., einer Energie für die ein l existiert, so daß der Nenner in (8.63) verschwindet:

$$(l+1)j_l(k_0 r_0) + k_0 r_0 j'_l(k_0 r_0) = 0. \quad (8.65)$$

Die entsprechende Streuamplitude f_l hat bei E_R eine Singularität. Wir entwickeln den Nenner in erster Ordnung um $E = E_R$:

$$\begin{aligned} & (l+1)j_l(k_0 r_0) + k_0 r_0 j'_l(k_0 r_0) \\ &= 0 + (E - E_R) \left. \frac{d}{dE} \right|_{E=E_R} \left((l+1)j_l(k_0 r_0) + k_0 r_0 j'_l(k_0 r_0) \right) + O((E - E_R)^2). \end{aligned}$$

Einsetzen in (8.63) liefert mit der Bezeichnung $k_R^2 = \frac{2m(E_R + V_0)}{\hbar^2}$

$$\tilde{f}_l \sim \tan \delta_l \sim \frac{(k_R r_0)^{2l+1}}{E - E_R} \gamma_l,$$

wobei wir

$$\gamma_l = \frac{1}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \left\{ \frac{(l+1)j_l(k_0 r_0) + k_0 r_0 j'_l(k_0 r_0)}{\left. \frac{d}{dE} \left((l+1)j_l(k_0 r_0) + k_0 r_0 j'_l(k_0 r_0) \right) \right|_{E=E_R}} \right\}$$

gesetzt haben. Mit

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

folgt

$$\sigma_l = \frac{4\pi(2l+1)}{k_R^2} \frac{\gamma_l^2 (k_R r_0)^{4l+2}}{(E - E_R)^2 + \gamma_l^2 (k_R r_0)^{4l+2}}. \quad (8.66)$$

Dies ist eine **Breit-Wigner-Kurve** mit Maximum

$$\sigma_l^{\text{max}} = \frac{4\pi(2l+1)}{k_R^2}$$

und Halbwertsbreite

$$\Delta E_l = 2|\gamma_l| (k_R r_0)^{2l+1}.$$

Die Resonanz ist offensichtlich umso schärfer, je kleiner $k_R r_0$ ist.

Sei nun außerdem $k_0 r_0 \gg l$, d. h., sei der Potentialtopf sehr tief und schmal. Setzen wir die Asymptotik

$$\begin{aligned} j_l(k_0 r_0) &\stackrel{k_0 r_0 \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\sin\left(k_0 r_0 - l\frac{\pi}{2}\right)}{k_0 r_0}, \\ j'_l(k_0 r_0) &\stackrel{k_0 r_0 \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\cos\left(k_0 r_0 - l\frac{\pi}{2}\right)}{k_0 r_0} - \frac{\sin\left(k_0 r_0 - l\frac{\pi}{2}\right)}{(k_0 r_0)^2} \end{aligned}$$

in die Resonanzgleichung (8.65) ein, erhalten wir

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{(l+1)}{k_0 r_0} \sin\left(k_0 r_0 - l\frac{\pi}{2}\right) + k_0 r_0 \left(\frac{1}{k_0 r_0} \cos\left(k_0 r_0 - l\frac{\pi}{2}\right) - \frac{1}{(k_0 r_0)^2} \sin\left(k_0 r_0 - l\frac{\pi}{2}\right) \right) \\ &= \frac{l}{k_0 r_0} \sin\left(k_0 r_0 - l\frac{\pi}{2}\right) + \cos\left(k_0 r_0 - l\frac{\pi}{2}\right) \\ &= -\frac{l}{k_0 r_0} \cos\left(k_0 r_0 - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) + \sin\left(k_0 r_0 - (l+1)\frac{\pi}{2}\right), \end{aligned}$$

also

$$\tan\left(k_0 r_0 - (l+1)\frac{\pi}{2}\right) = \frac{l}{k_0 r_0}$$

und damit

$$k_0 r_0 - l\frac{\pi}{2} \sim \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi + \frac{l}{k_0 r_0}.$$

Aufgrund der Voraussetzung $k_0 r_0 \gg l$ ist dies für große n gültig. Vernachlässigen wir $\frac{l}{k_0 r_0} \ll 1$, ergibt sich gerade die Bedingung für gebundene Zustände im tiefen Zentralpotential.¹⁸

$$k_0 r_0 - l\frac{\pi}{2} \sim \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi.$$

Man spricht deshalb bei dem zugehörigen Streuzustand von einem metastabilen Zustand.

