

Grundlagen der Quantentheorie

I. Teil: Nichtrelativistische Quantentheorie

Hendrik van Hees

04. Oktober 1999

Zusammenfassung

Die Quantentheorie ist heute die umfassendste Theorie der Physik. Sie beschreibt Elementarteilchen, Atome, Moleküle und Festkörper in hervorragender Übereinstimmung mit dem Experiment. Von einem etwas puristischen Standpunkt aus betrachtet kann man sagen, daß alle Physik heute Quantenphysik ist!

In diesem Artikel soll die nichtrelativistische Quantentheorie in ihren Grundzügen erläutert werden. Dabei liegt das Gewicht bei der Begründung der Begriffsbildungen und nicht so sehr in der allgemeinsten Formulierung der Grundprinzipien.

Vorausgesetzt wird im wesentlichen die Kenntnis der Hamiltonschen Mechanik sowie die lineare Algebra. Der Hilbertraum wird in der für Physiker charakteristischen naiven Weise benutzt. Es soll versucht werden, eine heuristische Begründung für die Quantentheorie aus der klassischen Physik zu liefern.

Es ist mir dabei ein besonderes Anliegen, aufzuzeigen, daß die Verwendung von Wellenfunktionen in der heuristischen Begründung der Quantentheorie unumgänglich erscheint, aber keinesfalls die allgemeingültige Formulierung derselben darstellt. Der theoretische Kern zur Begründung Quantentheorie liegt wie bei der klassischen Physik in den fundamentalen Symmetrieprinzipien der Raumzeit.

Inhaltsverzeichnis

1	Heuristische Einführung: „Wellenmechanik“	2
1.1	Die historische Entwicklung der Quantenmechanik	2
1.2	Die Schrödingergleichung für freie Teilchen	6
2	Die endgültige Formulierung der Quantentheorie	10
2.1	Basisunabhängige Formulierung der Quantentheorie	10
2.2	Die Dynamik	19
2.3	Bildtransformationen	22
2.4	Das Heisenbergbild	23
3	Zusammenfassung	25
3.1	Vollständiger Satz verträglicher Observabler	25
3.2	Die Heisenbergsche Unschärferelation	26

1 Heuristische Einführung: „Wellenmechanik“

1.1 Die historische Entwicklung der Quantenmechanik

Die moderne Quantentheorie entwickelte sich aus der Notwendigkeit heraus, die theoretische Beschreibung empirischen Faktenmaterials zu ermöglichen. Viele Entdecker der Quantentheorie sahen sie nur als Notlösung, sie wurden sozusagen durch die Meßergebnisse gezwungen, von der gewohnten klassischen Physik zu abstrahieren und eine Beschreibung zu verwenden, die auf den ersten Blick sehr viel weiter von den direkten Sinneswahrnehmungen entfernt ist.

In diesem Abschnitt soll es darum gehen, die nichtrelativistische Quantentheorie aus einfachen Analogiebildungen zur klassischen Physik herzuleiten. Dieses Verfahren hat den Vorteil, daß es grob den historischen Entwicklungsgang nachzeichnet, weist jedoch den unbestreitbaren Nachteil auf, daß dabei Vorstellungen etabliert werden, die nicht unserem modernen physikalischen Weltbild entsprechen.

Wie wir sogleich ausführlich entwickeln werden, hatte sich aus der Planckschen Quantenhypothese durch Einsteins Arbeit über Lichtquanten von 1905 die These etabliert, daß das Licht durch die Wellenvorstellungen des 19. Jh. allein nicht adäquat beschrieben werden kann, und das obwohl kaum 40 Jahre früher durch Maxwell eine so befriedigende Vereinigung des Elektromagnetismus mit der Optik stattgefunden hatte, die durch die direkte Erzeugung und den Nachweis elektromagnetischer Wellen durch H. Hertz 10 Jahre früher so glänzend ihre experimentelle Bestätigung erfahren hatte. Hinzu kam noch, daß die Maxwelltheorie für die damaligen Physiker keine allzu leichte Kost war. Was wir heutzutage spätestens im 4. Semester für das Vordiplom büffeln müssen, war damals ein ausgesprochenes Expertenwissen für die sich gerade herausbildende Zunft der mathematischen oder theoretischen Physiker.

Eine weitere sich gerade mühsam durchsetzende Theorie war die vor allem durch Boltzmann entwickelte kinetische Gastheorie, die aus der Vorstellung von Atomen die makroskopischen Erscheinungen der Materie mit Hilfe statistischer Methoden zu beschreiben versuchte. Dabei waren zu der Zeit Atome noch nicht einmal allgemein als existent anerkannt! Planck selber war ein ausgesprochener Vertreter der klassischen, also phänomenologischen, Thermodynamik und nur widerwillig bediente er sich der Boltzmannschen Abzählmethode um das Spektrum der Hohlraumstrahlung zu erklären. Er kam dabei durch die Analyse von Experimenten, die seine Berliner Kollegen Rubens und Kurlbaum gerade durchgeführt hatten, zu dem Schluß, daß das Licht nicht in beliebigen Energien von den Wänden des Hohlraumes absorbiert und emittiert wird (wodurch sich letztlich ein thermodynamisches Gleichgewicht mit einer wohldefinierten Temperatur ergibt), sondern daß dies eben nur in gewissen Portionen, die er Quant nannte, geschehen kann, die proportional zur Frequenz der Lichtwelle waren. Ein Lichtquant hatte also den Energieinhalt $E = h\nu = \hbar\omega$, wobei $\hbar = h/(2\pi)$ war. Die Konstante h heißt zu Ehren Plancks das Plancksche Wirkungsquantum, Wirkungsquantum deshalb, weil sie die Dimension „Energie \times Zeit“ besitzt wie die Wirkung des aus der Mechanik bekannten Hamiltonschen Prinzips.

Es ist wichtig zu bemerken, daß Planck noch nicht dem Licht selber diese Quanteneigenschaften zuordnete, sondern nur dem Absorptions- und Emissionsverhalten der Materie. Nicht zuletzt deshalb war seine Rechnung ausgesprochen kompliziert. Er betrachtete das Strahlungsgleichgewicht zwischen einem harmonischen Oszillator und der elektromagnetischen Strahlung des Hohlraums um das Spektrum der Strahlung zu gewinnen. Es war dann Einstein in 1905, der diese Quanteneigenschaft explizit dem Licht selber zuwies. Er stellte sich das Licht als

Teilchen vor, die die Energie $E = \hbar\omega$ ¹ besitzen und (das war gegenüber der Planckschen Hypothese neu) einen Impuls der Größe $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, wobei \vec{k} der Wellenvektor ist. Dessen Richtung ist die Fortschreiterichtung der Welle und sein Betrag ist $|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$, wobei λ die Wellenlänge des Lichtes ist.

Dies ist aber nun eine für die damalige Zeit völlig verrückte Vorstellung, und selbst heute, fast 100 Jahre nach Entdeckung der Quantentheorie, tun wir uns noch schwer damit: Das Licht sollte aus Teilchen bestehen, dessen mechanische Parameter aber durch die Welleneigenschaften desselben Phänomens gegeben waren? So etwas klingt eher wie die Crackpottheorien, von denen unsere Newsgroups so zahlreich überschwemmt werden. Allerdings konnte Einstein auch gewichtige experimentelle Gründe für seine Idee vorbringen.

Lenard hatte nämlich den lichtelektrischen Effekt entdeckt, demzufolge aus Metallen durch die Einstrahlung von Licht Elektronen² herausgeschlagen werden. Allerdings verhielten sich diese Elektronen äußerst merkwürdig. Nach der klassischen Vorstellung der Wechselwirkung von Licht mit geladenen Teilchen³ sollten die Elektronen zum einen nämlich erst nach einer gewissen Einstrahlzeit aus dem Metall herauskommen und dann sollte deren Energie mit der Intensität des Lichtes anwachsen. Diese Erwartung war aber völlig im Widerspruch zu den Lenardschen Experimenten! Die Elektronen kamen ohne merkliche Zeitverzögerung aus dem Metall heraus, und die Energie war unabhängig von der Intensität des Lichtes, wohl aber abhängig von der Frequenz desselben.

Einstein schrieb eigentlich nur eine wesentliche Formel in seine bahnbrechende Lichtquantenarbeit, nämlich die, daß das Licht ein Teilchenstrom ist, dessen Teilchen eine Energie von $E = \hbar\omega$ hat. Es war eine gewisse „Austrittsarbeit“ notwendig, um die Elektronen aus dem Metallverband herauszulösen. Zusammen mit dem Energiesatz bedeutet das, daß

$$E_{\text{el}} = \hbar\omega - W_A \quad (1)$$

sein mußte. Die Energie der Elektronen wurde durch die heute noch bei Schulversuchen angewandte Methode der Gegenspannung ermittelt. Die Elektronen werden durch eine Spannung, die entgegen der Emissionsrichtung aus dem Metall angelegt wird, gebremst, und der fließende Strom gemessen. Die Spannung U , bei der gerade kein Strom mehr fließt, muß also der Energie der Elektronen entsprechen. Damit kann man über $E_{\text{el}} = eU$ die Energie der Elektronen messen, und aus der Steigung der Geraden im $E_{\text{el}}-\omega$ -Diagramm das Plancksche Wirkungsquantum bestimmen. Der Wert ergab sich in guter Übereinstimmung mit dem durch die Präzisionsmessungen der Hohlraumstrahlung durch Anfitzen der Planckschen Strahlungsformel ermittelten Resultat.

Wirklich anerkannt wurde die Lichtquantenhypothese allerdings erst durch die Erklärung des Comptoneffekts (1923). Dabei wird Licht an einem quasi freien Elektron gestreut. Das ist ein klassischer elastischer Stoßprozeß⁴, der sich mit Hilfe der Lichtquantenhypothese auch so behandeln lies. Man brauchte nur die Energie- und Impulsbilanz des Prozesses aufzustellen, wobei dann auch die Einsteinsche Beziehung $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, die den Impuls des Lichtes mit der

¹Wir benutzen im folgenden stets die moderne Notation mit $\hbar = h/(2\pi)$.

²Nach längerem Hin und Her durch die Untersuchungen J. J. Thomsons (1897) als geladene Teilchen anerkannt

³eine Theorie, die kurz zuvor vor allem durch Lorentz als Elektronentheorie entwickelt worden war, und den „Fremdkörper“ Elektron in die Wellentheorie des Elektromagnetismus einverleibt hatte

⁴vorausgesetzt es sind nach dem Stoß wieder ein Elektron und ein Photon vorhanden, d.h. es treten keine anderen Prozesse auf wie z.B. Paarerzeugung

Wellenbeschreibung desselben verknüpfte, zur Anwendung kam. Aus der Energie des einfallenden Photons und dem Impuls sowie dem Streuwinkel des auslaufenden Elektrons konnte die Energie des auslaufenden Photons und damit die beobachtete Frequenzverschiebung des Lichtes aufgrund der Streuung erklärt werden. Die Comptonstreuung ist also seit Einstein als elastische Elektron-Photonstreuung zu deuten.

Ein anderes Mysterium war das 1911 von Rutherford aufgrund seines berühmten „Goldfolienversuchs“ aufgestellte Atommodell. Rutherford hatte α -Teilchen, also zweifach geladene Heliumatome, die aus radioaktiven Zerfällen stammten, auf eine Goldfolie geschossen und bemerkt, daß diese quasi aus gar nichts besteht. Genauer gesagt, die meisten α -Teilchen flogen fast unbehelligt durch die Goldfolie hindurch. Einige wurden allerdings auch stark abgelenkt. Damit war klar, daß die Atome nicht massive positiv geladene Körper, in die die negativen Elektronen eingelagert waren (ein Modell, das als Thomsonsches Rosinenkuchenmodell damals aktuell war) sein konnten. Das Atom mußte vielmehr selber zusammengesetzt sein aus einem Kern, der nahezu die gesamte Masse des Atoms ausmachte und der entsprechend der Ordnungszahl des Atoms geladen war, und einer der Ladung des Kerns entsprechenden Zahl Elektronen. Rutherford hatte auch sofort den aus dieser Hypothese zu erwartenden Streuquerschnitt der α -Teilchen berechnet, und zwar indem er einfach die aus der Himmelsmechanik bekannten Keplerschen Gesetze benutzte. Die Gravitation wurde natürlich durch die elektrostatischen Kräfte, die der Kern auf das α -Teilchen ausübte, ersetzt, und da hier wegen der gleichnamigen Ladung von α -Teilchen und Kern eine abstoßende Kraft vorliegt, erhält man nur Hyperbeln (also sozusagen Kometenbahnen). Aber mit der gefundenen heute nach Rutherford benannten Streuformel konnte er exakt die gemessenen Wirkungsquerschnitte reproduzieren.

