

Anmerkungen zur Quantenmechanik

Norbert Dragon
Institut für Theoretische Physik
Universität Hannover
<http://www.itp.uni-hannover.de/~dragon>

11. April 2001

Zusammenfassung

Als Ergänzung, Wiederholung und Kommentar gedacht, nachdem freie Teilchen, Potentialtopf, Potentialbarriere, Wasserstoffatom und Streuung verstanden sind. Unter den zahllosen Darstellungen empfehle ich als verlässliche, wenngleich sehr anspruchsvolle Darstellung [1].

Inhaltsverzeichnis

1	Wahrscheinlichkeit von Meßwerten	4
2	mathematische Grundlagen	6
2.1	Orthonormalbasis	6
2.2	Bracket-Schreibweise	7
2.3	Matrixalgebra	8
2.4	Projektoren, Zerlegung der Eins	9
2.5	endliche Norm	10
2.6	Strahlen im Hilbertraum	10
3	Dichtematrix	13
3.1	statistische Quellen	13
3.2	Mischen von Gemischen	15
4	Operatoren	16
4.1	Erwartungswerte	16
4.2	unbeschränktes Spektrum	18
4.3	Unschärfe	19
4.4	Kommutator	21
4.5	Erzeuger-Vernichter-Algebra	22
4.6	Drehimpulsalgebra	24
4.7	Messung eines Spin-1/2-Gemisches	26
4.8	Störungstheorie	30
5	kontinuierliches Spektrum	33
5.1	Wellenfunktion	33
5.2	Transformationen des Ortes	34
5.3	Translationen und Impuls	37
5.4	Drehungen und Bahndrehimpuls	39
5.5	kontinuierliche Basis	41
5.6	Mehrteilchenzustände	43

6	Zeitentwicklung, Grundzustandsenergie	46
6.1	Schrödingergleichung	46
6.2	Schrödingerbild, Heisenbergbild	50
6.3	Grundzustandsenergie	51
6.4	kanonische Quantisierung, Normalordnung	53
6.5	Zustandsreduktion	56
6.6	Zeitentwicklung im Zweizustandssystem	58
6.7	Energiebänder	59
7	zusammengesetzte Systeme	65
7.1	Produktraum	65
7.2	Addition von Drehimpulsen	66
7.3	unabhängig zusammengesetzte Gemische	67
8	Grundlagen der Thermodynamik	70
8.1	Entropie	70
8.2	Gleichgewicht	75
9	Zerfall eines instabilen Teilchens	78
9.1	Lorentzresonanz	78
9.2	Abweichungen vom exponentiellen Zerfall	80
9.3	Goldene Regel	81
9.4	Zerfall ins Kontinuum	84
9.5	Allgemeingültigkeit	88
9.6	Zerfall bewegter Teilchen	89
A	$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \frac{1}{x+i\varepsilon} = \mathbf{P} \mathbf{V} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$	92
B	$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(tx)}{tx^2} = \pi\delta(x)$	94
C	Bemerkung zur Fouriertransformation	95
D	Ableitung der Determinante	96
	Literaturverzeichnis	97

Abbildungsverzeichnis

1.1	prinzipielle Meßanordnung	4
4.1	Strahlaufspaltung bei Spin $1/2$	28
8.1	Entropie als konvexe Funktion des Mischungsparameters	73

Kapitel 1

Wahrscheinlichkeit von Meßwerten

Physiker beobachten, messen und analysieren Eigenschaften von Systemen, die so präpariert sind, daß sie genügend einfach sind.

Wir wollen uns konkreter vorstellen, daß es sich bei dem zu messenden System, dem Zustand, um Teilchen in einem Strahl handelt und daß der Meßapparat wie ein Stern-Gerlach-Apparat diesen Strahl in mehrere Teilstrahlen aufspaltet. Bei den Meßwerten $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{n-1}, \alpha_n$ können wir an die Ablenkwinkel denken.

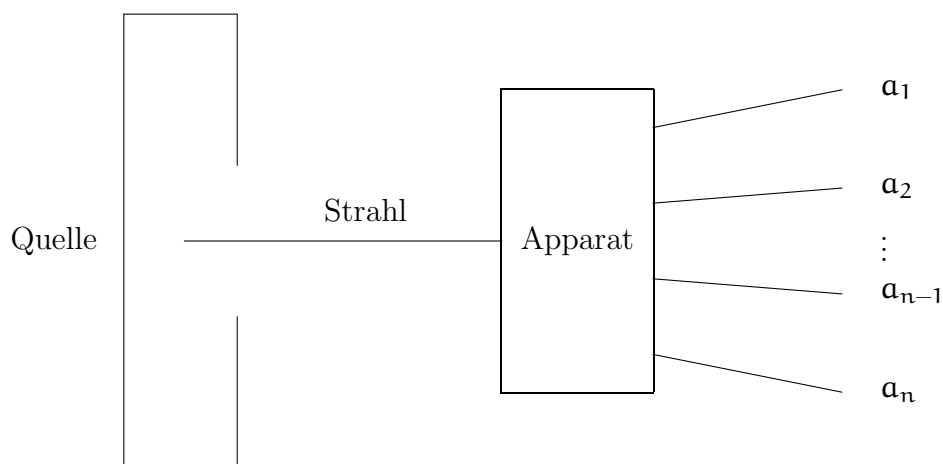


Abbildung 1.1: prinzipielle Meßanordnung

Die Quantenmechanik berücksichtigt folgende experimentelle Befunde

1. Für jeden Meßwert \mathbf{a}_i eines idealen Meßapparats \mathbf{A} kann ein Zustand Λ_i präpariert werden, bei dem mit Sicherheit \mathbf{a}_i gemessen wird.
2. Auch wenn das zu messende System, der Zustand Ψ , ideal präpariert worden ist, liegt nicht für alle Meßapparate \mathbf{A} fest, welcher der Meßwerte $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n$, auftritt.

und macht folgendes mathematische Modell für die Wirklichkeit:

Satz 1 Wahrscheinlichkeit von Meßwerten

Wenn der Zustand Ψ vermessen wird, so ist

$$w(\mathbf{a}_i, \Psi) = |\langle \Lambda_i | \Psi \rangle|^2 \quad (1.1)$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, daß der Meßapparat \mathbf{A} den Meßwert \mathbf{a}_i anzeigt.

Wir unterstellen dabei einfachshalber, daß der Meßapparat \mathbf{A} so fein unterscheidet, daß zu einem Meßwert \mathbf{a}_i nur ein Zustand Λ_i gehört. Dieser Zustand heißt Eigenzustand von \mathbf{A} zum Eigenwert \mathbf{a}_i . Gehört zu einem Meßwert nur ein Zustand, so heißt der Meßwert „nicht entartet“.

Kapitel 2

mathematische Grundlagen

2.1 Orthonormalbasis

Die Formel (1.1) für die Wahrscheinlichkeit ist folgendermaßen zu lesen: zu Zuständen wie Λ_i und Ψ gehören Vektoren in einem Hilbertraum \mathcal{H} . Ein Hilbertraum ist ein Vektorraum, das heißt mit irgend zwei Vektoren Λ und Ψ aus dem Hilbertraum ist auch die Summe $\Lambda + \Psi$ und jedes komplexe Vielfache $c\Psi = \Psi c$, $c \in \mathbb{C}$, Vektor im Hilbertraum. Für alle Paare von Vektoren ist ein Skalarprodukt $\langle \Lambda | \Psi \rangle \in \mathbb{C}$ mit folgenden Eigenschaften definiert

$$\langle \Lambda | \Psi \rangle^* = \langle \Psi | \Lambda \rangle, \quad (2.1)$$

$$\langle \Lambda | c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 \rangle = c_1 \langle \Lambda | \Psi_1 \rangle + c_2 \langle \Lambda | \Psi_2 \rangle, \quad c_1, c_2 \in \mathbb{C}. \quad (2.2)$$

Das Skalarprodukt ist also linear im zweiten Argument und wegen (2.1) antilinear im ersten Argument

$$\langle c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 | \Lambda \rangle = c_1^* \langle \Psi_1 | \Lambda \rangle + c_2^* \langle \Psi_2 | \Lambda \rangle. \quad (2.3)$$

Das Skalarprodukt eines Vektors mit sich ist positiv definit und wird verwendet, um die Länge von Vektoren zu definieren

$$0 \leq \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi |^2 < \infty, \quad \langle \Psi | = 0 \Leftrightarrow \Psi = 0. \quad (2.4)$$

Die Wahrscheinlichkeit $w(a_i, \Psi)$, mit der ein Meßapparat A den Meßwert a_i anzeigt, wenn der Zustand Ψ vermessen wird, ist gemäß (1.1) das Betragsquadrat des Skalarproduktes $\langle \Lambda_i | \Psi \rangle$ des zu messenden Zustandes Ψ mit dem zum Meßwert a_i gehörenden Eigenzustand Λ_i . Man nennt das Skalarprodukt $\langle \Lambda_i | \Psi \rangle$ die Wahrscheinlichkeitsamplitude für den zugehörigen Meßwert a_i .

Aus (1.1) folgt, daß die Zustände Λ_i normiert sind und zueinander senkrecht stehen.

$$\langle \Lambda_i | \Lambda_j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{falls } i \neq j \\ 1 & \text{falls } i = j \end{cases} \quad (2.5)$$

Denn falls der Eigenzustand Λ_j vermessen wird, tritt mit Sicherheit der Meßwert a_j auf und die anderen Meßwerte haben Wahrscheinlichkeit 0 $w(a_i, \Lambda_j) = \delta_{ij}$. Aus diesen Wahrscheinlichkeiten erschließt man mit (2.4) die Wahrscheinlichkeitsamplituden (2.5) der Λ_j .

Quantenmechanik macht über (1.1) hinaus die Annahme, daß die Eigenzustände Λ_i eine Basis bilden. Daher läßt sich jeder Zustand Ψ als komplexe Linearkombination der Λ_i schreiben.

$$\Psi = \sum_j \Lambda_j \psi_j \quad \psi_j \in \mathbb{C} \quad (2.6)$$

Die Komponenten ψ_i erhält man wegen (2.5) als Skalarprodukt mit Λ_i

$$\psi_i = \langle \Lambda_i | \Psi \rangle. \quad (2.7)$$

Die Komponenten von Ψ in der Basis der Eigenzustände des Meßapparates sind die Wahrscheinlichkeitsamplituden für die zugehörigen Meßwerte.