Die Beiträge der Partialquerschnitte $\sigma_{l'}$, $l' \neq 0$, die die Resonanzbedingung nicht erfüllen, ergeben sich zu

$$\sigma_{l'} = \frac{4\pi}{k^2} (2l'+1) \sin^2 \delta_{l'} \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} \frac{4\pi}{k^2} (2l'+1) \frac{(kr_0)^{4l'+2}}{1 + (kr_0)^{4l'+2}} \rightarrow 0.$$

Sie sind also gegenüber σ_l vernachlässigbar, d. h., der metastabile Zustand bestimmt die Winkelverteilung. Für eine detailliertere Diskussion des Falles $l = 0$ verweisen wir auf [Nolting], S. 318 oder [Grawert], S. 82.

8.6 Streuung am Coulomb-Potential

Wie bereits früher betont, existieren die Møller-Operatoren für den Fall des Coulomb-Potentials nicht. Man kann allerdings eine physikalisch sinnvolle modifizierte Form dieser Operatoren konstruieren. Deren Gestalt wird durch die folgende klassische Betrachtung nahegelegt. Setzen wir der Einfachheit wegen die reduzierte Masse $\mu = 1$ und die Kopplungskonstante im Potential $\kappa = 1$, so haben die klassischen Bewegungsgleichungen (nach Abseparation der Schwerpunktsbewegung) die Form

$$\ddot{\vec{x}} = -\frac{\vec{x}}{r^3}, \quad r = |\vec{x}|.$$

Die Erhaltungsgrößen $\vec{L} = \vec{x} \times \dot{\vec{x}}$ (Drehimpuls) und $E = \frac{1}{2} \dot{\vec{x}}^2 - \frac{1}{r}$ (Energie) liefern die folgende Polargleichung für die Bahnkurve in der Ebene senkrecht zu \vec{L} :

$$\frac{1}{r(\theta)} = \frac{1}{l^2} \left(1 + \sqrt{1 + 2El^2} \cos(\theta - \theta_0) \right), \quad l = |\vec{L}|.$$

¹⁸vgl. Abschnitt 6.2

Dies ist für $E < 0$ eine Ellipse, für $E = 0$ eine Parabel und für $E > 0$ eine Hyperbel. Dieser Fall interessiert uns hier, er ist relevant für die Streuung.

Wir zeigen, daß die **zeitliche Asymptotik** für ein Teilchen im Coulombpotential **nicht** mit der eines freien Teilchens übereinstimmt.

Zunächst bemerken wir

$$|\dot{\vec{x}}| = \sqrt{2(E + \frac{1}{r})} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sqrt{2E},$$

also hat $\dot{\vec{x}}$ asymptotisch einen konstanten Betrag. Außerdem hat $\dot{\vec{x}}$ eine wohldefinierte asymptotische Richtung \vec{c} , (definiert durch den Tangentialvektor an die Hyperbel im Limes $r \rightarrow \infty$.) Also gilt asymptotisch

$$\vec{x}(t) = \vec{c} \cdot t + \mathcal{O}(t).$$

Um dies mit der Asymptotik

$$\vec{x}_{frei}(t) = \vec{c} \cdot t + \vec{b}$$

des freien Teilchens vergleichen zu können, muß man $\mathcal{O}(t)$ genauer analysieren. Wir erhalten:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} |\dot{\vec{x}}| = \sqrt{E + \frac{1}{r}} = \sqrt{E} \left(1 + \frac{1}{2Er} + \dots \right) = \sqrt{E} \left(1 + \frac{1}{2Ect} + \dots \right),$$

denn $r(t) = c \cdot t + \dots$, $c = |\vec{c}|$. Integrieren wir über t , so erhalten wir

$$\vec{x}(t) = \vec{c} \cdot t + \vec{d} \cdot \ln t + \dots$$

Der logarithmische Term verhindert, daß sich das Teilchen asymptotisch an \vec{x}_{frei} annähert.