Allerdings ergab sich damit ein neues Bild vom Atom, das jetzt als mikroskopisches Planetensystem angesehen werden mußte (mit dem Kern als Sonne und den Elektronen als Planeten und der elektrostatischen Kraft des Kerns anstelle der Gravitation als Zentralkraft). Andererseits besagte die klassische Elektrodynamik, daß die Elektronen, die sich der Rutherfordtheorie zufolge auf Ellipsenbahnen um den Kern bewegen würden, eigentlich strahlen müßten, weil beschleunigte Ladungen zufolge der Maxwellschen Theorie strahlen und auch die Strahlung genau ausgerechnet werden konnte (das Lienard-Wiechertsches Potential wurde bereits Ende des 19. Jh. aus den Maxwellgleichungen gewonnen).

Das widersprach aber eklatant der Stabilität der chemischen Elemente, die zudem noch wohl definierte Spektren emittierten und keine kontinuierliche Synchrotronstrahlung⁵. Es konnten im Atom also nicht beliebige Bahnen vorliegen, sondern nur ganz bestimmte, die die Stabilität der Atome dadurch gewährleisteten, daß das genau die Bahnen sind, auf denen die Elektronen keine elektromagnetische Strahlung emittieren. Es war natürlich wieder ein Widerspruch zur klassischen Physik, daß es solche Bahnen überhaupt geben kann.

Zum Glück war Thomson an der Doktorarbeit eines jungen Dänen überhaupt nicht interessiert, so daß sich dieser sofort nach Manchester zu Rutherford begab und da in ein ihm völlig unbekanntes Gebiet eindrang. Bohr wurde also sofort mit dem Problem des Planetenmodells konfrontiert, und nach einigen Wochen intensiver Rechnerei konnte er aus der Planckschen Lichtquantenhypothese sein berühmtes Atommodell gewinnen. Hier war es wieder das Teilchenmodell der klassischen Mechanik, das die Lösung herbeiführte. Anders als in der Makrophysik sollten aber die stabilen Bahnen durch das Plancksche Strahlungsgesetz bestimmt sein. Ein Elektron sollte nur noch dann Energie abstrahlen, wenn es von einer energetisch höher

⁵Das ist der moderne Name für die Strahlung kreisender Ladungen.

gelegenen Bahn auf eine energetisch niedriger gelegene Bahn „springt“. Die Bahnen wurden demzufolge durch einen bestimmten diskreten Wert für die sog. Wirkungsvariable bestimmt, die ein ganzzahliges Vielfaches von \hbar sein mußte.

Hatte man die Annahme diskreter Quantenbahnen erst einmal hingenommen, konnte diese Theorie auf „natürliche“ Art und Weise das empirisch bereits seit 1885 bekannte Balmersche Seriengesetz der Spektrallinien des Wasserstoffs erklären. Ebenso fand das Ritzsche Kombinationsprinzip eine theoretische Herleitung, demzufolge die Spektrallinien als Differenzen einfacher Terme beschrieben werden konnten.

Bohrs Theorie wurde alsbald von Sommerfeld mathematisch ausgebaut und konnte auf vielerlei Probleme angewandt werden. Sogar die relativistische Behandlung war kein Problem mehr, und die brachte einen entscheidenden Gewinn in der Präzision, konnte sie doch die sog. Hyperfeinstruktur der Spektrallinien erklären. Auch die Aufspaltung der Spektrallinien im schwachen Magnetfeld (Zeemaneffekt) und elektrischen Feld (Starkeffekt) konnte zumindest qualitativ verstanden werden.

Allerdings gab es schon beim nächstkomplizierteren Atom, dem Heliumatom mit zwei Elektronen, Probleme, die die Grenzen der Bohrschen ad hoc-Hypothese aufzeigten. In der Zwischenzeit hatte de Broglie aber diese Bohrschen Hypothese mit der Einführung der Materiewellen auf die Bedingung stehender Wellen als stationärer Zustände zurückgeführt werden. De Broglie hatte in seiner Doktorarbeit in einem kühnen Analogieschluß zum Welle-Teilchen-Dualismus beim Licht auch den Teilchen (damals also vornehmlich den Elektronen) Welleneigenschaften zugewiesen. Diese These wurde mit größter Vorsicht aufgenommen, und erst die positive Begutachtung der Arbeit durch Einstein, den man sozusagen als externen Gutachter hinzugezogen hatte, lies diese als Doktorarbeit überhaupt durchgehen.

Die Wellenvorstellung der Teilchen diente nun Schrödinger als Ausgangspunkt, durch eine systematische Analyse des Übergangs von der Wellen- zur Strahlenoptik, die schon Hamilton im 19. Jh. geleistet hatte, die aber zu der Zeit in Vergessenheit geraten war, seine berühmte Wellengleichung aufzustellen, die wir sogleich im nächsten Abschnitt durch einen wesentlich vereinfachten Analogieschluß gewinnen werden. Interessant ist es übrigens zu bemerken, daß Schrödinger zunächst wie de Broglie eine relativistische Gleichung herleiten wollte, aber alsbald große physikalische Probleme bemerkte, die erst einige Jahre später durch die Entwicklung der relativistischen Quantenfeldtheorie gelöst werden sollten.

Schon ein wenig früher hatte Heisenberg in seiner berühmten Arbeit von der „Quantenmechanischen Umdeutung mechanischer Größen“ eine Quantentheorie hergeleitet, die die physikalischen Größen durch abstrakte Zahlenschemata (unendlichdimensionale Matrizen) ersetzte, die von der Bohrschen Bahnvorstellung vollständig abstrahierte. Schrödinger konnte dann relativ schnell zeigen, daß seine „Wellenmechanik“ mathematisch und physikalisch äquivalent zu der Matrizenmechanik war.

Nun ergab sich aber ein für die Physik neuartiges Problem. War die klassische Mechanik mehr oder weniger gradlinig von den Erscheinungen ausgehend zu ihren theoretischen Grundbegriffen gelangt, d.h. die Zuordnung der mathematischen Begriffe zu in der Natur oder im Experiment gegebenen Beobachtungstatsachen war unmittelbar gegeben, hatte man nun einen mathematischen Formalismus gefunden, der sich hervorragend eignete um die atomaren Spektren zu beschreiben, der aber keinesfalls in allen Teilen physikalisch verstanden war. So ergab sich z.B. durch die Einführung der Schrödingerschen Wellenfunktion die Frage, was diese physikalisch zu bedeuten hatte oder umgekehrt, wie beim Licht die Teilchenvorstellungen, die sich mit den Photonen verbanden, zu deuten waren. Schrödingers Materiewellen zeigten nämlich die für Wellen typische Eigenschaft der Dispersion, d.h. wenn man ein Wellenpaket

„mikroskopischer“ Ausmaße vorgab, lief es mit der Zeit unter Einfluß der freien Schrödingergleichung auseinander, und die stehenden Wellen, die Elektronen im Atom beschrieben, zeigten überhaupt keine irgendwie geartete „Lokalisierung“. Wollte man aber die Elektronen in allen Situationen als Teilchen verstehen, konnte das schwer möglich sein, wenn man die Wellen als klassische Wellen auffaßte, die in der makroskopischen Welt, also bei hinreichend grober Messung als Teilchen erscheinen. Beim Licht war es eher umgekehrt. Es fragte sich, wie die Teilcheneigenschaften, die beim Comptoneffekt zu einer so einfachen, quantitativ korrekten Erklärung geführt hatten, mit den typischen Interferenzversuchen vereinbar sein sollten.

Bei der Anwendung der neuen Quantentheorie auf Streuprobleme (1926) fand nun Born, der zusammen mit Jordan in Göttingen maßgeblich an einer systematischen Ausformulierung der noch recht verworrenen Gedanken Heisenbergs zur Matrizenmechanik beteiligt war, eine einfache Erklärung: Die Schrödingerschen Materiefelder waren keine Felder im klassischen Sinne, also sich als kontinuierliche Entität im Raum fortplanzende Ströme von Energie und Impuls. Vielmehr war durch $w(t, \vec{x}) = \psi^*(t, \vec{x})\psi(t, \vec{x})$ die Wahrscheinlichkeit pro Volumenelement (also die Wahrscheinlichkeitsdichte), zur Zeit t ein Teilchen, dem die Wellenfunktion ψ zugeordnet war, am Ort \vec{x} zu finden. Diese Idee stellte er in einer erläuternden Fußnote seiner Streutheoriearbeit dar und erhielt dafür später den Nobelpreis.

Das bedeutete aber, daß man über die Teilchen generell nur Wahrscheinlichkeitsaussagen machen konnte, was ihre klassischen Meßgrößen wie Ort, Impuls usw. betraf. Dies führte zu der wohl berühmtesten Debatte in der ganzen Wissenschaftsgeschichte, nämlich der zwischen Bohr und Einstein über die begriffliche Klärung der Quantenphysik, die bekanntlich nie zu einer Einigung kam. Auf diese grundlegenden Probleme der Interpretation, insbesondere auf die mit ihr auf's engste verknüpften Heisenbergschen Unschärferelationen (1927) gehen wir weiter unten näher ein, wenn wir den mathematischen Apparat der Quantentheorie etwas weiter entwickelt haben. Genau darum soll es im nächsten Abschnitt gehen.

1.2 Die Schrödingergleichung für freie Teilchen

Wir beginnen mit dem einfachsten Fall des freien Teilchens um uns der Idee der Schrödingerschen Materiewellen zu nähern. Ausgangspunkt ist die Einsteinbeziehung für Lichtquanten $E = \hbar\omega$ und $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, die de Broglie auf materielle Teilchen angewandt hatte.

Ein freies Teilchen zeichnet sich dadurch aus, daß keinerlei äußere Einflüsse auf es stattfinden. Das einzige, was wir über das Teilchen wissen müssen, um eine Wellengleichung aufzustellen, die es beschreiben soll, ist die sog. *Dispersionsrelation*, d.h. den Zusammenhang zwischen Kreisfrequenz ω und Wellenvektor \vec{k} . Diese Beziehung können wir aber vermöge der klassischen Mechanik durch den Zusammenhang zwischen Energie und Impuls unter Zuhilfenahme der Einstein–de Broglie–Beziehung gewinnen. Für ein freies nichtrelativistisches Punktteilchen ist die Energie identisch mit der kinetischen Energie, und die ist durch die Beziehung

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (2)$$

gegeben, wobei \vec{p} der Impuls des Teilchens und m seine Masse ist. Hier ist die Masse der einzige das Teilchen näher charakterisierende Parameter, ansonsten ist es als völlig unstrukturiert punktförmig abstrahiert. Setzen wir die Einstein–de Broglie–Beziehung ein, finden wir die gesuchte Dispersionsrelation:

$$\hbar\omega = \frac{(\hbar\vec{k})^2}{2m} \Rightarrow \omega(\vec{k}) = \frac{\hbar\vec{k}^2}{2m}. \quad (3)$$

Die einfachste Form einer Welle ist nun die aus der allgemeinen Wellenlehre bekannte ebene Welle, die durch eine Sinuswelle beschrieben wird. Aus rechentechnischen Gründen verwenden wir hier die Form der Exponentialfunktion und komplexe Zahlen. Wir werden sogleich sehen, daß die Schrödingersche Wellenfunktion ohnehin am bequemsten mit komplexwertigen Funktionen beschrieben wird. Wir setzen also an

$$\psi(t, \vec{x}) = A \exp(-i\omega t + i\vec{k}\vec{x}). \quad (4)$$

Die Dispersionsbeziehung (3) muß nun durch eine Wellengleichung gegeben sein, also eine partielle Differentialgleichung, der ψ identisch genügen muß. Dazu leiten wir den Ansatz (4) einmal nach t und zweimal nach \vec{x} ab:

$$\partial_t \psi(t, \vec{x}) = -i\omega \psi(t, \vec{x}), \quad \Delta_{\vec{x}} \psi(t, \vec{x}) = -\vec{k}^2 \psi(t, \vec{x}) \quad \text{mit} \quad \Delta = \nabla \cdot \nabla = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2. \quad (5)$$

Vergleichen wir dies mit (3) sehen wir, daß die Wellenfunktion der Gleichung

$$i\partial_t \psi = -\frac{\hbar \Delta}{2m} \psi \quad (6)$$

zu genügen hat, damit die Dispersionsbeziehung identisch erfüllt wird. Dies ist schon die gesuchte *Schrödingergleichung des freien Teilchens*.