Ist der Zustand noch unbekannt, so können die Beträge der Komponenten, die zur Basis der Eigenzustände eines Meßapparates gehören, der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Meßwerte entnommen werden. Die Phasen dieser Komponenten müssen aus anderen Messungen bestimmt werden.

2.2 Bracket-Schreibweise

Setzen wir die Komponenten in (2.6) ein, so erhalten wir

$$\Psi = \sum_j \Lambda_j \langle \Lambda_j | \Psi \rangle. \quad (2.8)$$

Das Skalarprodukt mit irgendeinem Vektor Φ führt zu folgendem Formelbild

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \Phi | \left(\sum_j \Lambda_j \langle \Lambda_j | \Psi \rangle \right) = \sum_j \langle \Phi | \Lambda_j \rangle \langle \Lambda_j | \Psi \rangle. \quad (2.9)$$

Da diese Gleichung für alle Φ gilt, läßt man das Symbol „ $\langle \Phi |$ “ weg und erhält die einprägsame Gleichung

$$|\Psi\rangle = \sum_j |\Lambda_j\rangle \langle \Lambda_j | \Psi \rangle = \sum_j |\Lambda_j\rangle \psi_j. \quad (2.10)$$

Zerlegt man Ψ im Skalarprodukt $\langle \Psi | \Phi \rangle$, so erhält man wegen (2.1) analog

$$\langle \Psi | = \sum_j \langle \Psi | \Lambda_j \rangle \langle \Lambda_j | = \sum_j \psi_j^* \langle \Lambda_j |. \quad (2.11)$$

Dirac hat den Sprachgebrauch Ket-Vektor für den Anteil $|\Psi\rangle$ im Skalarprodukt eingeführt und für den Anteil $\langle \Phi |$ den Namen Bra-Vektor. Das Skalarprodukt ist eine Klammer (englisch bracket) $\langle \Phi | \Psi \rangle$, die sich aus Bra- und Ket-Vektoren zusammensetzt. Die zugegebenermaßen triviale, bijektive Abbildung¹ von Vektoren auf Ket-Vektoren $\Psi \rightarrow |\Psi\rangle$ ist linear, diejenige auf Bra-Vektoren $\Psi \rightarrow \langle \Psi |$ antilinear: $\langle c\Psi | = c^* \langle \Psi |$. Die Abbildung von Bra- auf Ket-Vektoren ist eine Konjugation $|\Psi\rangle^* = \langle \Psi |$.

2.3 Matrixalgebra

Gemäß (2.9) läßt sich das Skalarprodukt einfach aus den Komponenten berechnen.

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \sum_j \phi_j^* \psi_j \quad (2.12)$$

Ordnet man die Komponenten eines Ket-Vektors als Spalte an und die Komponenten des Bra-Vektors als Zeile – sie sind wegen (2.11) die komplex konjugierten Komponenten des zugehörigen Ket-Vektors – dann erhält man das Skalarprodukt durch Matrixmultiplikation der Zeile mit der Spalte.

Wendet man einen Operator A auf einen Vektor Ψ an, so erhält man die Komponenten $(A\Psi)_n$ ebenfalls durch Matrixmultiplikation.

$$(A\Psi)_n = \langle \Lambda_n | A\Psi \rangle = \sum_m \langle \Lambda_n | A \Lambda_m \rangle \psi_m = \sum_m A_{nm} \psi_m \quad (2.13)$$

Den Spaltenvektor der Komponenten von $A\Psi$ erhält man also durch Matrixmultiplikation von der Matrix, die das Matrixelement $A_{nm} = \langle \Lambda_n | A \Lambda_m \rangle$ in der n -ten Zeile und m -ten Spalte enthält, mit dem Spaltenvektor der Komponenten von Ψ .

Der hermitesch adjungierte Operator A^\dagger eines linearen Operators A ist durch

$$\langle \Lambda | A\Psi \rangle = \langle A^\dagger \Lambda | \Psi \rangle \quad \langle \Lambda, \Psi \rangle \quad (2.14)$$

definiert. Beim hermitesch Adjungieren eines Produkts von Operatoren wird die Reihenfolge gespiegelt

$$\langle \Lambda | AB\Psi \rangle = \langle A^\dagger \Lambda | B\Psi \rangle = \langle B^\dagger A^\dagger \Lambda | \Psi \rangle, \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger. \quad (2.15)$$

¹Sie ähnelt einer militärischen Beförderung, bei der Streifen und Winkel hinzugefügt werden.

und Zahlen komplex konjugiert $c^\dagger = c^*$. Hermitesch adjungierte (transponierte und komplex konjugierte) Matrizen entsprechen hermitesch adjungierten Operatoren.

$$(A^\dagger)_{nm} = \langle \Lambda_n | A^\dagger | \Lambda_m \rangle = \langle A \Lambda_n | \Lambda_m \rangle = \langle \Lambda_m | A \Lambda_n \rangle^* = A_{mn}^* \quad (2.16)$$

Mit den Matrixelementen A_{nm} und den Basisvektoren schreiben sich in Bracket-Schreibweise die Operatoren A als

$$A = \sum_{nm} |\Lambda_n\rangle A_{nm} \langle \Lambda_m|, \quad (2.17)$$

oder in konventionellerer Schreibweise als

$$A : \Psi \rightarrow \sum_{nm} \Lambda_n A_{nm} \langle \Lambda_m | \Psi \rangle. \quad (2.18)$$

2.4 Projektoren, Zerlegung der Eins

Gemäß (2.10) wird jeder Zustand $|\Psi\rangle$ von $\sum_j |\Lambda_j\rangle \langle \Lambda_j|$ auf sich abgebildet, die Summe ist also der 1-Operator

$$\mathbb{1} = \sum_j |\Lambda_j\rangle \langle \Lambda_j|. \quad (2.19)$$

Die einzelnen Anteile

$$P_j = |\Lambda_j\rangle \langle \Lambda_j| \quad (2.20)$$

sind Projektoren

$$P_j^2 = P_j \quad (2.21)$$

auf zueinander orthogonale Unterräume

$$P_i P_j = 0 \text{ falls } i \neq j. \quad (2.22)$$

Die Darstellung (2.19) des 1-Operators als Summe von Projektionsoperatoren nennt man eine Zerlegung der Eins.

Mit Zerlegungen der Eins und der Bracket-Schreibweise ist die beim Basiswechsel zu bewältigende Algebra sehr übersichtlich: Seien $|\Gamma_i\rangle$ und $|\Lambda_i\rangle$ zwei Orthonormalbasen. Der Zusammenhang zwischen den Komponenten in den verschiedenen Basen ergibt sich, wenn man eine Zerlegung der Eins einschiebt

$$\langle \Gamma_i | \Psi \rangle = \sum_j \langle \Gamma_i | \Lambda_j \rangle \langle \Lambda_j | \Psi \rangle. \quad (2.23)$$

2.5 endliche Norm

Der Hilbertraum der Zustände ist oft (abhängig von den präparierten und zu vermessenden Systemen) nicht endlichdimensional und die Summen über Basissysteme müssen auf ihre Konvergenz geprüft werden. Wir unterschlagen in unserer Diskussion der Quantenmechanik fast alle damit verbundenen Komplikationen. Es sei hier nur bemerkt, daß Vektoren im Hilbertraum ein endliches Skalarprodukt haben

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_j \psi_j^* \psi_j < \infty \quad (2.24)$$

und daß daher die Komponenten ψ_j quadratsummierbar sein müssen. Umgedreht definiert bei gegebener Orthonormalbasis jede quadratsummierbare Folge ψ_n , $n = 0, 1, 2, \dots$, einen Vektor im Hilbertraum.

Für physikalische Zustände gilt einschränkender, daß die Betragsquadrate der Komponenten die Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten der zugehörigen Meßwerte sind. Wahrscheinlichkeiten erfüllen Summenregeln: wenn man die Wahrscheinlichkeiten für alle möglichen, sich gegenseitig ausschließende Fälle addiert, erhält man die Gesamtwahrscheinlichkeit 1.

$$1 = \sum_i w(a_i, \Psi) = \sum_i |\psi_i|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle \quad (2.25)$$

Jeder zu einem physikalischen Zustand gehörige Vektor im Hilbertraum ist normiert.

Es gehört nicht, wie man manchmal in Umkehrung des Sachverhalts hört, zu jedem Vektor im Hilbertraum ein physikalischer Zustand. Insbesondere gehört zum Vektor 0 im Hilbertraum kein physikalischer Zustand, auch wenn der Grundzustand oft als $|0\rangle$ bezeichnet und mit dem Vektor 0 verwechselt wird.

2.6 Strahlen im Hilbertraum

Gemäß (2.5) und (2.25) gehören Zustände zu Vektoren auf der Einheitskugel des Hilbertraums. Aus der Formel (1.1) für Wahrscheinlichkeiten von Meßwerten folgt weiterhin, daß ein Einheitsvektor Ψ und der mit einer Phase multiplizierte Vektor $e^{i\alpha}\Psi$ zu demselben physikalischen Zustand gehören, denn für alle Meßapparate A stimmen die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Meßwerte überein

$$w(a_i, \Psi) = w(a_i, e^{i\alpha}\Psi) \quad \alpha \in \mathbb{R} \quad (2.26)$$

Demnach gehören physikalische Zustände zu Äquivalenzklassen von Einheitsvektoren mit der Äquivalenzrelation

$$\Psi \sim \Psi' \Leftrightarrow \exists \alpha \in \mathbb{R} : \Psi = e^{i\alpha} \Psi' . \quad (2.27)$$

Eleganter als der Begriff „Einheitsvektor modulo einer Phase“ ist der äquivalente Begriff eines „Strahls im Hilbertraum“ . Der zum Vektor $\Psi \neq 0$ gehörige Strahl ist einfach die Menge aller nichtverschwindenden, komplexen Vielfachen von Ψ . Ordnet man physikalischen Zuständen Strahlen im Hilbertraum zu, ist die Formel (1.1) für die Wahrscheinlichkeit von Meßwerten a_i so abzuändern, daß sie unabhängig von der Normierung der Vektoren wird.

$$w(a_i, \Psi) = \frac{|\langle \Lambda_i | \Psi \rangle|^2}{\langle \Lambda_i | \Lambda_i \rangle \langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (2.28)$$

Die Wahrscheinlichkeit stimmt für normierte Vektoren Λ_i und Ψ mit (1.1) überein und hängt nicht davon ab, welcher Vektor als Repräsentant des Strahls verwendet wird.