Diese Betrachtungen legen nahe, den freien Hamiltonoperator in der Quantentheorie so zu modifizieren, daß er diesem logarithmischen Beitrag Rechnung trägt. Anstelle von $e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}$ sollte man $e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 s(t)}$ betrachten, mit

$$s(t) = t + d \ln t,$$

wobei d natürlich von der Energie abhängen sollte. Allgemeiner gesagt, sollte $\hat{H}_0 t$ durch $\hat{H}_0 t + f(\hat{H}_0) \ln t$ ersetzt werden, wobei $f(\hat{H}_0)$ eine geeignete Operatorfunktion ist. Verschiedene konkrete Realisierungen dieser Idee sind bekannt. Eine Möglichkeit ist¹⁹:

$$\hat{\Omega}_{\pm} = \underset{t \rightarrow \mp \infty}{s\text{-}\lim} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot t} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}_D(s) ds}, \quad (8.67)$$

wobei

$$\hat{H}_D(t) = \hat{H}_0 - \frac{1}{2p|t|} \Theta(|\frac{t}{\hbar} \hat{H}_0| - 1), \quad p = |\vec{p}|. \quad (8.68)$$

Dies ist eine wohldefinierte Operatorfunktion im Impulsraum. Man beweist²⁰, daß diese modifizierten Møller-Operatoren existieren und daß sie die üblichen Eigenschaften haben.

Man kann nun, genauso wie in den vorangehenden Abschnitten beschrieben, die Streutheorie für diesen Fall entwickeln. Die oben diskutierten logarithmischen Korrekturen findet man allerdings auch in der Asymptotik der Streuzustände wieder, d.h. Streuzustände mit dem asymptotischen Verhalten

$$e^{ikz} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

findet man nicht. Sucht man mit dem Ansatz

$$\psi(\vec{x}) = e^{ikz} \cdot G(\chi), \quad \chi = ik(r - z),$$

¹⁹siehe [Reed/Simon], Bd. III, Abschnitt XI.9

²⁰siehe [Reed/Simon], Bd. III, Satz XI.71

nach Lösungen der Schrödinger-Gleichung, so ergibt sich eine konfluente hypergeometrische Gleichung

$$\eta G''(\chi) + (1 - \chi)G'(\chi) + i\gamma G(\chi) = 0, \quad \gamma = \frac{Ze^2\mu}{\hbar^2 k}.$$

Die im Nullpunkt reguläre Lösung dieser Gleichung liefert die folgende Asymptotik

$$\psi(\vec{x}) \underset{|\vec{x}| \rightarrow \infty}{\sim} e^{ikz + i\gamma \ln(2kr \sin^2 \frac{\theta}{2})} - \frac{\gamma}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} e^{2i\sigma_0} \frac{e^{i(kr - \gamma \ln[2kr])}}{r}. \quad (8.69)$$

Die Größe

$$\sigma_0 = \arg\Gamma(1 + i\gamma) \quad (8.70)$$

heißt nullte Coulomb-Streuphase. Wir lesen (zunächst völlig kritiklos) die folgende Streuamplitude ab:

$$f_k(\theta) = -\frac{\gamma}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} \exp\left(2i\sigma_0 - i\gamma \ln(\sin^2 \frac{\theta}{2})\right).$$

Daraus folgt:

$$d\sigma = \left(\frac{Ze^2}{4E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} d\Omega. \quad (8.71)$$

Wir erhalten also die **gleiche Formel** (Rutherford) wie im klassischen Fall. Außerdem erhält man auch im Rahmen der ersten Bornschen Näherung exakt diese Formel. Diese Sachverhalte werden in der physikalischen Literatur üblicherweise als “zufällig” interpretiert.

Wir diskutieren die asymptotischen Formel (8.69):

- i) der erste Term kann selbst für unendlich große Entfernungen nicht mit einer ebenen Welle verglichen werden. Das Coulombfeld hat eine solch große Reichweite, daß es die einfallenden Wellen bis in die asymptotische Zone hinein beeinflusst. Andererseits erhält man für $z \rightarrow -\infty$ die Stromdichte $j = \frac{\hbar k}{m}$ (in Richtung der z -Achse). Der logarithmische Term liefert Korrekturen der Größenordnung $\frac{1}{r}$, die man vernachlässigen kann. Damit scheint eine Interpretation des ersten Terms als einfallende Welle einigermaßen gerechtfertigt zu sein.
- ii) Ein analoge Diskussion rechtfertigt die Interpretation des zweiten Terms als auslaufende, gestreute Welle.
- iii) Aus Formel (8.71) lesen wir ab: Der Wirkungsquerschnitt hängt nicht vom Vorzeichen des Potentials ab, die Winkelverteilung ist energieunabhängig und bei gegebenem Winkel fällt der Wirkungsquerschnitt mit wachsender Energie wie $\frac{1}{E^2}$ ab. Für $\theta = 0$ ist $d\sigma$ divergent, folglich ist auch der totale Wirkungsquerschnitt divergent. Das reine Coulombfeld tritt allerdings in der Natur nicht auf. Es gibt immer Abschirmeffekte, z.B. durch das Feld der Elektronenhülle bei der Streuung eines geladenen Teilchens am Atomkern.