Erinnern wir uns jetzt der Bornschen Interpretation der Wellenfunktion als Wahrscheinlichkeitsamplitude. Demnach sollte also

$$W(t, \vec{x}) = |\psi(t, \vec{x})|^2 \quad (7)$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte der Teilchen sein, also die Wahrscheinlichkeit pro Volumenelement, zur Zeit t ein Teilchen der Masse m am Ort \vec{x} zu finden. Setzen wir da unsere ebene Welle ein, finden wir für W eine Konstante. Damit aber unsere Welle eine Interpretation in dem Bornschen Wahrscheinlichkeitssinne überhaupt besitzen kann, muß die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen überhaupt irgendwo im Raum zu finden, auf 1 normierbar sein. Das ist aber offenbar nicht der Fall, denn eine Konstante läßt sich gewiß nicht mit endlichem Resultat über den ganzen Raum integrieren.

Die ebene Welle entspricht auch ganz und gar nicht unserer Vorstellung von einem Teilchen, ist es doch zu dem einen Zeitpunkt t überall gleich wahrscheinlich, es zu finden, denn es ist für die ebene Welle ja $W = |A|^2 = \text{const.}$ Unserer Teilchenvorstellung käme also ein Wellenpaket viel näher, d.h. eine Lösung der Schrödingergleichung, die auf einem relativ schmalen Gebiet eine große Amplitude besitzt, entsprechend einer hohen Aufenthaltswahrscheinlichkeit in einer mehr oder weniger großen Umgebung⁶ eines Punktes. Weiter weg von diesem Punkt soll das Wellenpaket eine vernachlässigbare Amplitude besitzen.

Nun hat die Schrödingergleichung (7) die sehr angenehme Eigenschaft, daß sie *linear* ist, d.h. für sie gilt das Superpositionsprinzip. Das bedeutet, daß zu zwei Lösungen ψ_1 und ψ_2 der Schrödingergleichung auch jede Linearkombination der Gestalt $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ eine Lösung derselben ergibt, wobei c_1 und c_2 beliebige komplexe Konstanten sind. Das kann man mit beliebig vielen Lösungen so machen und sogar mit kontinuierlich vielen. Auf diese Weise

⁶Wir werden weiter unten bemerken, daß die Größe dieser Umgebung durch das prinzipiell stets endliche Auflösung eines Teilchendetektors, also eines Meßgeräts für die Anwesenheit des Teilchens, bestimmt ist. Im Unterschied zur klassischen Physik weist dies darauf hin, daß in der Quantenphysik stets der Meßprozeß mitberücksichtigt wird, auch wenn von konkreten Meßgeräten gar nicht die Rede ist.

werden wir sehr natürlich auf die *Fourierdarstellung* der Wellenfunktion geführt, d.h. wir machen den Ansatz:

$$\psi(t, x) = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} A(\vec{k}) \exp[-i\omega(\vec{k})t + i\vec{k}\vec{x}]. \quad (8)$$

Dabei ist der Faktor $1/(2\pi)^{(3/2)}$ nur aus Bequemlichkeitsgründen eingeführt. Damit dieser Ansatz die Schrödingergleichung erfüllt, gehen wir davon aus, daß das Integral absolut konvergiert und wir Integration und Differentiation vertauschen können. Unter diesen Bedingungen die Schrödingergleichung auf (8) angewandt ergibt sofort wieder die schon oben benutzte Dispersionsrelation:

$$\omega(\vec{k}) = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}. \quad (9)$$

Diese Dispersionsrelation in (8) eingesetzt gewährleistet allein schon die Erfüllung der Schrödingergleichung, und zwar für beliebige *Spektralfunktionen* A ! Das bedeutet wir können für A irgendeine Funktion einsetzen, die absolut über $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$ integrierbar ist.

Um unsere Forderung nach einem Wellenpaket zu erfüllen, setzen wir die einfachst mögliche Form ein, nämlich eine *Gaußverteilung*. Wegen der allgemein großen Bedeutung von Gaußverteilungen in der Physik wollen wir hier die Fouriertransformation (8) ausführlich vorrechnen.

Es sei also die Spektralverteilung gegeben zu

$$A(\vec{k}) = N \exp \left[-\frac{(\vec{k} - \vec{k}_0)^2}{4\alpha} \right]. \quad (10)$$

Wir finden folglich für die Schrödingersche Wellenfunktion gemäß (8 und (9):

$$\psi(t, \vec{x}) = N \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(\vec{k} - \vec{k}_0)^2}{4\alpha} - i\frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}t + i\vec{k}\vec{x} \right]. \quad (11)$$

Wir bemerken als erstes, daß sich in diesem Fall die Wellenfunktion in Form eines Produktes aus Wellenfunktionen für jede der drei Raumrichtungen schreiben läßt, d.h. es ist $\psi(t, \vec{x}) = \psi_1(t, x_1)\psi_2(t, x_2)\psi_3(t, x_3)$ mit

$$\psi_1(t, x_1) = N' \int \frac{dk_1}{(2\pi)^{1/2}} \exp \left[-\frac{(k_1 - k_{01})^2}{4\alpha} - i\frac{\hbar k_1^2}{2m}t + ik_1 x_1 \right]. \quad (12)$$

Zur Ausführung dieses Integrals berechnen wir zunächst

$$I = \int \frac{dk_1}{(2\pi)^{1/2}} \exp(-Ak_1^2 + 2ABk_1 + C) \quad (13)$$

Zunächst führen wir im Argument der Exponentialfunktion eine quadratische Ergänzung und eine Substitution $k'_1 = k_1 - B$ aus. Dann folgt

$$I = \exp(C + AB^2) \int \frac{dk'_1}{(2\pi)^{1/2}} \exp(-Ak_1'^2). \quad (14)$$

Verbleibt das letzte Integral zu berechnen. Dazu bemerken wir, daß dieses Integral für A mit positivem Realteil existiert. Für reelle A ist das Integral positiv, und wir können schreiben

$$\begin{aligned} I &= \exp(C + AB^2) \sqrt{\int dk_1 \int dk_2 \exp[-A(k_1^2 + k_2^2)]} \\ &= \exp(C + AB^2) \sqrt{\int_0^\infty K dK \int_0^{2\pi} \exp(-AK^2)} = \sqrt{\frac{\pi}{A}} \exp(C + AB^2). \end{aligned} \quad (15)$$

Damit haben wir das Integral vollständig berechnet. Es sind nur noch die Werte für die Parameter A , B und C einzusetzen. Die Ausdrücke werden etwas länger, so daß wir hier nur das Ergebnis für die Wahrscheinlichkeitsverteilung angeben wollen:

$$w_1(t, x_1) = \frac{|N'|^2 \sqrt{4\alpha m}}{\sqrt{m^2 + 4\alpha^2 \hbar^2 t^2}} \exp \left\{ -\frac{2\alpha m^2}{m^2 + 4\alpha^2 \hbar^2 t^2} \left[\left(x_1 - \frac{k_{01} \hbar}{m} t \right)^2 \right] \right\}. \quad (16)$$

Die Normierungskonstante N' ist so zu bestimmen, daß

$$\int dx_1 w_1(t, x_1) = 1 \quad (17)$$

wird, entsprechend der Forderung, daß das Teilchen mit Wahrscheinlichkeit 1 an einem Ort mit der 1-Komponente $x_1 \in \mathbb{R}$ gefunden wird. Unter Verwendung des Integrals (15) ergibt sich

$$|N'| = \sqrt[4]{\frac{m}{2\pi}} \quad (18)$$

Wir bemerken, daß die Normierungskonstante *zeitunabhängig* ist. Weiter ist klar, daß bisher keinerlei Hinweise aus irgendeiner Forderung aufgetreten sind, wie der Phasenfaktor (also eine komplexe Zahl vom Betrag 1) von N bzw. N' bestimmt werden soll.

Bevor wir in der allgemeinen Entwicklung der Quantentheorie fortfahren, die diese Beobachtungen klären wird, wollen wir kurz die Implikationen betrachten, die unser spezielles Resultat ergeben hat. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $w(t, \vec{x})$, die sich durch Multiplikation von drei Faktoren der Form w_1 ausdrückt, ist wieder ein Gaußsches Wellenpaket. Das verwundert weiter nicht, denn Gaußsche Glockenkurven sind invariant unter Fouriertransformationen. Physikalisch interessant sind aber die Parameter dieses Gaußschen Pakets.

Wir erinnern kurz an die Bedeutung dieser Parameter. Die allgemeine Form einer Gaußverteilung ist

$$w_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma} \right]. \quad (19)$$

Der Erwartungswert für x ist

$$\langle x \rangle = \int dx x w_G(x) = x_0. \quad (20)$$

Das rechnet man übrigens am geschicktesten durch Ableiten des Normierungsintegrals nach x_0 aus. Das ergibt natürlich wegen des von x_0 unabhängigen Wertes 0. Die Ableitung ist aber $\langle x - x_0 \rangle / \sigma = 0$. Genauso findet man die Varianz, also die mittlere quadratische Abweichung vom Erwartungswert. Der Trick mit der Ableitung ergibt

$$\left\langle \frac{\sigma - (x - x_0)^2}{\sigma^2} \right\rangle = 0 \rightarrow \Delta x^2 = \langle (x - x_0)^2 \rangle = \sigma. \quad (21)$$

Wenden wir das auf (16) an, ergibt sich

$$\langle \vec{x} \rangle = \frac{\hbar \vec{k}}{m} t, \quad (22)$$

d.h. der Erwartungswert des Ortes des Teilchens ergibt die freie Bewegung eines Newtonschen Massepunktes mit dem Impuls $\hbar \vec{k}$. Die Ortsunschärfe wächst allerdings mit der Zeit, gemäß

$$\Delta x^2 = \frac{m^2 + 4\alpha^2 \hbar^2 t^2}{4\alpha m^2}. \quad (23)$$

Zur Zeit $t = 0$ beträgt die Ortsunschärfe

$$\Delta x^2|_{t=0} = \frac{1}{4\alpha}. \quad (24)$$

Für unsere Anfangsverteilung für den Impuls war sie hingegen:

$$\Delta p^2 = \hbar^2 \Delta k^2 = \alpha. \quad (25)$$

Es gilt also

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}. \quad (26)$$

Wir werden im nächsten Abschnitt zeigen, daß dies die unterste überhaupt mögliche Grenze für den Ausdruck $\Delta x \Delta p$ ist (*Heisenbergsche Unschärferelation*), und daß dies genau für die Gaußverteilung, die wir als Anfangsbedingung für die Schrödingergleichung angegeben hatten, zutrifft. In gewissem Sinne ist unser Gaußsches Wellenpaket das Beispiel, das größtmögliche Annäherung an ein klassisches Teilchen bietet, die im Rahmen der Quantentheorie möglich ist.

2 Die endgültige Formulierung der Quantentheorie

2.1 Basisunabhängige Formulierung der Quantentheorie

Wir wollen in diesem Abschnitt unsere eben gewonnenen Erfahrungen mit der einfachen Wellenlösung der Schrödingergleichung nutzen, um die Physik der Schrödingergleichung zu präzisieren und auf Teilchen in äußeren Potentialfeldern zu erweitern.

Zunächst bemerken wir, daß die oben mehr heuristisch gefundene Methode zur Gewinnung von Lösungen der freien Schrödingergleichung eine sehr einfache mathematische Erklärung besitzt. Betrachten wir doch einmal für einen Moment die Lösung dieser Gleichung als rein mathematische Aufgabe, d.h. wir fragen uns, welche Eigenschaften die Lösungen dieser Gleichung bestimmen. Die Schrödingergleichung besitzt die Gestalt:

$$i\hbar \partial_t \psi(t, \vec{x}) = -\frac{\hbar^2 \Delta_x}{2m} \psi(t, \vec{x}). \quad (27)$$

Aufgrund der Linearität dieser Gleichung bietet sich ein Ansatz in Form einer Fouriertransformierten an:

$$\psi(t, \vec{x}) = \int \frac{d\omega d^3 \vec{k}}{(2\pi)^2} \tilde{\psi}(\omega, \vec{k}) \exp(-i\omega t + i\vec{k}\vec{x}). \quad (28)$$

Diesen Ansatz in die Gleichung eingesetzt ergibt eine rein algebraische Gleichung

$$(\omega - \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}) \tilde{\psi}(\omega, \vec{k}) = 0. \quad (29)$$

Damit muß aber $\tilde{\psi}$ zu einer Diracschen δ -Distribution proportional sein, die das Verschwinden der Klammer auf der rechten Seite sicherstellt:

$$\tilde{\psi}(\omega, \vec{k}) = \sqrt{2\pi} A(\vec{k}) \delta(\omega - \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}), \quad (30)$$

wobei A eine beliebige Funktion des Wellenvektor \vec{k} sein darf⁷. Wir werden durch Resubstitution dieser allgemeinen Lösung in (28) wieder auf unser schon heuristische gefundenes Resultat (8) geführt:

$$\psi(t, \vec{x}) = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} A(\vec{k}) \exp\left(-i \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m} t + i \vec{k} \vec{x}\right) \quad (31)$$

geführt. Wir erkennen, daß die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung eine willkürliche Funktion $A(\vec{k})$ enthält. Diese Funktion hatten wir oben als Gaußpaket gewählt um ein Beispiel vor Augen zu haben. Hier wollen wir nun die physikalische Bedeutung dieser Funktion näher untersuchen.