Die lineare Struktur des Hilbertraumes erlaubt es nicht, Zustände zu addieren: Zustände sind Strahlen – nicht Vektoren – im Hilbertraum oder, weniger vornehm, normierte Vektoren des Hilbertraumes bis auf eine Phase. Vektoren auf der Einheitskugel bilden keinen linearen Raum, es können also Zustände nicht addiert oder skalar multipliziert werden. Diese Bemerkung ist nicht nur eine mathematische Spitzfindigkeit: es wird nämlich oft unterstellt, Quantenmechanik sei in jeder Hinsicht linear. Man hört zum Beispiel den Sprachgebrauch, daß der Zustand beim Doppelspalt eine Summe von Zuständen sei, die durch den einen oder den anderen Spalt gegangen seien. Diese einzelnen Anteile sind keine Zustände. Zudem hängt der zusammengesetzte Zustand empfindlich von den relativen Phasen der Anteile ab. Es gibt keine natürliche Addition von Zuständen.

Statt einen Vektor Λ_i oder Ψ als Repräsentanten eines Strahls im Hilbertraum zu verwenden, kann man Strahlen durch die zugehörigen Projektoren

$$P_i = \frac{|\Lambda_i\rangle \langle \Lambda_i|}{\langle \Lambda_i | \Lambda_i \rangle} \quad (2.29)$$

und

$$\rho = \frac{|\Psi\rangle \langle \Psi|}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (2.30)$$

darstellen. Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Meßwertes a_i ist dann durch die Spur von P_i mal ρ gegeben.

$$w(a_i, \rho) = \text{tr } P_i \rho \quad (2.31)$$

Zur Erinnerung: die Spur $\text{tr } A$ eines Operators ist als

$$\text{tr } A = \sum_j \xi_j |A \xi_j| \quad (2.32)$$

definiert, wobei ξ_j eine Basis bilden (z.B. $\xi_j = \Lambda_j$). Die Spur eines Operators ist unabhängig von der Basis und zyklisch $\text{tr } AB = \text{tr } BA$.

In der Form (2.31) gilt die Wahrscheinlichkeitsformel auch in den allgemeineren Fällen, in denen der Meßwert \mathbf{a}_i entartet ist und mehrere, durch feinere Meßapparate unterscheidbare (und daher zueinander orthogonale) Zustände Λ_{ik} , $k = 1, 2, \dots$ zum Meßwert \mathbf{a}_i gehören. Der Projektor P_i ist dann zum Projektor auf den Unterraum derjenigen Zustände zu verallgemeinern, bei denen der Meßwert \mathbf{a}_i mit Sicherheit auftritt.

$$P_i = \sum_k \frac{|\Lambda_{ik}| \cdot \Lambda_{ik}}{|\Lambda_{ik}| \cdot \Lambda_{ik}} \quad (2.33)$$

Kapitel 3

Dichtematrix

3.1 statistische Quellen

Die Wahrscheinlichkeit (1.1) kann mit der Häufigkeit, mit der in Versuchsreihen die Meßwerte auftreten, nur verglichen werden, wenn in der Quelle immer wieder derselbe Zustand Ψ präpariert wird. Dies ist bei vielen Quellen, zum Beispiel bei Öfen, nicht der Fall. Wenn Teil der Quelle in Bild (1.1) ein Würfel ist, der mit Wahrscheinlichkeit p_1 den Zustand Ψ_1 , mit Wahrscheinlichkeit p_2 einen Zustand Ψ_2 und so weiter präpariert, dann tritt mit Wahrscheinlichkeit $p_1 w(\mathbf{a}_i, \Psi_1)$ der Fall auf, daß der Zustand Ψ_1 präpariert und \mathbf{a}_i gemessen wird, mit Wahrscheinlichkeit $p_2 w(\mathbf{a}_i, \Psi_2)$ der Fall, daß der Zustand Ψ_2 präpariert und \mathbf{a}_i gemessen wird und so weiter. Berücksichtigt man alle Möglichkeiten für das Auftreten des Meßwertes \mathbf{a}_i , so erhält man den Meßwert \mathbf{a}_i mit Wahrscheinlichkeit

$$w(\mathbf{a}_i, \rho) = \sum_j p_j w(\mathbf{a}_i, \Psi_j) = \sum_j p_j \langle \Lambda_i | \Psi_j \rangle \langle \Psi_j | \Lambda_i \rangle = \langle \Lambda_i | \rho | \Lambda_i \rangle, \quad (3.1)$$

wobei die Dichtematrix ρ

$$\rho = \sum_j p_j |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| \quad (3.2)$$

das Gemisch in allen meßbaren Eigenschaften charakterisiert.

Die Wahrscheinlichkeit, einen Meßwert \mathbf{a}_i zu messen, ist das zugehörige Hauptdiagonalelement der Dichtematrix in der Basis der Eigenzustände des Meßapparates.

Die Wahrscheinlichkeit (3.1) kann in einer Versuchsreihe nur dann mit der Häufigkeit von Meßwerten verglichen werden, wenn die Wahrscheinlichkeiten p_i während der Versuchsreihe unverändert bleiben, wenn das Gemisch

genügend häufig präpariert werden kann und wenn außerhalb des quantenmechanischen Systems Meßapparate existieren. Daher ist unklar, wie eine „Wellenfunktion des Universums“ zu deuten ist, die das einmalige Universum einschließlich aller Meßapparate beschreiben soll. Von dieser Frage sind wir allerdings gnädig verschont, da wir diese Wellenfunktion nicht kennen.

Mit der Bezeichnung Gemisch benennt man den Normalfall, daß verschiedene Zustände Ψ_i mit Wahrscheinlichkeiten p_i präpariert werden. Wird in Meßreihen immer derselbe Zustand Ψ präpariert, nennen wir das zu messende System auch deutlicher einen reinen Zustand. Reine Zustände sind spezielle Gemische, bei denen eine Produktionswahrscheinlichkeit 1 ist und die anderen Produktionswahrscheinlichkeiten verschwinden.

Die Zustände Ψ_i , aus denen sich das Gemisch zusammensetzt, sind normalerweise nicht paarweise orthogonal und bilden normalerweise keine Basis. Normalerweise lassen sich die einzelnen Summanden $p_j |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j|$ nicht aus der Dichtematrix ρ rekonstruieren, ebenso wie man einer gegebenen Zahl nicht ihre Summanden ansieht. Man kann aber die Eigenwerte ρ_i und orthonormierte Eigenvektoren Υ_i von ρ bestimmen

$$\rho \Upsilon_i = \rho_i \Upsilon_i \quad \text{mit} \quad \langle \Upsilon_i | \Upsilon_j \rangle = \delta_{ij} \quad (3.3)$$

und damit die Dichtematrix in der zum Verwechseln ähnlichen Form

$$\rho = \sum_i \rho_i |\Upsilon_i\rangle \langle \Upsilon_i| \quad (3.4)$$

schreiben. Die Eigenwerte ρ_i und die Projektoren auf die zugehörigen Eigenräume sind durch die Eigenwertgleichung von ρ festgelegt.

Jedes Hauptdiagonalelement $\langle \Lambda | \rho | \Lambda \rangle$ der Dichtematrix ist nichtnegativ

$$\langle \Lambda | \rho | \Lambda \rangle = \sum_j \langle \Lambda | p_j |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| \Lambda \rangle = \sum_j p_j |\langle \Lambda | \Psi_j \rangle|^2 \geq 0. \quad (3.5)$$

Insbesondere haben daher Dichtematrizen nichtnegative Eigenwerte ρ_i . Ein Hauptdiagonalelement $\langle \Lambda | \rho | \Lambda \rangle$ verschwindet genau dann, wenn alle Skalarprodukte $\langle \Lambda | \Psi_j \rangle$ verschwinden, also wenn $\rho | \Lambda \rangle$ Null ist

$$\langle \Lambda | \rho | \Lambda \rangle = 0 \Leftrightarrow \rho | \Lambda \rangle = 0. \quad (3.6)$$

Zudem ist die Spur $\text{tr } \rho$ der Dichtematrix

$$\text{tr } \rho = \sum_i \langle \Upsilon_i | \rho | \Upsilon_i \rangle = \sum_{ij} \langle \Upsilon_i | p_j |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j| \Upsilon_i \rangle = \sum_j \langle \Psi_j | p_j |\Psi_j \rangle = \sum_j p_j = \sum_j \rho_j$$

durch die Summenregel $\sum_j p_j = 1$ für Wahrscheinlichkeiten festgelegt.

$$\text{tr } \rho = 1 \quad (3.8)$$

3.2 Mischen von Gemischen

Stellen wir uns in Abbildung (1.1) zwei Quellen vor, die Gemische $\hat{\rho}$ und $\tilde{\rho}$ präparieren, und eine Anordnung, die beide Teilchenstrahlen kombiniert. Dies geschehe zufällig, so daß mit einer Wahrscheinlichkeit λ Teilchen aus dem ersten Strahl und mit der Restwahrscheinlichkeit $(1 - \lambda)$ Teilchen aus dem zweiten Strahl gewählt werden.

Beim Vermessen dieser Mischung von Gemischen tritt mit Wahrscheinlichkeit λ $\Lambda_i|\hat{\rho}\Lambda_i$ der Fall auf, daß der erste Strahl ausgewählt und \mathbf{a}_i gemessen wird, mit Wahrscheinlichkeit $(1 - \lambda)$ $\Lambda_i|\tilde{\rho}\Lambda_i$ der Fall, daß der zweite Strahl gewählt und \mathbf{a}_i gemessen wird.