Wir sehen, daß die obige Herleitung der **exakten** Formel (8.71) etwas fragwürdig erscheint. In der Tat läßt sich diese **streng** herleiten, siehe [Thirring], Bd. III, 4.1.23 – 4.1.26. Wir führen diese Herleitung für den interessierten Leser (unter Weglassung einiger Details) in einer abschließenden, zusätzlichen Bemerkung vor.

Bemerkung 8.8

Wir setzen hier, der Einfachheit wegen, $\hbar = 1$. Bezeichne \hat{P} wieder den Projektor auf das kontinuierliche Spektrum von \hat{H} . Man zeigt zunächst, daß $(\hat{P}\hat{p}\hat{P}, \hat{P}\frac{\hat{x}}{r}\hat{P}, \hat{P}\frac{1}{r}\hat{P})$ asymptotische Konstanten sind und daß gilt²¹:

$$s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \left(\hat{P}\hat{p}\hat{P}, \hat{P}\frac{\hat{x}}{r}\hat{P}, \hat{P}\frac{1}{r}\hat{P} \right) = \left(\hat{p}_{\pm}, \pm \frac{\hat{p}_{\pm}}{|\hat{p}_{\pm}|}, 0 \right).$$

²¹[Thirring], Bd. III, 4.1.18

Dabei bezeichnet \hat{P} wieder den Projektor auf \mathcal{H}_{ac} . Nun gilt mit (8.20)

$$\hat{p}_+ = \hat{S}'^\dagger \hat{p}_- \hat{S}' . \quad (8.72)$$

Wir zeigen, daß die \hat{p}_+ und \hat{p}_- verknüpfende Relation im Falle des Coulomb-Potentials exakt bestimmt werden kann. Daraus liest man, unter Verwendung der Drehinvarianz von \hat{S}' , diesen Operator (bis auf eine freie Phase) ab. Die entscheidende Rolle bei der Herleitung dieser Relation spielt wieder, wie im Fall der gebundenen Zustände, der **Lenz-Runge-Vektor** \hat{F} . Da \hat{H} und \hat{F} Bewegungskonstanten sind, gilt

$$\hat{P} \hat{H} \hat{P} = \frac{\hat{p}_+^2}{2\mu} = \frac{\hat{p}_-^2}{2\mu} \quad (8.73)$$

und mit $\eta \equiv \frac{\mu\kappa}{|\hat{p}_\pm|} = \frac{\mu\kappa}{\sqrt{2\mu\hat{H}}}$ erhalten wir

$$\hat{P} \hat{F} \hat{P} = \frac{i}{2} [\hat{p}_\pm, \hat{L}^2] \pm \eta \hat{p}_\pm . \quad (8.74)$$

Man beweist nun leicht, durch direktes Nachrechnen, die folgende Identität:

$$\epsilon_{ijk} \hat{F}_j \hat{L}_k = -\hat{p}_i^\pm \hat{L}^2 \pm \eta \hat{F}_i - \eta^2 \hat{p}_i^\pm \pm i\eta \hat{p}_i^\pm .$$

Daraus lesen wir ab:

$$\epsilon_{ijk} \hat{F}_j \hat{L}_k = -\hat{p}_i^+ (\hat{L}^2 + \eta^2 - i\eta) + \eta \hat{F}_i = -\hat{p}_i^- (\hat{L}^2 + \eta^2 + i\eta) - \eta \hat{F}_i ,$$

also

$$\hat{p}_i^+ = \left(\hat{p}_i^- (\hat{L}^2 + \eta^2 + i\eta) + 2\eta \hat{F}_i \right) (\hat{L}^2 + \eta^2 - i\eta)^{-1} .$$

Setzen wir \hat{F}_i ein, so ergibt sich:

$$\hat{p}_i^+ = \hat{p}_i^- \frac{(1+i\eta)\hat{L}^2 + i\eta - \eta^2}{\hat{L}^2 - i\eta + \eta^2} - i\eta \hat{L}^2 \hat{p}_i^- \frac{1}{\hat{L}^2 - i\eta + \eta^2} . \quad (8.75)$$

Dies ist die exakte Relation zwischen den asymptotischen Konstanten \hat{p}_i^+ und \hat{p}_i^- . (Die rechte Seite dieser Gleichung ist eine wohldefinierte Operatorfunktion.)