Die Schrödingergleichung beschreibt offenbar, ganz unabhängig von der Interpretation der Wellenfunktion selber, einen dynamischen Prozeß in Raum und Zeit. Die Lösungen haben nämlich gemäß (31) Wellencharakter, beschreiben also einen Bewegungsvorgang. Hier haben wir es mit freien Wellen zu tun, also solchen, die keine Quelle besitzen. Wie wir aus der Elektrodynamik oder der Vorstellung von Wasserwellen her wissen, besitzen solche Gleichungen stets die Freiheit der Wahl der Anfangsbedingungen. Die spezifische Situation der Wellenerscheinung wird durch diese Anfangsbedingungen determiniert, und diese Anfangsbedingungen sind durch die Erregung der Wellen zu einem früheren Zeitpunkt bestimmt. Damit beschreibt die Schrödingergleichung einen *kausalen* Vorgang: Aus der „Wellenerregung“ am Anfang der Ausbreitung derselben läßt sich der gesamte Vorgang nach Beendigung der Erregung vollständig aus der Bewegungsgleichung (hier also der Schrödingergleichung) berechnen.

Kehren wir wieder zur mathematischen Analyse der Schrödingergleichung zurück. Die Freiheit der Wahl der Anfangsbedingung ist bei unserem Zugang zur Beschreibung der Lösung durch eine Fouriertransformation (31) in der Willkür der Wahl der Wellenzahlverteilungsfunktion $A(\vec{k})$ versteckt. Diesem Mangel können wir aber sofort abhelfen, denn für $t = 0$ ⁸ gilt gemäß (31):

$$\begin{aligned} \psi(0, \vec{x}) &= \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} A(\vec{k}) \exp(i \vec{k} \vec{x}) \Leftrightarrow \\ A(\vec{k}) &= \int \frac{d^3 \vec{y}}{(2\pi)^{3/2}} \psi(0, \vec{y}) \exp(-i \vec{k} \vec{y}). \end{aligned} \quad (32)$$

⁷der Faktor $\sqrt{2\pi}$ dient wieder nur dazu unsere Konvention einzuhalten, auf deren Wahl wir sogleich noch zurückkommen werden.

⁸Wir wählen $t = 0$ willkürlich als besonders bequemen „Anfangszeitpunkt“.

Nun können wir aber auch ohne Umweg über den Wellenzahlbereich der Fouriertransformation die Zeitentwicklung angeben, indem wir dieses Resultat in (31) einsetzen:

$$\psi(t, \vec{x}) = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d^3 \vec{y}}{(2\pi)^{3/2}} \psi(0, \vec{y}) \exp \left[-i \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m} t + i \vec{k}(\vec{x} - \vec{y}) \right]. \quad (33)$$

Könnten wir nun die Integration nach \vec{k} mit der nach \vec{y} vertauschen, könnten wir schreiben

$$\psi(t, \vec{x}) = \int d^3 \vec{y} U(t, \vec{x}, \vec{y}) \psi(0, \vec{y}). \quad (34)$$

Das bedeutet, daß $\psi(t, \vec{x})$ sich durch eine lineare Abbildung aus der willkürlich vorzugebenden Anfangsbedingung $\psi(0, \vec{y})$ berechnen läßt. Nun zeigt aber der Grenzfall $t \rightarrow 0$ schon, daß U keine gewöhnliche Funktion sein kann. Denn dann muß sich ja auf der rechten Seite $\psi(0, \vec{x})$ ergeben, und zwar für alle Funktionen $\psi(0, \vec{x})$, die nach \vec{x} quadratintegrierbar sind (und die folglich auf 1 gemäß der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation normiert werden können), denn mehr brauchen wir physikalisch von dem Anfangszustand $\psi(0, \vec{x})$ nicht zu fordern. Das bedeutet aber, daß in diesem Grenzfall gilt

$$\text{w-lim}_{t \rightarrow +0} U(t, \vec{x}, \vec{y}) = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}), \quad (35)$$

wobei δ die Diracsche δ -Distribution ist. Wir haben der Genauigkeit halber auf der linken Seite den schwachen Limes (weak limit) geschrieben um zu kennzeichnen, daß die Limesbildung im Sinne der Distributionentheorie zu verstehen ist, d.h. erst nach Integration von $U(t, \vec{x}, \vec{y}) \phi(\vec{y})$ mit ϕ aus einem geeigneten Testfunktionenraum über \vec{y} kann ein gewöhnlicher Limes gebildet werden.

Es ist damit zu erwarten, daß auch für $t > 0$ der *Propagator* $U(t, \vec{x}, \vec{y})$ eine Distribution sein wird. Wir können nun aber durch Regularisierung dieser Distribution ihre konkrete Gestalt ausrechnen. Dazu nutzen wir die Tatsache, daß die hier auftretenden Distributionen als Grenzwerte komplexer Funktionen dargestellt werden können. Betrachten wir nämlich den durch naives Vertauschen der beiden Integrationen in (34) Ausdruck, erkennen wir, daß wir durch die Ersetzung $t \rightarrow t - i\epsilon$ mit $\epsilon > 0$, wieder auf ein wohldefiniertes Gaußintegral zurückgeführt werden:

$$U(t, \vec{x}, \vec{y}) = \text{w-lim}_{\epsilon \rightarrow +0} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \exp \left[-\frac{\hbar \vec{k}^2}{2m} (\epsilon + it) + i \vec{k}(\vec{x} - \vec{y}) \right]. \quad (36)$$

Wir wenden wieder unsere Formel (15) an, und finden sofort

$$U(t, \vec{x}, \vec{y}) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{3/2} \exp \left[\frac{im(\vec{x} - \vec{y})^2}{2\hbar t} \right], \quad (37)$$

wobei die Problematik, auf welchem Riemannblatt die Wurzel für $\epsilon \rightarrow 0$ zu nehmen ist, hier irrelevant ist, weil sich die verschiedenen Möglichkeiten nur um einen von t , \vec{x} und \vec{y} unabhängigen Faktor vom Betrag 1 unterscheiden, und ein solcher „Phasenfaktor“ ist, wie wir im vorigen Abschnitt schon gesehen haben, unerheblich für den physikalischen Gehalt der Wellenfunktion.

Jetzt können wir aber die allgemeine mathematische Struktur, die hinter der Schrödingergleichung steckt, klar erkennen: Da die Gleichung linear ist, bilden alle Lösungen zusammen

einen komplexen linearen Raum (Vektorraum mit \mathbb{C} als Skalarkörper). Damit die Bornsche Interpretation der Wellenfunktion als Wahrscheinlichkeitsamplitude sinnvoll ist, muß eine physikalisch sinnvolle Wellenfunktion weiter quadratintegrierbar sein, d.h. eine physikalische Wellenfunktion $\psi(t, \vec{x})$ muß nicht nur der Schrödingergleichung genügen, sondern es muß auch das Normierungsintegral $\int d^3\vec{x} \psi^*(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x})$ existieren. Diese Funktionen⁹ bilden einen Funktionenraum, den man als *Hilbertschen Raum* L^2 bezeichnet. Die Norm einer in diesem Raum gelegenen Funktion ist gerade durch das Normierungsintegral gegeben.

Allerdings besitzt dieser Raum noch eine viel weitergehende Struktur. Seien dazu ψ und ϕ beides L^2 -Funktionen. Dann existiert das Integral

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int d^3\vec{x} \psi^*(\vec{x}) \phi(\vec{x}) \quad (38)$$

und die Klammer $\langle \psi | \phi \rangle$ besitzt alle Eigenschaften einer positiv definiten Sesquilinearform, die den Funktionenraum zu einem *Hilbertraum* macht, also einem Vektorraum mit Skalarprodukt.

Wir erwähnen hier nur ohne Beweis, daß dieser Raum auch vollständig ist, d.h. jede Funktionenfolge, die bzgl. der durch das Skalarprodukt induzierten Norm eine *Cauchyfolge* ist, besitzt einen in L^2 gelegenen Grenzwert.

An diesem Resultat erkennen wir, daß die Aufgabe, die Dynamik eines (bis jetzt allerdings freien) Teilchens zu beschreiben, durch einen linearen Operator, der auf dem Raum der quadratintegrierbaren Ortsfunktionen wirkt, gegeben ist, den wir in Form des Integrals (34) geschrieben haben.

Das Resultat, das wir für die Zeitentwicklung gewonnen haben, ist vollständig mit dieser mathematischen Struktur verträglich. Betrachten wir dazu jetzt die Eigenschaften der durch (34) im L^2 gegebenen Zeitentwicklung etwas näher. Es ist sofort klar, daß die durch das Integral vermittelte Abbildung linear ist, d.h. ist ψ_0 die Anfangsverteilung, dann gilt $\psi = \mathbf{U}(t)\psi_0$ zu jedem Zeitpunkt. Als nächstes bemerken wir, daß die Normierung der Wellenfunktion zeitlich konstant ist. Das haben wir schon im vorigen Kapitel bei der Berechnung des Normierungsintegrals der zeitabhängigen Verteilung gesehen. Diese Rechnung war aber eigentlich überflüssig, hätten wir doch nur die Anfangsverteilung normieren müssen, und dann ist auch die zeitentwickelte Wellenfunktion zu jedem Zeitpunkt normiert.

Der Beweis dazu führt aber am einfachsten über die Schrödingergleichung. Wir leiten dazu das Normierungsintegral

$$N = \int d^3\vec{x} \psi^*(t, \vec{x}) \psi(t, \vec{x}) \quad (39)$$

nach der Zeit ab:

$$\frac{dN}{dt} = \int d^3\vec{x} [(\partial_t \psi^*) \psi + \psi^* (\partial_t \psi)]. \quad (40)$$

Die Zeitableitung der Wellenfunktion ist aber gemäß der Schrödingergleichung durch

$$\partial_t \psi = \frac{i\hbar\Delta}{2m} \psi \text{ und } \partial_t \psi^* = -\frac{i\hbar\Delta}{2m} \psi^* \quad (41)$$

gegeben, und dies in die vorige Gleichung eingesetzt, liefert, daß das Normierungsintegral (39) als Folge der Bewegungsgleichung für die Wellenfunktion tatsächlich zeitlich konstant ist. Mit anderen Worten, die Zeitentwicklung (so wollen wir kurz den durch (34) gegebenen linearen

⁹Wir gehen nicht auf die Subtilität ein, daß wir eigentlich Klassen von Funktionen, die sich voneinander nur auf Lebesgueschen Nullmengen unterscheiden, betrachten müßten

Operator im Raum der quadratintegrierbaren Funktionen nennen) ist isometrisch in L^2 . Mit Hilfe unserer abstrakten Klammerschreibweise ausgedrückt bedeutet dies:

$$\|U(t)\psi_0\|^2 = \langle U(t)\psi_0 | U(t)\psi_0 \rangle = \|\psi_0\|^2 = \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle, \quad (42)$$

und zwar für jede Anfangswellenfunktion $\psi_0 \in L^2$. Daraus können wir aber sofort noch viel weitergehende Folgerungen ziehen. Nutzen wir dazu die Linearität des Zeitentwicklungsoperators aus. Seien ψ_1 und ψ_2 zwei L^2 -Funktionen. Dann gilt

$$\langle \psi_1 + \psi_2 | \psi_1 + \psi_2 \rangle = \langle U(\psi_1 + \psi_2) | U(\psi_1 + \psi_2) \rangle \Rightarrow \operatorname{Re} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \operatorname{Re} \langle U\psi_1 | U\psi_2 \rangle. \quad (43)$$

Dabei haben wir die Sesquilinearität des Skalarprodukts ausgenutzt. Führen wir die gleiche Rechnung mit der Linearkombination $\psi_1 + i\psi_2$ aus, folgt auch

$$\operatorname{Im} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \operatorname{Im} \langle U\psi_1 | U\psi_2 \rangle, \quad (44)$$

und damit schließlich

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle U\psi_1 | U\psi_2 \rangle. \quad (45)$$

Da das für zwei beliebige Wellenfunktionen ψ_1 und ψ_2 aus L^2 gilt, bedeutet dies die *Unitarität* des Zeitentwicklungsoperators in L^2 .