Insgesamt wird mit Wahrscheinlichkeit

$$\lambda \Lambda_i|\hat{\rho}\Lambda_i + (1 - \lambda) \Lambda_i|\tilde{\rho}\Lambda_i = \Lambda_i|(\lambda\hat{\rho} + (1 - \lambda)\tilde{\rho})\Lambda_i \quad (3.9)$$

der Meßwert \mathbf{a}_i gemessen. Die Mischung beider Gemische führt zu Wahrscheinlichkeitsverteilungen, die zur Dichtematrix

$$\rho(\lambda) = \lambda\hat{\rho} + (1 - \lambda)\tilde{\rho} \quad (3.10)$$

gehört.

Wir werden sehen, daß beim Mischen die Unkenntnis über die zugrunde liegenden Zustände, die Entropie, und die Streuung von Meßwerten zunimmt.

Kapitel 4

Operatoren

4.1 Erwartungswerte

Die Formel (2.31) gibt die Wahrscheinlichkeitsverteilung für alle Meßwerte an. Sie enthält damit die vollständige Information über den Ausgang von Meßreihen. Oft ist man an weniger Information interessiert, zum Beispiel am Mittelwert der Meßwerte. Bei vielen Wahrscheinlichkeitsverteilungen ist der wahrscheinlichste Meßwert nahe beim Mittelwert und der Mittelwert daher der Meßwert, den man erwartet. Deshalb nennen ihn Physiker den Erwartungswert. Man sei jedoch gewarnt, daß es auch zweihöckerige Verteilungen gibt, zum Beispiel die Strahlauffächerung in einer Stern-Gerlach-Apparatur, bei denen Meßwerte in der Nähe des Mittelwertes unwahrscheinlich sind und der Erwartungswert nicht zu erwarten ist.

Der Mittelwert \bar{A} der Meßwerte des Apparates A ist die Summe der mit den Wahrscheinlichkeiten gewichteten Meßwerte

$$\bar{A} = \sum_i a_i w(a_i, \rho) = \sum_i a_i \langle \Lambda_i | \rho | \Lambda_i \rangle = \text{tr} \left(\sum_i a_i | \Lambda_i \rangle \langle \Lambda_i | \right) \rho. \quad (4.1)$$

Er ist also durch

$$\bar{A} = \text{tr} A \rho \quad (4.2)$$

gegeben, wobei A jetzt nicht nur den Meßapparat sondern auch den Operator

$$A = \sum_i a_i | \Lambda_i \rangle \langle \Lambda_i | \quad (4.3)$$

bezeichnet. Er ist für den Meßapparat charakteristisch, da sich aus ihm die Meßwerte und ihre Wahrscheinlichkeitsverteilung für alle Gemische ρ berechnen lassen. Zu jedem Meßapparat A gehört ein Operator A im Hilbertraum.

Allerdings ist enttäuschend, daß die Hersteller von Meßapparaten den Operator nicht der Gebrauchsanweisung beilegen.

Im Gegensatz zu weitverbreiteten Behauptungen entspricht das Anwenden des Operators auf den Zustand Ψ nicht der Messung des Zustands.

Die Notation $\langle A \rangle$ für den Mittelwert $\text{tr } A\rho$ stammt vom reinen Zustand (2.30). In diesem Fall gilt spezieller, wenn wir wieder ein normiertes Ψ verwenden,

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle. \quad (4.4)$$

Ohne am Sachverhalt etwas zu ändern, wird in der Bracket-Schreibweise noch ein „|“ eingefügt: $\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$. Man betont dadurch, daß es irrelevant ist, ob der Operator A auf das zweite oder das erste Argument des Skalarproduktes wirkt, denn A ist ein linearer, hermitescher (2.14) Operator

$$A = A^\dagger. \quad (4.5)$$

Man überzeugt sich leicht, daß die Projektionsoperatoren (2.20) hermitesch sind und daß reelle Linearkombinationen (4.3) von hermiteschen Operatoren wieder hermitesch sind.

Aus dem gleichen Grund ist die Dichtematrix ρ hermitesch.

$$\rho = \rho^\dagger \quad (4.6)$$

Aus (2.5) folgt unmittelbar, daß die Zustände Λ_i Eigenzustände des Operators A sind und daß die Eigenwerte die Meßwerte a_i sind.

$$A\Lambda_i = a_i\Lambda_i \quad (4.7)$$

So haben wir in (4.3) den Operator A aus den Meßwerten und Eigenzuständen konstruiert.

Umgekehrt lassen sich bei gegebenem Operator A aus der Eigenwertgleichung die Eigenvektoren bis auf einen komplexen Faktor, das heißt also die zugehörigen Strahlen im Hilbertraum, und die Meßwerte a_i bestimmen.

Die Eigenwerte a eines hermiteschen Operators $A = A^\dagger$ sind reell, wie sich aus $A\Lambda = a\Lambda$ und $\langle \Lambda | \Lambda \rangle = 0$ mit folgender Argumentationskette ergibt.

$$(a^* - a) \langle \Lambda | \Lambda \rangle = \langle a\Lambda | \Lambda \rangle - \langle \Lambda | a\Lambda \rangle = \langle A\Lambda | \Lambda \rangle - \langle \Lambda | A\Lambda \rangle = 0 \quad (4.8)$$

Die Eigenzustände zu verschiedenen Eigenwerte sind orthogonal zueinander.

$$(a_i - a_j) \langle \Lambda_i | \Lambda_j \rangle = \langle A\Lambda_i | \Lambda_j \rangle - \langle \Lambda_i | A\Lambda_j \rangle = 0, \quad a_i \neq a_j \Rightarrow \langle \Lambda_i | \Lambda_j \rangle = 0 \quad (4.9)$$

Unitäre Operatoren $U^\dagger = U^{-1}$ haben komplexe Eigenwerte vom Betrag 1. Denn unitäre Transformationen lassen Skalarprodukte invariant.

$$\langle U\Phi | U\Psi \rangle = \langle U^\dagger U\Phi | \Psi \rangle = \langle \Phi | \Psi \rangle \quad (4.10)$$

Demnach haben Ψ und $U\Psi$ gleiche Länge und $U\Psi = \lambda\Psi$, $\lambda \in \mathbb{C}$, ist nur möglich für $|\lambda| = 1$

$$U^\dagger = U^{-1} \text{ und } U\Psi = \lambda\Psi \Rightarrow \lambda = e^{i\alpha}, \quad \alpha \in \mathbb{R}. \quad (4.11)$$

Unitäre Operatoren U können als e^{iH} mit einem hermiteschen Operator $H = H^\dagger$ geschrieben werden.

4.2 unbeschränktes Spektrum

Die Menge der Eigenwerte eines Operators A – genauer das Komplement der komplexen Zahlenmenge $\lambda \in \mathbb{C}$, für die die Resolvente $(A - \lambda)^{-1}$ als Operator im ganzen Hilbertraum existiert – heißt Spektrum von A . Wenn das Spektrum nicht beschränkt ist, ist der lineare Operator nicht auf allen Vektoren Ψ definiert und mit einer beliebig kleinen Änderung eines Zustandes, auf dem A definiert ist, kann man eine beliebig große Änderung des Erwartungswertes bewirken.

Das ist aus dem Alltag bekannt: soll zum Beispiel die mittlere Studiendauer berechnet werden, so ändert ein einziger Student im vierzigsten Semester den Mittelwert drastisch. Man behilft sich bei Statistiken mit Zusatzargumenten, wie „Ein Student im vierzigsten Semester ist kein Student“ und läßt ihn einfach weg. Bei Messungen verfährt man oft genauso und läßt Ausreißer bei der Bestimmung von Mittelwerten weg.

Vornehm heißt dies Verfahren Regularisierung. Will man nur genügend gutartige Fragen untersuchen, zum Beispiel: „Begreifen die Studenten den Lehrstoff seit Einführung des neuen Studienplanes schneller?“ hängt die Antwort nicht vom Altstudenten und der Regularisierung ab und sie ist akzeptabel.

Die mathematischen Schwierigkeiten bei Operatoren mit unbeschränktem Spektrum zeigen sich schon beim Energieerwartungswert des harmonischen Oszillators. Die Energiewerte sind die Eigenwerte des Hamiltonoperators $H = \hbar\omega a^\dagger a$. Sie sind nichtnegative, ganzzahlige Vielfache von $\hbar\omega$

$$H|\Lambda_n\rangle = E_n|\Lambda_n\rangle, \quad E_n = n\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.12)$$

Wir unterstellen, daß die Λ_n normiert sind. Dann bilden sie eine Orthonormalbasis (2.5) und ein allgemeiner Vektor kann als Linearkombination

$|\Psi\rangle = \sum_n |\Lambda_n\rangle \psi_n$ mit quadratsummierbaren Komponenten ψ_n geschrieben werden.

Der Hamiltonoperator ist hermitesch und bildet Ψ auf $H\Psi$ mit Komponenten

$$|\Lambda_n|H\Psi\rangle = \hbar\omega_n |\Lambda_n| \Psi\rangle = \hbar\omega_n \psi_n \quad (4.13)$$

ab. Es lassen sich leicht quadratsummierbare Folgen angeben, zum Beispiel $\psi_n = 1/(n+1)$, so daß die Folge $n\psi_n$ nicht quadratsummierbar ist. Auf den zugehörigen Vektoren ist H nicht definiert. Wenn man solche Folgen bei großem n abbricht, und mit einem genügend kleinen Vorfaktor zu einem physikalischen Zustand hinzufügt, so sieht man, daß in jeder Umgebung jedes Zustandes ein weiterer Zustand existiert, dessen Energieerwartungswert jede vorgegebene Grenze überschreitet. Das ist zwar mathematisch störend aber physikalisch unwichtig: der hohe Energieerwartungswert rührt von sehr seltenen Messungen mit sehr hohen Energien her.