Bezeichnen wir wieder

$$\psi_+(k) = \hat{\Omega}_+ |k\rangle ,$$

so liefern die $|lm\rangle \otimes \psi_+(k)$ ein vollständiges System verallgemeinerter Eigenzustände von \hat{H} . Da \hat{S}' dreihinvariant ist und mit \hat{H} kommutiert, gilt – in Analogie zu (8.51) –

$$\hat{S}' |lm\rangle \otimes \psi_+(k) = e^{2i\delta_l(k)} |lm\rangle \otimes \psi_+(k) . \quad (8.76)$$

Hierbei haben wir noch verwendet, daß \hat{S} und \hat{S}' die gleichen Streuphasen haben. Dies folgt aus der Unitarität der Møller-Operatoren und aus (8.19). Schließlich beweist man, völlig analog wie für \hat{x}_+ in Hausaufgabe Nr. 26, daß \hat{p}_3^+ den Eigenwert l um 1 erhöht. Außerdem kommutiert \hat{p}_3^+ natürlich mit \hat{L}_3 und mit \hat{H} . Damit erhält man durch Anwendung der Vektoren $\langle l+1, m|$ von links und $|lm\rangle$ von rechts auf (8.75):

$$\langle l+1, m | \hat{p}_3^+ | lm \rangle = \langle l+1, m | \hat{p}_3^- | lm \rangle \frac{l+1-i\eta}{l+1+i\eta} .$$

Außerdem gilt

$$\langle l+1, m | \hat{S}'^\dagger \hat{p}_3^- \hat{S}' | lm \rangle = e^{-2i\delta_{l+1}(k)} e^{2i\delta_l(k)} \langle l+1, m | \hat{p}_3^- | lm \rangle ,$$

also insgesamt

$$\frac{\langle l+1, m | \hat{p}_3^+ | lm \rangle}{\langle l+1, m | \hat{p}_3^- | lm \rangle} = \frac{l+1-i\eta}{l+1+i\eta} = e^{2i(\delta_l - \delta_{l+1})}. \quad (8.77)$$

Wir setzen

$$e^{2i\delta_0(k)} = \frac{\Gamma(1+i\eta)}{\Gamma(1-i\eta)}$$

und lösen (8.77) rekursiv. Dies liefert:

$$e^{2i\delta_l(k)} = \frac{\Gamma(l+1+i\eta)}{\Gamma(l+1-i\eta)} \equiv \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \sqrt{l(l+1) + \frac{1}{4}} + i\eta\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \sqrt{l(l+1) + \frac{1}{4}} - i\eta\right)}. \quad (8.78)$$

Damit erhalten wir die folgende **exakte** Formel für die **Streumatrix in der Heisenberg-Darstellung**:

$$\hat{S}' = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \sqrt{\hat{L}^2 + \frac{1}{4}} + i\eta(\hat{H})\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \sqrt{\hat{L}^2 + \frac{1}{4}} - i\eta(\hat{H})\right)}. \quad (8.79)$$

Dies ist eine wohldefinierte Operatorfunktion. Wir verweisen in diesem Zusammenhang auf Bemerkung 3.12, Punkt iii). Wir bemerken, daß man \hat{S} wegen (8.19) aus (8.79) erhält, indem man \hat{H} durch \hat{H}_0 ersetzt.

Mit der Streuphase (8.78) erhalten wir die folgende **Streuamplitude**:

$$f(k, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos \theta), \quad (8.80)$$

mit

$$f_l(k) = \frac{1}{2ik} \left(\frac{\Gamma(l+1+i\eta)}{\Gamma(l+1-i\eta)} - 1 \right). \quad (8.81)$$

Die obige Summe kann man explizit berechnen²²:

$$f(k, \theta) \equiv f(k, \vec{n}, \vec{n}') = \frac{i\eta}{2k} \left(\frac{4}{|\vec{n} - \vec{n}'|^2} \right)^{1+i\eta} \frac{\Gamma(1+i\eta)}{\Gamma(1-i\eta)} - \frac{1}{2ik} \delta(\vec{n} - \vec{n}'). \quad (8.82)$$

Dabei bezeichnet $\delta(\vec{n} - \vec{n}')$ die δ -Distribution auf der Sphäre S^2 und wir haben, im Vergleich zu früheren Bezeichnungen, $\vec{n} \equiv \hat{k}$ und $\vec{n}' \equiv \hat{k}'$ gesetzt. Für $\vec{n} \neq \vec{n}'$ erhalten wir daraus sofort

$$d\sigma(k, \vec{n}, \vec{n}') = |f(k, \vec{n}, \vec{n}')|^2 = \left(\frac{Ze^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} d\Omega. \quad (8.83)$$

²²[Thirring], Bd. III, 4.1.25, Aufgabe 7