Kehren wir nun zur Physik zurück. Wir haben im vorigen Kapitel bei der Berechnung des Ortserwartungswertes gesehen, daß die Einsteinbeziehung zwischen Wellenzahl und Impuls durch die Schrödingergleichung beschrieben wird. Es ist aber nun auch klar, daß wir unsere ganze Betrachtung auch mit den Wellenvektoren, also den Impulsen $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ statt dem Ort des Teilchens hätten führen können. Zwischen der *Orts-* und der *Impulsdarstellung* der Quantentheorie haben wir wieder nur eine lineare Transformation auszuführen, nämlich die *Fouriertransformation*:

$$\psi(\vec{x}) = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi'(\vec{p}) \exp\left(i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}\right) \Leftrightarrow \psi'(\vec{p}) = \int \frac{d^3\vec{x}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi(\vec{x}) \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{x}}{\hbar}\right). \quad (46)$$

Aus der von der Theorie der Fouriertransformation her bekannten Beziehung

$$\int d^3x \exp(i\vec{k}\vec{x}) = (2\pi)^3 \delta(\vec{x}) \quad (47)$$

rechnet man sofort nach, daß auch diese Transformation von der Impuls- in die Ortsdarstellung und umgekehrt eine unitäre Transformation ist.

Das bedeutet, daß die Orts- und die Impulsdarstellung im Hilbertschen Funktionenraum L^2 nicht mehr und nicht weniger als eine Basistransformation ist.

Andererseits haben wir aber das Problem, daß wir bisher nur die Erwartungswerte des Ortes (oder Funktionen des Ortes) ausrechnen können, wenn wir in der Ortsdarstellung arbeiten. Es sieht nun so aus, als müßten wir jedesmal erst von der Ortsdarstellung in die Impulsdarstellung transformieren um einen Erwartungswert einer Funktion des Impulses zu bestimmen. Wir brauchen aber die Rechnung nur einmal auszuführen, weil wir ja die allgemeine Beziehung zwischen Orts- und Impulsdarstellung kennen. Es gilt ja

$$\langle f(\vec{p}) \rangle = \int d^3\vec{p} \psi'^*(\vec{p}) f(\vec{p}) \psi'(\vec{p}). \quad (48)$$

Jetzt setzen wir in diese Gleichung die Fouriertransformation ein mit dem Ziel, beide Impulstransformationen auszuführen. Die Funktion f stellen wir uns dabei als Potenzreihe in \vec{p} vor. Eine einfache Rechnung zeigt dann, daß wir den Impulserwartungswert auch direkt in der Ortsdarstellung ausrechnen können:

$$\langle f(\vec{p}) \rangle = \int d^3\vec{x} \psi(\vec{x}) f\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right) \psi(\vec{x}). \quad (49)$$

Dabei haben wir aber vorausgesetzt, daß die Wellenfunktion ψ hinreichend oft differenzierbar ist, und daß das Integral existiert. Das wollen wir zunächst einmal kritiklos hinnehmen.

Betrachten wir dies jetzt vom Standpunkt der abstrakten Klammerschreibweise aus, können wir dieses Resultat in der Form

$$\langle f(\vec{p}) \rangle = \langle \psi | f(\vec{p}) \psi \rangle \quad (50)$$

schreiben. Dabei ist \vec{p} ein linearer Operator¹⁰, der sich in der Impuls- bzw. der Ortsdarstellung in den Formen

$$(f(\vec{p})\psi')(\vec{p}) = f(p)\psi'(\vec{p}) \text{ und } (f(\vec{p})\psi)(x) = f\left(\frac{1}{i\hbar}\nabla\right) \psi(\vec{x}) \quad (51)$$

schreibt. Dieses Beispiel zeigt schon, daß wir überhaupt nicht in einer bestimmten Darstellung der Quantenmechanik zu arbeiten brauchen, wenn wir allgemeine Betrachtungen anstellen! Wir können uns die Schreiberei von Integralen und \vec{x} und \vec{p} sparen, wenn wir alles mit Hilfe des Hilbertraums ausdrücken könnten. Das legt sogar schon nahe, daß wir die konkrete Ausgestaltung des Hilbertraums als Funktionenraum gar nicht annehmen brauchen, um die allgemeinen Prinzipien der Quantentheorie zu formulieren, sondern den abstrakten Hilbertraum \mathcal{H} verwenden können, der sich in den verschiedensten konkreten Formen äußert. U.a. kann man ihn auch als Folgenraum ℓ_2 auffassen, der aus dem Raum der quadratsummierbaren Folgen besteht. Das Skalarprodukt ist in diesem Folgenraum einfach durch

$$\langle \psi | \phi \rangle = \sum_{k \in \mathbb{N}} \psi_k^* \phi_k \quad (52)$$

gegeben. Darstellungen der Quantentheorie in dieser Manifestation des abstrakten Raums führen zur Heisenbergschen Matrizenmechanik.

Wir müssen jetzt nur noch die Frage klären, welche speziellen Eigenschaften die Operatoren haben müssen, damit sie wie in unserem Fall Impuls und Ortsvektor eines Teilchens, Observablen im abstrakten Hilbertraum repräsentieren. Wir haben aber eigentlich nur eine Einschränkung von der Physik her vorliegen, nämlich daß die Erwartungswerte dieser Observablen für jeden Zustand reell sind, d.h. für einen Operator \mathbf{O} , der eine Observable repräsentieren soll, muß gelten

$$\langle \psi | \mathbf{O} \psi \rangle = \langle \mathbf{O} \psi | \psi \rangle \quad (53)$$

für jeden Zustand ψ . Wir setzen weiter voraus, daß die Observablen durch lineare Operatoren repräsentiert werden, was sich einfach daraus ergibt, daß sie auf Superpositionen von Wellenfunktionen wirken sollen wie auf jede einzelne Wellenfunktion. Außerdem ist dies die einfachste Annahme, die mit der mathematischen Struktur der Theorie verträglich ist. Wir

¹⁰ von dem wir schon wissen, daß er nicht auf dem ganzen Hilbertraum definiert sein wird!

dürfen wohl schon verraten, daß sich diese Annahme bei der Beschreibung der Experimente im Mikrokosmos bestens bewährt hat.

Dann können wir aber wie schon bei dem Nachweis der Unitarität des Zeitentwicklungsoperators zeigen, daß mit dieser Forderung für alle Zustände auch gilt

$$\langle \psi | \mathbf{O} \rangle \phi = \langle \mathbf{O} \psi | \phi \rangle \quad (54)$$

für irgendwelche Zustände ψ und ϕ . Einen solchen Operator nennt man *hermitesch*.

Wir müssen jetzt nur noch zeigen, daß ein hermitescher Operator in jeder Darstellung hermitesch ist. Dazu müssen wir den Begriff des adjungierten Operators definieren. Sei \mathbf{a} irgendein linearer Operator im Hilbertraum. Dann definiert man den zu ihm adjungierten Operator \mathbf{a}^\dagger dadurch, daß für alle Zustände ψ und ϕ gilt

$$\langle \mathbf{a} \psi | \phi \rangle = \langle \psi | \mathbf{a}^\dagger \psi \rangle \quad (55)$$

Damit können wir die Hermitezität der Observablen und die Unitarität der Zeitentwicklung oder des Basiswechsels auch als Operatorbeziehung definieren

$$\mathbf{O} = \mathbf{O}^\dagger \text{ und } \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbf{U} \mathbf{U}^\dagger = \mathbf{1}. \quad (56)$$

Die erste Beziehung für die Hermitezität des Operators \mathbf{O} ist unmittelbare Folge der Definition der Hermitezität. Die zweite Gleichung für die Unitarität bedarf wohl der Erläuterung. Ist \mathbf{U} unitär, muß für irgend zwei Zustände ψ und ϕ gelten

$$\langle \mathbf{U} \psi | \mathbf{U} \phi \rangle = \langle \psi | \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} \phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle, \quad (57)$$

woraus dann die Beziehung oben folgt.

Schließlich müssen wir noch klären, wie wir von der allgemeinen abstrakten Form wieder auf die Orts- oder die Impulsdarstellung oder irgendeine andere konkrete Darstellung zurückgelangen. Dazu betrachten wir noch einmal die besondere Eigenschaft des Ortsoperators in der Ortsdarstellung. Offenbar gilt

$$(\mathbf{x} \psi)(x) = x \psi(x). \quad (58)$$

Das ist aber so wie in der linearen Algebra, wenn wir einen linearen Operator in seiner Eigenbasis¹¹ als Matrix darstellen. Ein beliebiger Vektor läßt sich als Linearkombination der Eigenbasisvektoren darstellen, und jede Komponente multipliziert sich mit dem dazugehörigen Eigenwert, maW. der Operator ist in dieser Basis eine Diagonalmatrix mit den Eigenwerten auf der Diagonalen.

Hier im Hilbertraum haben wir es mit Operatoren zu tun, die auch kontinuierliche „Eigenwerte“ aufweisen können, und die dazugehörigen „Eigenzustände“ haben, so wollen wir hier gleich betonen, nicht die Eigenschaften von Hilbertraumvektoren, sie sind insbesondere nicht normierbar. Wie sich herausstellt, und wir werden das sogleich am Beispiel des Impulsoperators zeigen, sind diese verallgemeinerten Eigenvektoren in Wirklichkeit Distributionen. So wie wir sie aber in der Quantentheorie verwenden werden, brauchen wir sie auch nur als solche.

¹¹vorausgesetzt eine solche existiert überhaupt

Wir nehmen also jetzt einmal an, im abstrakten Hilbertraum (wir notieren im folgenden die Vektoren des abstrakten Hilbertraums in der von Dirac stammenden *Bra-Ket-Schreibweise*¹²) existierten Eigenvektoren des Ortsoperators $|\vec{x}\rangle$ mit der Eigenschaft

$$\vec{x} |\vec{x}\rangle = \vec{x} |\vec{x}\rangle. \quad (59)$$

Zunächst ist klar, daß die Eigenwerte von \vec{x} reellwertige Vektoren sein müssen, und das weist man sofort aufgrund der Hermitezität nach:

$$\langle \vec{x} | \vec{x} \rangle = \vec{x} \langle \vec{x} | \vec{x} \rangle = \langle \vec{x} | \vec{x} \rangle \vec{x} = \vec{x}^* \langle \vec{x} | \vec{x} \rangle \Rightarrow \vec{x} = \vec{x}^*. \quad (60)$$

Wir müssen allerdings zugeben, daß wir hier ein bißchen gemogelt haben, denn wir werden sehen, daß der Ausdruck $\langle \vec{x} | \vec{x} \rangle$ gar nicht sinnvoll definierbar ist, und wir haben ihn im letzten Schritt einfach weggekürzt. Doch soll uns auch das vorerst noch nicht weiter stören, wir rechnen im folgenden ohnehin nicht im Fahrwasser exakter mathematischer Entwicklungen¹³, sondern konzentrieren uns auf den physikalischen Gehalt.

Weiter weisen wir nun nach, daß das Skalarprodukt von Eigenvektoren zu unterschiedlichen Eigenwerten eines hermiteschen Operators verschwindet:

$$\langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \vec{x} \langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle \vec{x}' \Rightarrow (\vec{x} - \vec{x}') \langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = 0, \quad (61)$$

d.h. also für $\vec{x}' \neq \vec{x}$, daß $\langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = 0$ sein muß.

Wir nehmen nun weiter an, daß es zu jedem Ortsvektor \vec{x} genau einen Eigenvektor $|\vec{x}\rangle$ gibt, und daß diese ein verallgemeinertes vollständiges Orthonormalsystem bilden, d.h. es gilt

$$|\psi\rangle = \int d^3\vec{x} |\vec{x}\rangle \langle \vec{x} | \psi \rangle \quad (62)$$

für jedes $|\psi\rangle \in D(\vec{x})$, wobei wir mit $D(\vec{x})$ den Definitionsbereich des Ortsoperators \vec{x} bezeichnen.