Zahmer als ein Meßoperator mit unbeschränktem Spektrum sind die Projektoren (2.20) auf die zugehörigen Eigenräume. Nur sie werden benötigt, um die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Meßwerte beim Vermessen eines Gemisches ρ anzugeben.

4.3 Unschärfe

Als nach dem Mittelwert nächstwichtige Größe charakterisiert in einem Gemisch ρ (3.2) die Schwankung der Meßwerte eines Apparats A , genauer der Erwartungswert der quadratischen Abweichung vom Mittelwert, die Wahrscheinlichkeitsverteilung.

$$(\Delta_\rho A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \sum_n p_n \langle \Psi_n | (A - \langle A \rangle)^2 | \Psi_n \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (4.14)$$

$\Delta_\rho A$ heißt die Unschärfe oder Schwankung von A im Gemisch ρ . Die Unschärfe hängt vom hermiteschen Operator A und vom Gemisch ρ ab.

Die Größe $(\Delta_\rho A)^2$ ist nichtnegativ, denn sie ist eine mit nichtnegativen Wahrscheinlichkeiten p_n gewichtete Summe von Längenquadraten.

$$\langle \Psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \Psi \rangle = \langle (A - \langle A \rangle) \Psi | (A - \langle A \rangle) \Psi \rangle = \langle (A - \langle A \rangle) \Psi |^2 \quad (4.15)$$

Sie verschwindet genau dann, wenn das Gemisch nur aus Eigenzuständen $|\Lambda_n\rangle$ zu einem festen Eigenwert $a = \langle A \rangle$ gemischt ist

$$0 = \sum_n p_n \langle \Lambda_n | (A - \langle A \rangle)^2 | \Lambda_n \rangle \Leftrightarrow (A - a) \Lambda_n = 0 \text{ oder } p_n = 0. \quad (4.16)$$

Die Summe $\sum_n p_n \left(c_A (A - \langle A \rangle) + i c_B (B - \langle B \rangle) \right) \Psi_n^2$ ist nicht negativ. Betrachtet man reelle Zahlen c_A und c_B und hermitesche Operatoren A und B , so ergibt sich aus dieser Bemerkung eine allgemeine untere Schranke für das Produkt $\Delta_\rho A \Delta_\rho B$ der Schwankungen von A und B im Gemisch ρ . Mit der Schreibweise

$$[A, B] = AB - BA \quad (4.17)$$

für den Kommutator von A mit B gilt

$$\begin{aligned} 0 &\leq \sum_n p_n \left(c_A (A - \langle A \rangle) + i c_B (B - \langle B \rangle) \right) \Psi_n^2 \\ &= \sum_n p_n \Psi_n \left(c_A^2 (A - \langle A \rangle)^2 + c_B^2 (B - \langle B \rangle)^2 + i c_A c_B [A, B] \right) \Psi_n \quad (4.18) \\ &= (c_A \Delta_\rho A + c_B \Delta_\rho B)^2 - c_A c_B \left(2 \Delta_\rho A \Delta_\rho B - i \sum_n p_n \Psi_n [A, B] \Psi_n \right). \end{aligned}$$

Wir werten diese Ungleichung für $c_A = -\Delta_\rho B$ und $c_B = \Delta_\rho A$ aus. Dann verschwindet der erste Term. Falls weder ΔA noch ΔB verschwindet, ist $-2c_A c_B > 0$ und wir erhalten die allgemeine Unschärferelation

$$\Delta_\rho A \Delta_\rho B \geq \frac{1}{2} | [A, B] |. \quad (4.19)$$

Wir dürfen Betragszeichen setzen, wenn wir dieselben Überlegungen mit B statt A und A statt B anstellen. Dabei behält die linke Seite der Ungleichung ihren Wert und der Kommutator $[A, B]$ wechselt sein Vorzeichen. Auch für $\Delta_\rho A = 0$ (oder $\Delta_\rho B = 0$) ist diese Ungleichung erfüllt, denn ρ ist dann aus Eigenzuständen zu A (oder B) zu einem Eigenwert a gemischt und der Erwartungswert eines Kommutators $[A, B]$ verschwindet in jedem Eigenzustand von A oder B .

$$[A, B] = \sum_n p_n \Psi_n [A, B] \Psi_n = \sum_n p_n \Psi_n (aB - Ba) \Psi_n = 0$$

Das Schwankungsquadrat nimmt beim Mischen nicht ab. Es ist

$$(\Delta_{\rho(\lambda)} A)^2 = \text{tr } \rho(\lambda) A^2 - (\text{tr } \rho(\lambda) A)^2 \quad \text{mit } \rho(\lambda) = \lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho} \quad (4.21)$$

ein Polynom in λ mit nichtpositiver zweiter Ableitung $-(\text{tr } \hat{\rho} A - \text{tr } \tilde{\rho} A)^2$ und demnach eine konvexe Funktion des Mischungsparameters

$$(\Delta_{\rho(\lambda)} A)^2 \leq \lambda (\Delta_{\hat{\rho}} A)^2 + (1 - \lambda) (\Delta_{\tilde{\rho}} A)^2. \quad (4.22)$$

Das Schwankungsquadrat einer Mischung von Gemischen ist mindestens die anteilige Summe der Schwankungsquadrate und stimmt mit der anteiligen Summe nur überein, wenn die Mittelwerte $\text{tr } \hat{\rho} A$ und $\text{tr } \tilde{\rho} A$ gleich sind.

4.4 Kommutator

Trotz der mathematischen Komplikationen, die mit der Verwendung unbeschränkter Operatoren zusammenhängen, formuliert man die Eigenschaften quantenmechanischer Systeme vorzugsweise anhand von Operatoren.

Mit der Sprechweise „der Operator A vertauscht mit Operator B “ bezeichnet man den Fall, daß $AB = BA$ gilt, das heißt, daß der Kommutator

$$[A, B] = AB - BA \quad (4.23)$$

verschwindet. Vertauschen A und B und sind sie diagonalisierbar, zum Beispiel weil sie hermitesch oder unitär sind, so können Eigenvektoren des Operators A auch als Eigenvektoren von B gewählt werden und umgekehrt, denn B bildet den Eigenraum \mathcal{E}_i von A zum Eigenwert α_i wieder auf \mathcal{E}_i ab

$$[A, B] = 0 \wedge (A - \alpha_i)\Lambda_i = 0 \Rightarrow (A - \alpha_i)(B\Lambda_i) = B(A - \alpha_i)\Lambda_i = 0 \quad (4.24)$$

und kann in diesem Unterraum diagonalisiert werden. Ist die Dimension d_i von \mathcal{E}_i größer als 1, so ist der Meßwert α_i entartet und es gibt linear unabhängige Eigenvektoren Λ_{ij} zu A und B

$$A\Lambda_{ij} = \alpha_i\Lambda_{ij} \quad B\Lambda_{ij} = b_{ij}\Lambda_{ij} \quad j = 1, \dots, d_i. \quad (4.25)$$

Es kann dann ein feinerer Meßapparat gebaut werden, der gleichzeitig A und B mißt, so daß die Teilstrahlen α_i in Abbildung (1.1) feiner in Teilstrahlen b_{ij} zerlegt werden.

Ist B in denselben Unterräumen entartet wie A , so ist $B = f(A)$. B ist dann kein wesentlich anderer Meßapparat. B verwendet nur eine andere Meßskala als A , etwa wie bei einem Volt- und Ampère-Meter.

Bezüglich Messungen, deren zugehörige Operatoren vertauschen, verhalten sich die quantenmechanischen Systeme wie klassische, statistische Systeme. Bezüglich solcher Messungen werden alle Zustände Ψ schon vollständig durch die Betragquadrate der Skalarprodukte $\langle \Lambda | \Psi \rangle$ mit den gemeinsamen Eigenzuständen Λ der kommutierenden Meßoperatoren charakterisiert, durch eine klassische Wahrscheinlichkeitsverteilung also. Erst Messungen, deren Operatoren nicht miteinander vertauschen, sind empfindlich auf die komplexen Phasen der Komponenten von Ψ .

Daher sind Kommutatorrelationen von grundlegender Bedeutung in der Quantenmechanik. Die wesentlichen algebraischen Eigenschaften des Kommutators sind Antisymmetrie, Linearität und Produktregel

$$[A, B] = -[B, A], \quad (4.26)$$

$$[A, \lambda_1 B + \lambda_2 C] = \lambda_1 [A, B] + \lambda_2 [A, C] \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}, \quad (4.27)$$

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]. \quad (4.28)$$

Wegen der Antisymmetrie und weil hermitesch Adjungieren die Reihenfolge vertauscht (2.15), ist der Kommutator hermitescher Operatoren antihermitesch. Wegen der Linearität und der Produktregel verhält sich die Operation „Kommutator nehmen mit einem Operator A “ so wie Ableiten. Bei diesem Ableiten bleibt die Reihenfolge der Faktoren unverändert. Aus der Regel für Produkte folgt die Produktregel für Kommutatoren, die Jacobi-Identität.

$$[A, [B, C]] = [[A, B], C] + [B, [A, C]] \quad (4.29)$$

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0 . \quad (4.30)$$

4.5 Erzeuger-Vernichter-Algebra

Algebraische Relationen strukturieren den Hilbertraum der Zustände. So kann zum Beispiel die Heisenbergsche Vertauschungsrelation eines hermiteschen Ortsoperators X mit dem zugehörigen hermiteschen Impulsoperator P

$$[X, P] = i\hbar \quad (4.31)$$

nicht in einem Hilbertraum mit endlicher Dimension n gelten, denn dann wäre die Spur $\text{tr}(XP - PX) = 0$ im Widerspruch zu $\text{tr}(i\hbar) = ni\hbar$.

Existieren für ein $x_0 \in \mathbb{R}$, $x_0 \neq 0$, die komplexen Linearkombinationen

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{X}{x_0} + \frac{i}{\hbar}x_0P\right), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{X}{x_0} - \frac{i}{\hbar}x_0P\right) \quad (4.32)$$

des Orts- und des Impulsoperators, so erfüllen sie die Erzeuger-Vernichter-Algebra

$$[a, a] = 0, \quad [a^\dagger, a^\dagger] = 0, \quad [a, a^\dagger] = 1, \quad (4.33)$$

und es existiert eine Orthonormalbasis

$$\Lambda_{n,\tau} = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \Lambda_{0,\tau}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.34)$$

auf denen die Operatoren a als Vernichter und a^\dagger als Erzeuger wirken

$$a\Lambda_{n,\tau} = \sqrt{n}\Lambda_{n-1,\tau}, \quad a^\dagger\Lambda_{n,\tau} = \sqrt{n+1}\Lambda_{n+1,\tau}. \quad (4.35)$$

Dies ergibt sich aus der Analyse des hermiteschen Operators $a^\dagger a$. Im Vorgriff auf spätere Ergebnisse nennen wir $a^\dagger a$ Anzahloperator und bezeichnen seine Eigenwerte mit n .

$$a^\dagger a \Lambda_n = n \Lambda_n. \quad (4.36)$$

Aus der Erzeuger-Vernichter-Algebra (4.33) folgt, daß der Kommutator mit $\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}$ die Operatoren \mathbf{a} und \mathbf{a}^\dagger auf ein Vielfaches von \mathbf{a} und \mathbf{a}^\dagger abbildet

$$[\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}, \mathbf{a}] = -\mathbf{a}, \quad [\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] = \mathbf{a}^\dagger. \quad (4.37)$$

Daher sind $\mathbf{a}\Lambda_n$ und $\mathbf{a}^\dagger\Lambda_n$ entweder Null oder Eigenzustände mit Eigenwerten $n - 1$ beziehungsweise $n + 1$.

$$\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} \mathbf{a} \Lambda_n = ([\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}, \mathbf{a}] + \mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}) \Lambda_n = (-1 + n) \mathbf{a} \Lambda_n \quad (4.38)$$

$$\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger \Lambda_n = ([\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] + \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}) \Lambda_n = (1 + n) \mathbf{a}^\dagger \Lambda_n \quad (4.39)$$

Da der Operator \mathbf{a} den Anzahleigenwert erniedrigt, heißt er Vernichter. Entsprechend ist \mathbf{a}^\dagger der Erzeugungsoperator. Ist Λ_n normiert, so ergeben sich die Normen von $\mathbf{a}\Lambda_n$ und $\mathbf{a}^\dagger\Lambda_n$ aus der Algebra und der Eigenwertgleichung

$$\langle \mathbf{a}\Lambda_n | \mathbf{a}\Lambda_n \rangle = \langle \Lambda_n | \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} \Lambda_n \rangle = n \quad (4.40)$$

$$\langle \mathbf{a}^\dagger \Lambda_n | \mathbf{a}^\dagger \Lambda_n \rangle = \langle \Lambda_n | \mathbf{a} \mathbf{a}^\dagger \Lambda_n \rangle = \langle \Lambda_n | ([\mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] + \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}) \Lambda_n \rangle = n + 1. \quad (4.41)$$

Diese Normen sind nicht negativ (2.4). Daher ist n nicht negativ. Wiederholtes Anwenden des Vernichter-Operators \mathbf{a} erniedrigt den Anzahleigenwert in ganzen Schritten und muß, bevor n negativ wird, einen Eigenzustand $\Lambda_0 = 0$ ergeben, der durch weiteres Anwenden von \mathbf{a} auf Null abgebildet wird

$$\mathbf{a}\Lambda_0 = 0. \quad (4.42)$$

Solch ein Zustand heißt Grundzustand. Er hat nach (4.40) Anzahleigenwert $n = 0$. Demnach ist jeder Anzahleigenwert n ganzzahlig und nicht negativ. Das Spektrum des Anzahloperators $\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}$ besteht aus den ganzen, nichtnegativen Zahlen

$$\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} \Lambda_n = n \Lambda_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots. \quad (4.43)$$

Man wählt im Raum aller Grundzustände eine Orthonormalbasis $\Lambda_{0,\tau}$ und betrachtet die Vektoren (4.34), die durch n -faches Anwenden des Erzeugungsoperators \mathbf{a}^\dagger aus dem Grundzustand erzeugt werden. Sie stimmen bis auf einen Faktor mit den Eigenzuständen überein, von denen man durch n -faches Absteigen die Grundzustände gewonnen hat, denn

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}^\dagger)^n \mathbf{a}^n \Lambda_n &= (\mathbf{a}^\dagger)^{n-1} (\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}) \mathbf{a}^{n-1} \Lambda_n = (\mathbf{a}^\dagger)^{n-1} (n - (n-1)) \mathbf{a}^{n-1} \Lambda_n = \\ &= 1 \cdot (\mathbf{a}^\dagger)^{n-2} (\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}) \mathbf{a}^{n-2} \Lambda_n = 1 \cdot 2 \cdot (\mathbf{a}^\dagger)^{n-3} (\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}) \mathbf{a}^{n-3} \Lambda_n = \dots = n! \Lambda_n. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Es sind also die Grundzustände genauso entartet wie die Eigenzustände zu jedem anderen Eigenwert des Anzahloperators.

4.6 Drehimpulsalgebra

Ein weiteres Beispiel für algebraische Relationen ist die Drehimpulsalgebra

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k, \quad i, j, k \in \{1, 2, 3\}. \quad (4.45)$$

Ein Vektorraum mit einem bilinearen Produkt $[A, B]$, das antisymmetrisch ist und die Jacobi-Identität (4.30) erfüllt, ist eine Lie-Algebra. Es sind also die Drehimpulsoperatoren Basiselemente einer Lie-Algebra, genauer der zur Drehgruppe in drei Dimensionen, der $SO(3)$, gehörigen Lie-Algebra.

Wenn die hermiteschen Drehimpulsoperatoren L_i existieren, so hat der Hilbertraum eine Orthonormalbasis $\Lambda_{l,m,\tau}$. τ ist ein Entartungsindex. $2l$ ist ganzzahlig nichtnegativ, l kann also Werte $0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ haben. Die Algebra legt nicht fest, welche dieser erlaubten l -Werte auftreten und wie sie entartet sind. Bei festem l treten die m -Werte $-l, -l+1, \dots, +l$ auf. Auf der Orthonormalbasis $\Lambda_{l,m,\tau}$ können die Drehimpulsoperatoren explizit angegeben werden.

$$L_3\Lambda_{l,m,\tau} = \hbar m\Lambda_{l,m,\tau} \quad (4.46)$$

$$(L_1 + iL_2)\Lambda_{l,m,\tau} = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\Lambda_{l,m+1,\tau} \quad (4.47)$$

$$(L_1 - iL_2)\Lambda_{l,m,\tau} = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\Lambda_{l,m-1,\tau} \quad (4.48)$$

Dies läßt sich folgendermaßen aus der Drehimpulsalgebra ableiten. Man rechnet nach, daß der Gesamtdrehimpuls $L^2 = (L_1^2 + L_2^2 + L_3^2)$ mit jedem der Drehimpulsoperatoren L_1 , L_2 und L_3 vertauscht. Denn Drehimpulsoperatoren erzeugen Drehungen und lassen Längenquadrate von Vektoren, wie $x^2 + y^2 + z^2$ oder L^2 , invariant.

$$[L_i, L^2] = 0 \quad (4.49)$$

Die Drehimpulsoperatoren bilden daher (4.24) Drehimpulsmultipletts, das heißt Unterräume \mathcal{U}_l von Eigenzuständen von L^2 mit Eigenwert $\hbar^2 l(l+1)$, auf sich ab. Man kann also gemeinsame Eigenzustände Λ_{lm} zu L^2 und L_3 finden

$$L^2\Lambda_{lm} = \hbar^2 l(l+1)\Lambda_{lm}, \quad L_3\Lambda_{lm} = \hbar m\Lambda_{lm}. \quad (4.50)$$

Die Bezeichnung für den Eigenwert von L^2 ist im Vorgriff auf spätere Ergebnisse gewählt.

Aus der Drehimpulsalgebra (4.45) folgt, daß die komplexen Linearkombinationen L_+ und $L_- = (L_+)^{\dagger}$

$$L_+ = L_1 + iL_2, \quad L_- = L_1 - iL_2 \quad (4.51)$$

durch den Kommutator mit L_3 auf ein Vielfaches von L_+ beziehungsweise L_- abgebildet werden und daß ihr Kommutator $2\hbar L_3$ ergibt

$$[L_3, L_+] = +\hbar L_+, \quad [L_3, L_-] = -\hbar L_-, \quad [L_+, L_-] = 2\hbar L_3. \quad (4.52)$$

Daher sind $L_+\Lambda_{lm}$ und $L_-\Lambda_{lm}$ entweder Null oder L_3 -Eigenzustände zum Eigenwert $\hbar(m+1)$ beziehungsweise $\hbar(m-1)$

$$L_3 L_+ \Lambda_{lm} = ([L_3, L_+] + L_+ L_3) \Lambda_{lm} = \hbar(1+m) L_+ \Lambda_{lm} \quad (4.53)$$

$$L_3 L_- \Lambda_{lm} = ([L_3, L_-] + L_- L_3) \Lambda_{lm} = \hbar(-1+m) L_- \Lambda_{lm}. \quad (4.54)$$

Da L_+ und L_- die L_3 -Eigenwerte mit konstanter Schrittweite erhöhen und erniedrigen, heißen sie auch Leiteroperatoren. Hat Λ_{lm} Einheitslänge, so folgt die Norm von $L_+\Lambda_{lm}$ und $L_-\Lambda_{lm}$ aus

$$L^2 = L_+ L_- + L_3^2 - \hbar L_3 = L_- L_+ + L_3^2 + \hbar L_3. \quad (4.55)$$

$$\begin{aligned} L_+ \Lambda_{lm} | L_+ \Lambda_{lm} &= \Lambda_{lm} | L_- L_+ \Lambda_{lm} = \Lambda_{lm} | (L^2 - L_3^2 - \hbar L_3) \Lambda_{lm} = \\ &= \Lambda_{lm} | \hbar^2(l(l+1) - m(m+1)) \Lambda_{lm} = \hbar^2(l(l+1) - m(m+1)) \end{aligned} \quad (4.56)$$

$$L_- \Lambda_{lm} | L_- \Lambda_{lm} = \hbar^2(l(l+1) - m(m-1)). \quad (4.57)$$

Diese Normen sind nicht negativ (2.4), daher ist bei gegebenem l die Quantenzahl m nach unten und oben beschränkt.