Das wird auch oft durch die verallgemeinerte Vollständigkeitsrelation

$$\int d^3\vec{x} |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| = \mathbf{1} \quad (63)$$

beschrieben, die sehr nützlich für formale Rechnungen ist.

Wir wollen nun zeigen, daß die verallgemeinerte Ortsbasiskomponente $\langle \vec{x} | \psi \rangle$ alle Eigenschaften der Schrödingerschen Wellenfunktion besitzt, d.h. durch die verallgemeinerten Eigenvektoren können wir eine lineare Abbildung von $D(\vec{x}) \subset \mathcal{H}$ nach $L^2(\mathbb{R}^3)$ definieren durch $|\psi\rangle \in D(\vec{x}) \mapsto \langle \vec{x} | \psi \rangle \in L^2(\mathbb{R}^3)$, die die Skalarprodukte in beiden Räumen aufeinander abbildet.

Letzteres ist durch die Vollständigkeitsrelation (63) sofort einzusehen:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int d^3\vec{x} \langle \psi_1 | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi_2 \rangle = \int d^3\vec{x} \psi_1^*(\vec{x}) \psi_2(\vec{x}). \quad (64)$$

Wir können den gesamten Hilbertraum \mathcal{H} durch $L^2(\mathbb{R})$ repräsentiert denken, wenn wir zeigen können, daß das Bild von $D(\vec{x})$ dicht in $L^2(\mathbb{R}^3)$ liegt, d.h. wir können jede quadratintegrale

¹²Dieser Ausdruck stammt von dem englischen Wort „Bracket“ (Klammer), und kommt von der schon oben eingeführten Notation des Skalarprodukts.

¹³Für den sorgfältigen Leser sei aber auf [Tri80] verwiesen.

Funktion durch eine Funktion in diesem Teilraum von $L^2(\mathbb{R}^3)$ beliebig genau im Sinne der Hilbertraumnorm approximieren. Dann ist die Vervollständigung des Teilraums der Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}^3)$.

Wir geben nur das Resultat der exakten mathematischen Überlegungen an, weil diese recht technischer Natur sind. Es ist klar, daß der Ortsoperator die Eigenschaft $\langle \vec{x} | \mathbf{x} | \psi \rangle = \vec{x} \psi(\vec{x})$ erfüllt. Wählen wir nun $\psi(\vec{x})$ aus dem Schwartzschen Raum der schnell fallenden Funktionen, der alle beliebig oft stetig differenzierbaren Funktionen enthält, die schneller fallen als jede Potenz, ist klar, daß dieses ψ im Bild von $D(\vec{x})$ liegt. Aber aus der Funktionalanalysis der Hilberträume weiß man, daß dieser Teilraum des Bildes von $D(\vec{x})$ schon dicht in $L^2(\mathbb{R}^3)$ liegt. qed.

Nun müssen wir noch zeigen, wie der Impulsoperator im abstrakten Hilbertraum charakterisiert werden kann. Wir wissen, daß dieser Operator die Eigenschaft

$$\langle \vec{x} | \mathbf{p} | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\vec{x}) \quad (65)$$

erfüllen muß. Soll aber die Quantentheorie vollständig unabhängig von der Wahl der Basis definiert sein, müssen wir eine Eigenschaft des Impulsoperators finden, die eine Rekonstruktion dieser Beziehung gestattet. Die hervorstechendste Eigenschaft der Operatoren verglichen mit den reellen Größen, die die entsprechenden Observablen in der klassischen Mechanik beschreiben, ist daß sie nicht miteinander vertauschen, und wie wir gleich zeigen werden, ist in der Tat die Kenntnis der Vertauschungsrelation zwischen Ort und Impuls ausreichend um die kompletten Eigenschaften dieser Operatoren unabhängig von einer Basis zu charakterisieren. Dazu untersuchen wir zunächst, wie sich in der Ortsdarstellung, die Operatoren $\mathbf{x}\mathbf{p}$ und $\mathbf{p}\mathbf{x}$ unterscheiden. Dazu berechnen wir den *Kommutator* dieser Operatoren in der Ortsdarstellung:

$$[\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_k]_- \psi(\vec{x}) = \frac{\hbar}{i} \{x_i \partial_k \psi(\vec{x}) - \partial_k [x_i \psi(\vec{x})]\} = i\hbar \psi(\vec{x}). \quad (66)$$

Dies läßt sich unabhängig von der Darstellung in der Form der Kommutatorbeziehung

$$[\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j]_- = i\hbar \delta_{ij} \mathbf{1} \quad (67)$$

schreiben. Jetzt wollen wir die Wirkung des Impulsoperators auf einen verallgemeinerten Ortseigenvektor finden.

Dazu definieren wir die folgende Funktion

$$|\vec{x}, \vec{\alpha}\rangle = \exp(i\vec{\alpha}\vec{\mathbf{p}}) \left| \vec{k} \right\rangle. \quad (68)$$

Durch Gradientenbildung folgt dann

$$\left. \frac{\partial}{\partial \vec{\alpha}} |\vec{x}, \vec{\alpha}\rangle \right|_{\vec{\alpha}=0} = i\vec{\mathbf{p}} |\vec{x}\rangle. \quad (69)$$

Nun definieren wir den Operator

$$\vec{\mathbf{O}}(k) = \left[\vec{\mathbf{x}}, (\vec{\alpha}\vec{\mathbf{p}})^k \right]_-, \quad k \in \mathbb{N}. \quad (70)$$

Aus der Kommutatorrelation (67) folgt die Rekursionsformel

$$\vec{\mathbf{O}}(k) = (\vec{\alpha}\vec{\mathbf{p}}) \vec{\mathbf{O}}(k-1) + i\hbar \vec{\alpha} (\vec{\alpha}\vec{\mathbf{p}})^{k-1} \quad (71)$$

und zusammen mit dem Rekursionanfang $\vec{\mathbf{O}}(0) = 0$ ergibt sich

$$\mathbf{O}(k) = i\hbar k \vec{\alpha} (\vec{\alpha} \vec{\mathbf{p}})^{k-1}. \quad (72)$$

Mit der Exponentialreihe finden wir aber damit sofort

$$[\vec{\mathbf{x}}, \exp(i\vec{\alpha} \vec{\mathbf{p}})]_- = -\hbar \vec{\alpha} \exp(i\vec{\alpha} \vec{\mathbf{p}}). \quad (73)$$

Wir wenden nun den Ortsoperator auf den oben definierten Ket $|\vec{x}, \alpha\rangle$ an:

$$\vec{\mathbf{x}} |\vec{x}, \alpha\rangle = \vec{\mathbf{x}} \exp(i\vec{\alpha} \vec{\mathbf{p}}) |\vec{x}\rangle = \{[\vec{\mathbf{x}}, \exp(i\vec{\alpha} \vec{\mathbf{p}})]_- + \exp(i\vec{\alpha} \vec{\mathbf{p}})\} |\vec{x}\rangle = (\vec{x} - \hbar \vec{\alpha}) |\vec{x}, \alpha\rangle. \quad (74)$$

Das bedeutet aber, daß $|\vec{x}, \alpha\rangle$ verallgemeinerter Eigenvektor des Ortsoperators zum Eigenwert $\vec{x} - \hbar \vec{\alpha}$ ist. Damit ergibt sich aber insbesondere auch

$$\vec{\mathbf{p}} |\vec{x}\rangle = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{\alpha}} |\vec{x}, \alpha\rangle \Big|_{\alpha=0} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} |\vec{x}\rangle. \quad (75)$$

Durch hermitesche Konjugation folgt daraus

$$\langle \vec{x} | \vec{\mathbf{p}} = +\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \langle \vec{x} |. \quad (76)$$

Daraus ergibt sich aber für jeden Ket $|\psi\rangle$, für den $\psi(x) = \langle \vec{x} | \psi \rangle \in S(\mathbb{R})$ gilt:

$$\langle \vec{x} | \vec{\mathbf{p}} | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \psi(\vec{x}), \quad (77)$$

womit aber gezeigt ist, daß in der Tat die Kommutatorrelation (67) äquivalent zu der oben aufgrund der Einstein-de Broglie-Beziehung hergeleiteten Ortsdarstellung (65) des Impulsoperators ist.

Dieser Beweis ist der erste Schritt zu der Erkenntnis, daß nicht die Wellenfunktion die primäre Beschreibungsweise der Quantenphänomene liefert, sondern die von jeder Basis unabhängige Beschreibung mit Operatoren in Hilberträumen. Im folgenden Abschnitt werden wir auch die Dynamik der Quantentheorie im abstrakten Hilbertraum formulieren und damit die Konstruktion der allgemeinen Struktur der Quantentheorie abschließen.

2.2 Die Dynamik

Wir wollen zunächst die dynamische Beschreibung eines Quantensystems in einer speziellen Form, dem sog. *Schrödingerbild* gewinnen. Dies erhalten wir durch unmittelbare Identifikation der Operatoren und Zuständen mit den entsprechenden Elementen in der Ortsdarstellung. Die Wellenfunktion ist zeitabhängig, während die Observablen durch zeitunabhängige Differentialoperatoren beschrieben werden. Daher sind die Eigenfunktionen der Observablen selber zeitunabhängig. Identifizieren wir also, wie oben gezeigt, über die verallgemeinerten Eigenzustände des Ortsoperators die Wellenfunktionen mit Kets im Hilbertraum vermöge

$$|\psi, t\rangle = \int d^3 \vec{x} |\vec{x}\rangle \langle \vec{x} | \psi \rangle = \int d^3 \vec{x} |\vec{x}\rangle \psi(t, \vec{x}), \quad (78)$$

ist also der Zustandsket eine Funktion der Zeit. Wir haben oben weiter gesehen, daß aufgrund der Hermitezität des Hamiltonoperators die Zeitentwicklung in der Ortsdarstellung durch

eine unitäre Transformation der Wellenfunktion gegeben ist. Entsprechend verallgemeinert sich diese Beobachtung auf die darstellungsunabhängigen Zustandskets. Es gibt also für jedes $t > t_0$ eine unitäre Transformation $\mathbf{U}(t, t_0)$, so daß

$$|\psi, t\rangle = \mathbf{U}(t, t_0) |\psi, t_0\rangle \quad (79)$$

ist. Es muß natürlich insbesondere $\mathbf{U}(t_0, t_0) = \mathbf{1}$ gelten. Wie bestimmt sich aber die zeitliche Entwicklung von \mathbf{U} ? Dazu betrachten wir die Unitaritätsbedingung

$$\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{1} \Rightarrow (\partial_t \mathbf{U})\mathbf{U}^\dagger + \mathbf{U}(\partial_t \mathbf{U}^\dagger) = 0. \quad (80)$$

Die letzte Beziehung bedeutet aber, daß der durch

$$\mathbf{H} = i\hbar(\partial_t \mathbf{U})\mathbf{U}^\dagger \quad (81)$$

definierte Operator hermitesch ist. Es gibt also einen hermiteschen Operator \mathbf{H} , der die Gleichung

$$i\hbar\partial_t \mathbf{U} = \mathbf{H}\mathbf{U} \quad (82)$$

erfüllt. Wir zeigen weiter, daß dabei \mathbf{H} lokal in der Zeit ist, d.h. \mathbf{H} hängt höchstens von t , nicht aber von t_0 ab. Dazu bemerken wir, daß der Zeitentwicklungsoperator \mathbf{U} die Bedingung

$$\mathbf{U}(t_0, t) = \mathbf{U}(t_0, t_1)\mathbf{U}(t_1, t) \quad (83)$$

erfüllen muß. Leitet man dies nach t ab und benutzt (82), folgt sofort, daß auch

$$\mathbf{H} = i\hbar\mathbf{U}^\dagger(t, t_1)\partial_t \mathbf{U}(t, t_1) \quad (84)$$

gilt.

Es ist klar, daß wir auch umgekehrt $\mathbf{H}(t)$ vorgeben können, und durch Lösen der Anfangswertgleichung

$$\hbar\partial_t \mathbf{U}(t, t_0) = -i\mathbf{H}(t)\mathbf{U}(t, t_0), \quad \mathbf{U}(t_0, t_0) = \mathbf{1} \quad (85)$$

einen Zeitentwicklungsoperator gewinnen können, der alle Eigenschaften erfüllt, die wir oben für einen Zeitentwicklungsoperator verlangt haben.

Ein Vergleich mit der Ortsdarstellung für den Fall des freien Teilchens zeigt, daß es sich bei \mathbf{H} um den *Hamiltonoperator* handelt, der die Energie des Teilchens repräsentiert.