Auf den Eigenzustand $\Lambda_{lm_{\max}}$ mit höchstem L_3 -Eigenwert angewendet, muß L_+ verschwinden und demnach gilt $l(l+1) - m_{\max}(m_{\max}+1) = 0$. Ebenso muß $l(l+1) - m_{\min}(m_{\min}-1)$ Null sein. Daher gelten die quadratischen Gleichungen

$$(m_{\max} + \frac{1}{2})^2 = (m_{\min} - \frac{1}{2})^2 = l(l+1) + \frac{1}{4} = (l + \frac{1}{2})^2. \quad (4.58)$$

Wir wählen $l + \frac{1}{2}$ positiv. Wegen $m_{\max} + \frac{1}{2} > m_{\min} - \frac{1}{2}$ ist dann

$$m_{\max} = l, \quad m_{\min} = -l \quad (4.59)$$

die eindeutige Lösung. Da man durch wiederholtes Anwenden von L_+ auf den Zustand mit minimalem L_3 -Eigenwert die m -Quantenzahl in ganzen Schritten erhöht bis man zum Zustand mit $m_{\max} = l$ gelangt, muß die Differenz $m_{\max} - m_{\min} = 2l$ ganzzahlig und nicht negativ sein. Es ist also $l \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \dots\}$ ganz- oder halbzahlig. Die Drehimpulsoperatoren wirken in einem $2l+1$ -dimensionalen Raum, dem Drehimpulsmultiplett mit Gesamtdrehimpuls l , der von Basiszuständen Λ_{lm} mit $m = -l, -l+1, \dots, +l$ aufgespannt wird.

Für $l = 1/2$ wirken die Drehimpulsoperatoren, die Spin-1/2-Operatoren S_1, S_2 , und S_3 , in einem zweidimensionalen Raum auf den Spinoren des Spin-1/2-Multipletts mit Basiszuständen $\Lambda_{l,m}$ mit $l = 1/2$ und $m = \pm 1/2$. In dieser Basis sind die Spinoperatoren wegen (4.46), (4.47) und (4.48) durch das $\hbar/2$ -fache der Pauli-Matrizen σ_1, σ_2 und σ_3 gegeben

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.60)$$

$$S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i, \quad i = \{1, 2, 3\}. \quad (4.61)$$

Die Pauli-Matrizen erfüllen die algebraischen Relationen

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k. \quad (4.62)$$

Drehimpulsoperatoren erzeugen Drehungen von Zuständen. Zeigt die Drehachse in Richtung des Einheitsvektors \vec{e} , dann gehört zu einer Drehung um den Winkel α der unitäre Operator

$$U(\vec{e}, \alpha) = \exp\left(-\frac{i\alpha}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{e}\right). \quad (4.63)$$

Für Spin-1/2 läßt sich die zu (4.63) gehörige Matrix leicht angeben, weil die e-Reihe wegen $(i \vec{\sigma} \cdot \vec{e})^2 = -\mathbb{1}$ (4.62) wie bei der Euler-Formel $e^{-i\alpha} = \cos \alpha - i \sin \alpha$ summiert werden kann.

$$U_{1/2}(\vec{e}, \alpha) = \exp\left(-\frac{i\alpha}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{e}\right) = \mathbb{1} \cos \alpha/2 - i \vec{e} \cdot \vec{\sigma} \sin \alpha/2 \quad (4.64)$$

Eine Drehung um $\alpha = 2\pi$ führt einen Spin-1/2-Spinor in sein negatives über $U_{1/2}(\vec{e}, 2\pi) = -1$.

4.7 Messung eines Spin-1/2-Gemisches

Für Systeme mit zwei Basiszuständen Λ_1, Λ_2 lassen sich alle Messungen an allen Zuständen mit wenigen Parametern charakterisieren. Prominentes Beispiel für Zweizustandssysteme sind Spin-1/2-Teilchen, die mit Stern-Gerlach-Apparaten untersucht werden, es kann sich aber auch zum Beispiel um Atome handeln, bei denen aufgrund der experimentellen Anordnung nur zwei der vielen Energiezustände berücksichtigt werden müssen.

In einer Stern-Gerlach-Apparatur wird ein Strahl von Spin-1/2 Teilchen wie in Abbildung (1.1) in zwei Teilstrahlen ($n = 2$) aufgespalten. Die Intensität des oberen Teilstrahls, bezogen auf die Intensität des einfallenden

Strahls ist die Wahrscheinlichkeit, mit der der Spin in Analyserichtung der Stern-Gerlach-Apparatur nach oben steht. Uns interessiert, wie bei gegebenem Strahl ρ diese Intensität von der Analyserichtung abhängt.

Die Dichtematrix ρ , die das zu messende Zweizustandssystem charakterisiert, wird in jeder Orthonormalbasis durch eine hermitesche Matrix mit Spur 1 charakterisiert. Hermitesche $n \times n$ -Matrizen bilden einen reellen, n^2 -dimensionalen Vektorraum, das heißt in unserem Fall, daß man jede hermitesche 2×2 -Matrix als reelle Linearkombination von 4 Basismatrizen schreiben kann. Als Basismatrizen bieten sich die $\mathbb{1}$ -Matrix und die spurfreien, hermiteschen Pauli-Matrizen (4.60) an. Wegen der Normierungsbedingung $\text{tr } \rho = 1$ ist der Koeffizient bei der $\mathbb{1}$ -Matrix $1/2$ und die allgemeinste Dichtematrix eines Zweizustandssystems hat die Form

$$\rho = \frac{1}{2} \mathbb{1} + a\sigma_1 + b\sigma_2 + c\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1/2 + c & a - ib \\ a + ib & 1/2 - c \end{pmatrix} \quad a, b, c \in \mathbb{R}. \quad (4.65)$$

Wir können diese Matrix noch durch Wahl der Basisvektoren des Zweizustandssystems vereinfachen. Wählen wir als Basis die Eigenvektoren von ρ , so wird die zu ρ gehörige Matrix diagonal. Sie ist also einfacher

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 + c & 0 \\ 0 & 1/2 - c \end{pmatrix}. \quad (4.66)$$

Wählen wir spezieller als ersten Eigenvektor denjenigen, der zum größeren Eigenwert von ρ gehört, so ist c nichtnegativ. Zudem ist das Hauptdiagonalelement $1/2 - c$ nichtnegativ (3.5). Die Dichtematrix ρ ist also durch die Basis und den Eigenwert $\rho_1 = 1/2 + c$, $0 \leq c \leq 1/2$, charakterisiert.

An den Meßapparaten, mit denen wir dieses Gemisch vermessen wollen, sind für uns die zwei Meßwerte a_1 und a_2 unwichtig: Der Apparat ändert sich nicht wesentlich, wenn wir eine andere Meßskala unterlegen. Wichtig ist die Wahrscheinlichkeit, mit der der erste Meßwert angezeigt wird. Um sie zu berechnen, brauchen wir gemäß (3.1) den ersten, normierten Eigenzustand Λ des Meßapparates A . Wir schreiben seine Komponenten als Betrag mal Phase. Die Betragsquadrate müssen sich wegen $\langle \Lambda | \Lambda \rangle = 1$ zu Eins summieren, die Beträge sind daher Sinus und Kosinus eines Winkels $\theta/2$. Eine gemeinsame Phase der Komponenten ist irrelevant¹, die relative Phase der zwei Komponenten teilen wir hälftig auf.

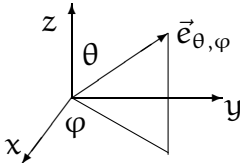
$$\Lambda = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2)e^{-i\varphi/2} \\ \sin(\theta/2)e^{+i\varphi/2} \end{pmatrix} \quad (4.67)$$

¹Es gibt keine Wahl der Phasen, so daß die Komponenten stetig, 2π -periodisch in φ und für $\theta = 0$ und $\theta = \pi$ von φ unabhängig sind. Sie können also nicht als auf der Kugeloberfläche stetige Funktion gewählt werden. Das Problem betrifft die Phasen der Vektoren. Die zugehörigen Hilbertraumstrahlen variieren stetig auf der Kugeloberfläche.

Die Winkel θ und φ haben geometrische Bedeutung. Der Zustand Λ (4.67) ist Eigenzustand zum Meßwert $\hbar/2$ des Spin-1/2-Operators

$$S_{\theta,\varphi} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (\sigma_x e_x + \sigma_y e_y + \sigma_z e_z) , \quad (4.68)$$

der den Spin in Richtung von $\vec{e}(\theta, \varphi)$ mißt.

$$\vec{e}(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (4.69)$$


Der Vektor $\vec{e}(\theta, \varphi)$ schließt mit der z -Achse den Winkel θ und seine Projektion in die x - y -Ebene schließt mit der x -Achse den Winkel φ ein.

Das Hauptdiagonalelement $\Lambda|\rho\Lambda$ gibt nach (3.1) die Wahrscheinlichkeit $w(\uparrow_{\theta,\varphi})$ an, mit der bei Messung des Spins in Richtung $\vec{e}(\theta, \varphi)$ der Spin nach oben steht. Mit (4.66) und (4.67) berechnet man

$$w(\uparrow_{\theta,\varphi}) = 1/2 + c \cos \theta . \quad (4.70)$$

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung hängt nicht vom Winkel φ ab. Sie ist invariant unter Drehungen um die z -Achse.