Die genaue Form des Hamiltonoperators für ein gegebenes Systems ist natürlich durch physikalische Prinzipien zu gewinnen und kann nicht mathematisch hergeleitet werden. Als sehr tragfähig haben sich in der gesamten modernen Physik die Symmetrieprinzipien erwiesen, aus denen heraus man Wechselwirkungen postulieren kann. Dabei spielt das Noethertheorem eine wesentliche Rolle, daß jeder unabhängigen Symmetrieoperation (das sind in der Quantentheorie im wesentlichen die unitären Transformationen), die den Hamiltonoperator invariant läßt, ein Erhaltungssatz entspricht. Durch die empirische Beobachtung von Erhaltungsgrößen lassen sich nun aber umgekehrt auch die Symmetrieprinzipien gewinnen, die zur Aufstellung des Hamiltonoperators benutzt werden können. Wir können hier nicht näher auf diese fundamentalen Zusammenhänge eingehen, das soll einem nächsten Teil der Quantenmechanik-FAQ vorbehalten bleiben. Es sei aber betont, daß letztlich nur der Vergleich mit Beobachtungen im Experiment die Richtigkeit eines Ansatzes für den Hamiltonoperator entscheiden kann. Wir werden dann auch sehen, daß z.B. in der Atomphysik überraschend einfache Prinzipien zu brauchbaren Beschreibungen führen, während die scheinbar so ähnliche Sachlage in

der Kernphysik sich als äußerst kompliziert erweist und sowohl theoretisch wie experimentell aufwendige Untersuchungen notwendig sind um auch nur halbwegs brauchbare Hamiltonoperatoren aufstellen zu können.

Nehmen wir nun an, der Hamiltonoperator sei zeitunabhängig. In dem bis jetzt ausschließlich benutzten Schrödingerbild heißt das, daß er eine Funktion der fundamentalen Operatoren \vec{x} und \vec{p} und nicht der Zeit ist. Dann ist die Lösung der Anfangswertaufgabe (85) formal sehr einfach. Wir können dann nämlich für einen Augenblick die Gleichung als eine für komplexwertige Funktionen ansehen, denn es treten keine Probleme mit irgendwelchen Operatorordnungen auf. Dann ist die formale Lösung durch

$$\mathbf{U}(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar}(t - t_0)\mathbf{H} \right] \quad (86)$$

gegeben. Daß dies tatsächlich die Lösung ist, weist man sehr leicht durch Ableiten dieser Gleichung nach. Dabei ist entscheidend, daß in diesem Fall \mathbf{U} mit \mathbf{H} für jedes t vertauscht. Wäre \mathbf{H} nicht zeitunabhängig, wäre dies nicht mehr unbedingt der Fall und die Lösung des Problems weitaus verwickelter. Wir wollen in dieser einleitenden Betrachtung nicht näher darauf eingehen.

Wichtiger ist noch die Frage nach den stationären Zuständen. Dies war ja einer der Ausgangspunkte für die Entwicklung der Quantentheorie, nämlich die Lösung des Problems, wie es stabile Atome geben kann, was klassisch ja nicht mit den Rutherford'schen Beobachtungen bzgl. der um den Kern „kreisenden“ Elektronen vereinbar ist (vgl. Abschnitt 1). Für die Quantentheorie stellt das deshalb kein Problem dar, weil wir nach Zuständen suchen können, die sich zeitlich nicht ändern. Beobachtbar sind aber Zustände direkt nicht, nur die Meßwerte von Observablen (Eigenwerte der dazugehörigen Operatoren) am Einzelsystem bzw. deren Erwartungswerte und Wahrscheinlichkeiten für eine große Zahl von gleich präparierten Systemen (Ensembles). Das bedeutet aber, daß zwei Zustände $|\psi\rangle$ und $|\psi'\rangle$, die sich nur durch einen „Phasenfaktor“, also durch Multiplikation mit einer komplexen Zahl vom Betrag 1, unterscheiden, die gleiche physikalische Situation beschreiben und im Sinne der Quantentheorie als der gleiche Zustand angesehen werden müssen. Damit ist $|\psi, t\rangle$ ein stationärer Zustand, wenn für jeden Zeitpunkt t eine reelle Zahl $\alpha(t)$ existiert, so daß

$$|\psi, t\rangle_{\text{stat.}} = \exp[-i\alpha(t)] |\psi, t_0\rangle_{\text{stat}} \quad (87)$$

gilt.

Andererseits folgt aus (79) zusammen mit (85) die Bewegungsgleichung für die Zustände

$$i\hbar\partial_t |\psi, t\rangle = \mathbf{H} |\psi, t\rangle \quad (88)$$

und folglich für einen stationären Zustand

$$\hbar\dot{\alpha}(t) |\psi, t\rangle_{\text{stat}} = \mathbf{H}(t) |\psi, t\rangle_{\text{stat}}. \quad (89)$$

Das bedeutet aber, daß $|\psi, t\rangle_{\text{stat}}$ zu jedem Zeitpunkt ein Eigenvektor des Hamiltonoperators $\mathbf{H}(t)$ zum Eigenwert $\hbar\dot{\alpha}(t)$ sein muß. Es ist also notwendig

$$\mathbf{H}(t) |\psi, t_0\rangle_{\text{stat}} = E(t) |\psi, t_0\rangle_{\text{stat}} \quad \text{mit } E(t) = \hbar\dot{\alpha}(t). \quad (90)$$

Falls \mathbf{H} zeitunabhängig ist, ist auch $E(t)$ zeitunabhängig, und es gilt

$$|\psi, t\rangle_{\text{stat}} = \exp \left[-\frac{i}{\hbar}E(t - t_0) \right] |\psi, t_0\rangle_{\text{stat}}, \quad (91)$$

was natürlich auch direkt aus unserer Lösung (86) der Zeitentwicklungsgleichung für diesen Spezialfall folgt.

Wir können also festhalten: Stationäre Zustände eines Systems sind genau die *Eigenzustände des Hamiltonoperators*. Wegen ihrer Wichtigkeit nennt man die Eigenwertgleichung des Hamiltonoperators in der Ortsdarstellung auch *zeitunabhängige Schrödingergleichung*.

2.3 Bildtransformationen

Fassen wir nun noch einmal zusammen, was wir bis jetzt vom Standpunkt der Quantentheorie über physikalische Systeme wissen.

Wir haben schon mehrfach betont, daß die Elemente der Quantentheorie, nämlich die hermiteschen Operatoren, die Observablen repräsentieren, und die Hilbertraumvektoren, die die Zustände des Systems repräsentieren, selbst nicht direkt beobachtbar sind. Mögliche Meßwerte von Observablen sind durch die Eigenwerte der sie repräsentierenden Observablen bestimmt. Bei einer Messung geht das System in einen zum Meßwert gehörigen Eigenzustand über. Der Zustand wird durch Messung eines vollständigen Satzes kommutierender Observablenoperatoren eindeutig festgelegt. Allen Observablen, zu dem dieser Zustand nicht Eigenzustand ist, kommt kein eindeutiger Wert zu, es können aber Erwartungswerte und die Wahrscheinlichkeit des Eintretens bestimmter ihrer Meßwerte gewonnen werden. Befindet sich das System im normierten Zustand $|\psi\rangle$, so ist die Wahrscheinlichkeit, es in einem Zustand $|\psi'\rangle$ zu finden durch $|\langle\psi'|\psi\rangle|^2$ gegeben, und wird eine Observable O durch den hermiteschen Operator \mathbf{O} repräsentiert, so ist ihr Erwartungswert durch $\langle O \rangle = \langle\psi|\mathbf{O}|\psi\rangle$ gegeben.

All diese an realen Systemen durch Messung prinzipiell überhaupt erfaßbaren Größen ändern sich offenbar nicht, wenn wir eine unitäre Transformation \mathbf{B} wie folgt auf Zustandskets und Observablen repräsentierende Operatoren wirken lassen:

$$|\psi'\rangle = \mathbf{B}|\psi\rangle, \quad \mathbf{O}' = \mathbf{B}\mathbf{O}\mathbf{B}^\dagger, \quad (92)$$

denn dann gilt

$$\langle\phi'|\psi\rangle = \langle\mathbf{B}\phi|\mathbf{B}\psi\rangle = \langle\phi|\mathbf{B}^\dagger\mathbf{B}\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle, \quad \langle\mathbf{O}'\rangle_{\psi'} = \langle\mathbf{B}\psi|\mathbf{B}\mathbf{O}\mathbf{B}^\dagger|\mathbf{B}\psi\rangle = \langle\psi|\mathbf{O}|\psi\rangle. \quad (93)$$

Es ist auch klar, daß hermitesche Operatoren unter dieser unitären Transformation hermitesch bleiben und Kommutatoren sich kovariant transformieren:

$$[\mathbf{O}'_1, \mathbf{O}'_2]_- = \mathbf{B}[\mathbf{O}_1, \mathbf{O}_2]_- \mathbf{B}^\dagger. \quad (94)$$

Diese Rechnungen zeigen, daß \mathbf{B} auch zeitabhängig sein darf. Im vorigen Abschnitt haben wir allerdings angenommen, daß die Operatoren zeitunabhängig und die Zustandskets zeitabhängig sind. Ist nun \mathbf{B} zeitabhängig, ist dies für die gemäß (92) transformierten Objekte nicht mehr der Fall, während aber die physikalischen Aussagen der Theorie ungeändert bleiben.

Im folgenden wollen wir die Dynamik des Systems in einem beliebigen Bild formulieren, so daß wir kein spezielles, z.B. das Schrödingerbild, mehr benötigen. Gleichwohl machen wir vom Schrödingerbild zur Herleitung dieser Gleichungen Gebrauch. Seien also $|\psi\rangle$ und \mathbf{O} Zustandskets und Operatoren im Schrödingerbild und $|\psi'\rangle$ und \mathbf{O}' die gemäß (92) transformierten Objekte. Dann ergibt sich

$$\frac{d}{dt}|\psi', t\rangle = \frac{d\mathbf{B}}{dt}|\psi, t\rangle - \frac{i}{\hbar}\mathbf{B}\mathbf{H}|\psi, t\rangle, \quad (95)$$

wobei wir von (88) Gebrauch gemacht haben. Setzen wir jetzt auf der rechten Seite die gemäß (92) transformierten Objekte ein, folgt

$$\frac{d}{dt} |\psi', t\rangle = -\frac{i}{\hbar} \mathbf{Y} |\psi'\rangle \quad \text{mit } \mathbf{Y} = \mathbf{H}' + i\hbar \frac{d\mathbf{B}}{dt} \mathbf{B}^\dagger. \quad (96)$$

Dabei ist \mathbf{H}' der Hamiltonoperator im neuen Bild.

Für die Observablen folgt die Bewegungsgleichung

$$\frac{d\mathbf{O}'}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{O}', \mathbf{X}]_- + \partial_t^{\text{expl.}} \mathbf{O}' \quad \text{mit } \mathbf{X} = \mathbf{H}' - \mathbf{Y}. \quad (97)$$

Dabei definieren wir

$$\partial_t^{\text{expl.}} \mathbf{O}' = \mathbf{B} \partial_t \mathbf{O} \mathbf{B}^\dagger, \quad (98)$$

wobei die Zeitabhängigkeit des Operators \mathbf{O} im Schrödingerbild rein explizit ist. Die Fundamentaloperatoren \mathbf{x} und \mathbf{p} , aus denen sich jeder Operator \mathbf{O} aufbauen läßt, sind definitionsgemäß zeitunabhängig.

Die physikalisch relevanten dynamischen Aussagen der Quantentheorie hängen jetzt nur von \mathbf{H}' , während das Bild durch die willkürliche Festlegung eines der hermiteschen Operatoren \mathbf{X} oder \mathbf{Y} abhängt. Die beiden Operatoren sind durch $\mathbf{X} + \mathbf{Y} = \mathbf{H}'$ miteinander verknüpft.

Man kann leicht zeigen, daß umgekehrt die Annahme der Bewegungsgleichungen (96) und (97) auf eine bildunabhängige Dynamik der relevanten Größen führt. So gilt

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{O}' \rangle_{\psi'} = \left(\frac{d}{dt} \langle \psi' | \right) \mathbf{O}' |\psi'\rangle + \langle \psi' | \frac{d\mathbf{O}'}{dt} |\psi'\rangle + \langle \psi' | \mathbf{O}' \frac{d}{dt} |\psi'\rangle. \quad (99)$$

Setzen wir nun (96) und (97) in diese Gleichungen ein, finden wir die bildunabhängige Gleichung

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{O}' \rangle_{\psi'} = \left\langle \dot{\mathbf{O}}' \right\rangle_{\psi'} \quad \text{mit } \dot{\mathbf{O}}' := \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{O}', \mathbf{H}']_- + \partial_t^{\text{expl.}} \mathbf{O}'. \quad (100)$$

Dabei ist zu beachten, daß der Punkt über einem Operator nicht die mathematische Zeitableitung desselben bedeutet, sondern durch die Kommutatorrelation ergänzt durch die Ableitung aufgrund der expliziten Zeitabhängigkeit definiert ist. Dies ist die sog. *physikalische Zeitableitung* der Quantentheorie, die man als *unter Bildtransformationen kovariante Zeitableitung* betrachten kann. Man nennt (100) auch das *Ehrenfestsche Theorem*.

2.4 Das Heisenbergbild

Als eine Anwendung der bild- und darstellungsunabhängigen Formulierung der quantentheoretischen Dynamik betrachten wir die Herleitung der dynamischen Gleichungen im Heisenbergbild. Dieses Bild ist im gewissen Sinne konträr zum Schrödingerbild. Die volle Zeitabhängigkeit wird dabei auf die Operatoren gewälzt. Das bedeutet, daß wir gemäß (96) und (97)

$$\mathbf{X} = \mathbf{H}_H \quad \text{und} \quad \mathbf{Y} = 0 \quad (101)$$

zu setzen haben. Explizit heißt das, daß die kovariante Zeitableitung identisch ist mit der totalen Zeitableitung und die Zustände überhaupt nicht zeitabhängig sind.

In diesem Bild läßt sich auch sehr einfach der bildunabhängige Zeitentwicklungsoperator in der Ortsdarstellung, also die Greensche Funktion der Schrödingergleichung bei gegebenem Hamiltonoperator, gewinnen. Es gilt wie in jedem Bild:

$$\psi(t, \vec{x}) = (\langle \vec{x}, t | \psi \rangle)_H = \int d^3 \vec{x}' (\langle \vec{x}, t | \vec{x}', t_0 \rangle)_H \psi(\vec{x}', t_0) \quad (102)$$

Folglich ist

$$U(\vec{x}, t; \vec{x}', t_0) = (\langle \vec{x}, t | \vec{x}', t_0 \rangle)_H. \quad (103)$$

Freilich ist die Lösung der dafür benötigten Gleichungen nicht wesentlich einfacher als die im ersten Kapitel angegebene Methode, weil man ja erst die Operatorgleichung für die Zeitentwicklung und dann noch das Eigenproblem zu lösen hat.

Wir wollen zur Illustration den Propagator des freien Teilchens mit dieser Methode berechnen. Wir schreiben jetzt die Operatoren im *Heisenbergbild* ohne Indizes, um die Rechnung übersichtlicher zu gestalten. Definitionsgemäß ist der Hamiltonoperator des freien Teilchens

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m}. \quad (104)$$

Nach (97) und (101) folgt zunächst für die Zeitabhängigkeit der Fundamentaloperatoren

$$\frac{d\vec{\mathbf{p}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{\mathbf{p}}, \mathbf{H}]_- = 0, \quad \frac{d\vec{\mathbf{x}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{\mathbf{x}}, \mathbf{H}]_- = \frac{1}{m} \vec{\mathbf{p}}. \quad (105)$$

Die Lösung ist in diesem Fall trivial:

$$\vec{\mathbf{p}}(t) = \vec{\mathbf{p}}(t_0) = \vec{\mathbf{p}}_0, \quad \vec{\mathbf{x}}(t) = \vec{\mathbf{x}}_0 + \frac{(t - t_0)}{m} \vec{\mathbf{p}}. \quad (106)$$

Multiplizieren wir die Eigenwertgleichung

$$\vec{\mathbf{x}}(t) |\vec{x}, t\rangle = \vec{x} |\vec{x}, t\rangle \quad (107)$$

mit $\langle \vec{x}_0, t_0 |$ und wenden die Lösung (106) der Heisenbergschen Operatorbewegungsgleichungen sowie die Hermitezität der Operatoren $\vec{\mathbf{x}}_0$ und $\vec{\mathbf{p}}_0$ an, finden wir die Bestimmungsgleichung

$$\left[\frac{\hbar(t - t_0)}{im} \partial_{\vec{x}_0} + \vec{x}_0 \right] \langle \vec{x}_0, t_0 | \vec{x}, t \rangle = \vec{x} \langle \vec{x}_0, t_0 | \vec{x}, t \rangle, \quad (108)$$

wobei wir (77) benutzt haben. Die allgemeine Lösung dieser Gleichung lautet

$$\langle \vec{x}_0, t_0 | \vec{x}, t \rangle = N \exp \left[\frac{im}{2(t - t_0)\hbar} (x - x_0)^2 \right]. \quad (109)$$

Die Normierungskonstante bestimmt sich aus der Anfangsbedingung

$$\langle \vec{x}_0, t_0 | \vec{x}, t_0 \rangle = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}_0) \quad (110)$$

zu

$$N = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t - t_0)} \right)^{3/2}, \quad (111)$$

was wir bei der Behandlung mit Hilfe der Schrödingergleichung bereits in Abschnitt 2.1 ausgerechnet haben. Unsere jetzige Lösung stimmt natürlich genau mit der dort gewonnenen überein, wie es sein muß.

3 Zusammenfassung

Wir können nunmehr die heuristische Betrachtung der Quantentheorie zu einigen grundlegenden Postulaten zusammenfassen.

1. Der Zustand eines quantenmechanischen System wird durch einen normierten Vektor $|\psi\rangle$ eines Hilbertraums \mathcal{H} repräsentiert. Befindet sich das System im Zustand $|\psi\rangle$, so ist die Wahrscheinlichkeit dafür, es bei einer Messung im Zustand $|\phi\rangle$ vorzufinden:

$$w_\psi(\phi) = |\langle\phi|\psi\rangle|^2. \quad (112)$$

2. Jede physikalische Observable O wird durch einen auf einem dichten Teilraum von \mathcal{H} definierten hermiteschen Operator \mathbf{O} repräsentiert.

Wird durch exakte Messung von O der Wert o bei dem System festgestellt, so ist o ein (verallgemeinerter) Eigenwert des korrespondierenden Operators \mathbf{O} , und das System geht in einen (verallgemeinerten) Eigenzustand zu diesem (verallgemeinerten) Eigenwert über.

Befand sich das System vor der Messung im Zustand $|\psi\rangle$, befindet es sich nach der Messung in dem (verallgemeinerten) Eigenzustand

$$|\tilde{\psi}\rangle = \int_{o'=o} d o' |o'\rangle \langle o'|\psi\rangle, \quad (113)$$

wobei das Integralzeichen $\int d o'$ ein Integral bezeichnet, falls o zum kontinuierlichen Spektrum von \mathbf{O} und eine Summe, falls es zum diskreten Spektrum gehört. Integriert bzw. summiert wird über alle (verallgemeinerten) Eigenvektoren zum (verallgemeinerten) Eigenwert o , der sich als Resultat der Messung ergeben hat.

3. Die Dynamik des Systems wird eindeutig durch die Zuordnung eines hermiteschen nach unten beschränkten Operators \mathbf{H} , des Hamiltonoperators des Systems, bestimmt.

Ist \mathbf{O} der die Observable O repräsentierende hermitesche Operator \mathbf{O} , so repräsentiert die kovariante Ableitung

$$\dot{\mathbf{O}} = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{O}, \mathbf{H}]_- + \partial_t^{\text{expl}} \mathbf{O} \quad (114)$$

die zeitliche Ableitung \dot{O} der Observablen O .

3.1 Vollständiger Satz verträglicher Observabler

Als erste Folgerung aus den obigen Postulaten können wir klären, wie einem realen System eindeutig ein Zustand zugeordnet werden kann. Nach Postulat 2 müssen wir dazu simultan so viele Observable messen, daß die dazugehörigen simultanen (verallgemeinerten) Eigenvektoren *unabhängig vom Ausgang der Messung* bis auf einen Phasenfaktor eindeutig bestimmt sind. Ein bekannter Satz der Hilbertraumtheorie sagt aus, daß dazu die Operatoren untereinander vertauschbar sein müssen. Mißt man also einen Satz vertauschbarer Observabler gibt es zu jedem Satz dazugehöriger (verallgemeinerter) Eigenwerte der korrespondierenden Operatoren stets mindestens einen gemeinsamen (verallgemeinerten) Eigenvektor. Solch einen Satz von Observablen nennt man *verträglich*. Legt die Messung eines verträglichen Satzes von Observablen den (verallgemeinerten) Eigenvektor sogar eindeutig fest, heißt der Satz vollständig.

Dies ist zu dem obigen Postulat konsistent, denn befindet sich das System in einem Eigenzustand der zu messenden Observablen, so erhält man gemäß (113) als Meßwert sicher den dazugehörigen (verallgemeinerten) Eigenwert, und der Eigenzustand ändert sich bei der Messung nicht.

3.2 Die Heisenbergsche Unschärferelation

Zum Schluß klären wir noch, was sich über die Messung nichtverträglicher Observabler aussagen läßt, d.h. man mißt an einem System im Zustand $|\psi\rangle$ eine Observable \mathbf{B} , für die $|\psi\rangle$ kein (verallgemeinerter) Eigenzustand von \mathbf{B} ist.

Wir brauchen im folgenden gar keine Annahmen über den konkreten Zustand des Systems zu machen. Seien also \mathbf{A} und \mathbf{B} beliebige zu Observablen A bzw. B gehörige Operatoren. Dann sei $\lambda \in \mathbb{R}$. Wegen der positiven Semidefinitheit des Skalarprodukts gilt

$$\langle (\mathbf{A} + i\lambda\mathbf{B})\psi | (\mathbf{A} + i\lambda\mathbf{B})\psi \rangle \geq 0. \quad (115)$$

Wegen der Hermitezität der Operatoren können wir dafür auch schreiben

$$\langle \psi | (\mathbf{A} - i\mathbf{B})(\mathbf{A} + i\mathbf{B}) | \psi \rangle \geq 0. \quad (116)$$

Ausmultiplizieren des Operatorprodukts gibt dann

$$\lambda^2 b^2 + 2c\lambda + a^2 \geq 0 \text{ mit } b^2 = \langle \mathbf{B}^2 \rangle_\psi, \quad c = \frac{i}{2} \langle [\mathbf{A}, \mathbf{B}]_- \rangle_\psi, \quad a^2 = \langle \mathbf{A}^2 \rangle_\psi. \quad (117)$$

Aufgrund der Hermitezität der Operatoren \mathbf{A} und \mathbf{B} sind die Koeffizienten des quadratischen Polynoms reell, und da es für alle $\lambda \in \mathbb{R}$ positiv semidefinit ist, kann sein Radikand höchstens 0 sein. Daraus ergibt sich dann die Ungleichung

$$a^2 b^2 \geq c^2 \text{ oder } |a||b| \geq |c|. \quad (118)$$

Setzen wir hierin statt \mathbf{A} und \mathbf{B} die Operatoren $\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \langle A \rangle_\psi$ und $\mathbf{B}' = \mathbf{B} - \langle B \rangle_\psi$ ein, folgt daraus die allgemeine Unschärferelation

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\mathbf{A}, \mathbf{B}]_- \rangle_\psi \right|, \quad (119)$$

wobei ΔA die Standardabweichung der Observablen \mathbf{A} aufgrund der Wahrscheinlichkeitsverteilung der möglichen Meßergebnisse ist, die durch den Zustand des Systems $|\psi\rangle$ gegeben ist:

$$\Delta A = \sqrt{\langle \psi | (\mathbf{A} - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle}. \quad (120)$$

Analog ist natürlich auch ΔB definiert.

Setzt man nun insbesondere \mathbf{x} und \mathbf{y} für \mathbf{A} und \mathbf{B} ein, folgt aus der Heisenbergalgebra die bekannte Orts-Impulsunschärferelation:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (121)$$

Die Unschärferelation beantwortet nun klar die Frage, was bei der Messung einer mit dem Systemzustand nicht verträglichen Observable passiert. Es ist i.a. gar nicht möglich, beide Observable gleichzeitig exakt zu messen (im Fall von Ort und Impuls ist das sogar immer der Fall, d.h. unabhängig vom Meßergebnis, denn die rechte Seite hängt in diesem Fall nicht vom Zustand $|\psi\rangle$ des Systems ab, in dem es sich zum Zeitpunkt der Messung befindet).

Literatur

[Tri80] H. Triebel, Höhere Analysis, Verlag Harri Deutsch, Thun, Frankfurt a. Main (1980)