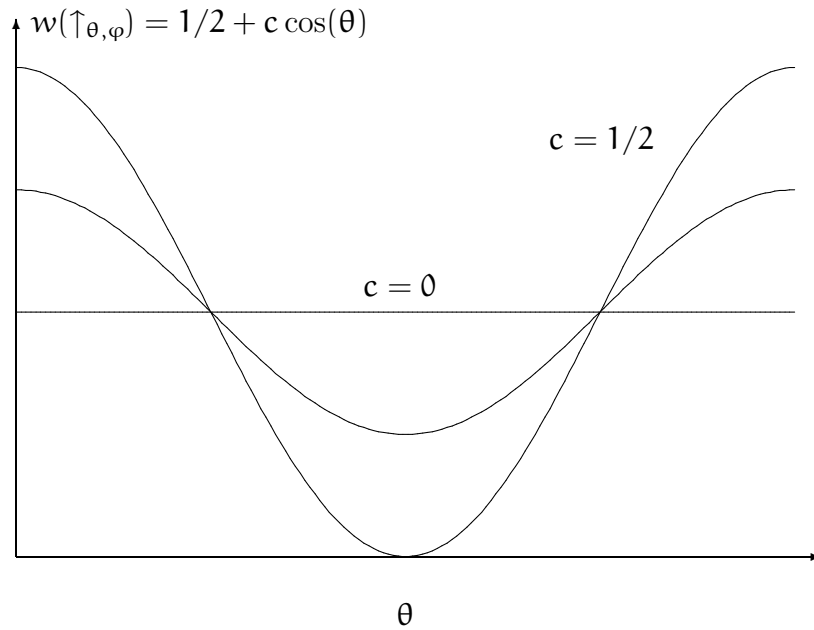


Abbildung 4.1: Strahlaufspaltung bei Spin 1/2

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung ist in Abbildung (4.1) für $c = 0$, $c = 1/2$ und einen mittleren Wert von c als Funktion von θ dargestellt. θ ist der Winkel, den die Richtung, in die der Stern-Gerlach-Apparat den Strahl aufspaltet, mit der z -Achse bildet.

Die Wahl der Eigenvektoren von ρ als Basis für die Spinzustände erweist sich als Wahl der z -Richtung. Die z -Achse ist diejenige Richtung, in der bei Spin-Messung im Gemisch ρ am meisten Teilchen Spin nach oben haben.

Die Darstellung im Winkelbereich $0 \leq \theta \leq 2\pi$ ist redundant. Der Winkel θ zur z -Achse durchläuft nur Werte $0 \leq \theta \leq \pi$ und bezeichnet für Werte $\pi < \theta \leq 2\pi$ Winkel $\theta' = 2\pi - \theta$. Für Abbildung (4.1) ist aber der Winkelbereich $0 \leq \theta \leq 2\pi$ gewählt worden, um klar zu machen, daß die Meßwerte an einem Spin-1/2-System nach Drehung um 2π wieder in sich über gehen.

Spin-1/2-Spinoren (4.67) gehen durch eine Drehung um 2π in ihr negatives über (4.64). Nehmen wir beispielsweise den Eigenzustand $\Lambda_{\theta,\varphi} = \Lambda_{\frac{\pi}{2},0}$, dessen Spin bei Messung in x -Richtung nach oben steht und drehen ihn um die z -Achse um 2π , so wächst der Winkel φ von 0 auf 2π an und $\Lambda_{\frac{\pi}{2},0}$ geht in sein Negatives über.

$$\Lambda_{\frac{\pi}{2},0} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{2\pi} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} = -\Lambda_{\frac{\pi}{2},0} \quad (4.71)$$

Das bedeutet nicht, daß nach der Drehung der Spin in x -Richtung nach unten zeigt $-\Lambda_{\frac{\pi}{2},0} = \Lambda_{\frac{\pi}{2},\pi}$. Das negative Vorzeichen ist nur eine unmeßbare Phase. Es ist der Strahl im Hilbertraum, das heißt der Vektor Ψ bis auf einen nicht-verschwindenden Faktor, der dem physikalischen Zustand entspricht. Dieser Strahl im Hilbertraum geht durch Drehung um 2π in sich über. Das negative Vorzeichen kann man nur als relative Phase messen, wenn man einen Spin-1/2-Zustand teilt, etwa in einem Doppelspalt, einen Anteil um 2π dreht und die Änderung der Phase relativ zum zweiten Anteil in einem Interferenzbild nachweist.

Für $c = 1/2$ beschreibt ρ ein Gemisch, bei dem der Spin mit Sicherheit nach oben steht, wenn der Spin in z -Richtung ($\theta = 0$) gemessen wird. Es ist nämlich für $c = 1/2$ die Wahrscheinlichkeit $w(\uparrow_{\theta=0,\varphi}) = 1$ und das Gemisch ρ ein reiner Zustand und zwar der Eigenzustand mit Spin nach oben bei Spin-Messung in z -Richtung.

$$\rho|_{c=1/2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.72)$$

Nicht immer ist so einfach zu sehen, ob die Dichtematrix $\rho = \sum_j p_j |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j|$ vom Rang 1 ist und sich durch einen Term schreiben läßt. In solch einem

Fall ist ein $p_j = 1$, die anderen Terme verschwinden und $\rho = \rho_{\text{rein}}$ ist ein Projektor $\rho_{\text{rein}}^2 = \rho_{\text{rein}}$. Wegen $\text{tr } \rho = 1$ gilt dann auch

$$\text{tr } \rho_{\text{rein}}^2 = 1 . \quad (4.73)$$

Wertet man die Spur in der Eigenbasis von ρ aus, so erkennt man, daß diese Gleichung auch hinreichend dafür ist, daß ρ ein reiner Zustand ist. Es ist nämlich die Spur gleich der Summe über die Eigenwerte von ρ , die zwischen 0 und 1 liegen und sich zu 1 summieren. Daher summieren sich ihre Quadrate dann und nur dann zu 1, wenn ein Eigenwert 1 und die anderen 0 sind.

Der Unterschied zwischen dem Maximalwert w_{max} und dem Minimalwert w_{min} von $w(\uparrow_{\theta,\varphi})$ bezogen auf den Maximalwert ist die Polarisierung P des Strahls von Spin-1/2-Teilchen.

$$P = \frac{w_{\text{max}} - w_{\text{min}}}{w_{\text{max}}} \quad (4.74)$$

Für den reinen Zustand ($c = 1/2$) beträgt die Polarisierung 100 %. Für $c = 0$ ist der Strahl total unpolarisiert und jede Spin-Messung spaltet unabhängig von der Richtung den Strahl hälftig auf.

4.8 Störungstheorie

Wir untersuchen diskrete Eigenwerte und normierbare Eigenzustände einer differenzierbaren Schar $H(\lambda)$ von hermiteschen Operatoren. Kennt man das Spektrum für zum Beispiel $\lambda = 0$, so kann man mit Reihenentwicklung versuchen, das Spektrum und die Eigenzustände für benachbarte Werte von λ zu nähern.

$$(H(\lambda) - E_n(\lambda)) \Psi_n(\lambda) = 0 \quad (4.75)$$

Wir unterstellen, daß der Operator $H(\lambda)$, seine Eigenwerte $E_n(\lambda)$ und seine Eigenzustände $\Psi_n(\lambda)$ differenzierbar von λ abhängen.

Alle Ergebnisse der stationären Störungstheorie folgen aus (4.75) durch Differenzieren nach λ mit der folgenden Einschränkung, daß die Eigenwertgleichung den zugehörigen Eigenvektor $\Psi_n(\lambda) \neq 0$ nicht festlegt, sondern daß auch alle komplexe Vielfache von $\Psi_n(\lambda)$ die Gleichung lösen. Um die Normierung und die Phase von $\Psi_n(\lambda)$ festzulegen, verlangen wir

$$\langle \Psi_m(\lambda) | \Psi_n(\lambda) \rangle = \delta_{m,n}^m \quad (4.76)$$

$$\langle \Psi_m(\lambda) | \frac{d}{d\lambda} \Psi_n(\lambda) \rangle \Big|_{\lambda=0} = 0 . \quad (4.77)$$

Die Bedingung (4.76) ist für $E_n = E_m$ erfüllt, weil Eigenvektoren eines hermiteschen Operators zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal sind (4.9).

In jedem Unterraum, in dem ein Eigenwert entartet ist, kann eine Orthonormalbasis gewählt und (4.76) erfüllt werden.

Differenzieren von (4.76) für $n = m$ ergibt, daß $\Psi_n(\lambda)|\frac{d}{d\lambda}\Psi_n(\lambda) = i f(\lambda)$ imaginär ist. Durch Phasenwahl

$$\tilde{\Psi}_n(\lambda) = e^{i\alpha}\Psi_n(\lambda) \quad \alpha(\lambda) = - \int^\lambda d\lambda' f(\lambda') \quad (4.78)$$

kann man die Gleichung (4.77) mit $\tilde{\Psi}_n$ erfüllen. Wir unterstellen, daß die Gleichungen (4.76) und (4.77) ohne Redefinition der Phasen schon gelten.

Differenzieren von (4.75) nach λ ergibt

$$\left(\frac{d}{d\lambda}H - \frac{d}{d\lambda}E_n\right)\Psi_n + (H - E_n)\frac{d}{d\lambda}\Psi_n = 0. \quad (4.79)$$

Das Skalarprodukt mit Ψ_n führt auf $\Psi_n|(\frac{d}{d\lambda}H - \frac{d}{d\lambda}E_n)\Psi_n = 0$, also

$$\frac{d}{d\lambda}E_n = \Psi_n|(\frac{d}{d\lambda}H)\Psi_n. \quad (4.80)$$

Das Skalarprodukt mit Ψ_m , $m \neq n$, ergibt

$$\Psi_m|(\frac{d}{d\lambda}H)\Psi_n + (E_m - E_n)\Psi_m|\frac{d}{d\lambda}\Psi_n = 0. \quad (4.81)$$

Ist ein Eigenwert E entartet, gilt also $E_{m_1} = E_{m_2} = \dots = E_{m_k} = E$ für einen Wert von λ für einige orthonormale Zustände Ψ_{m_i} , die einen k -dimensionalen Unterraum aufspannen, so können diese Zustände nur dann differenzierbar vom Störparameter abhängen, wenn der Störoperator $(\frac{d}{d\lambda}H)$ keine Übergänge zwischen diesen Zuständen macht, wenn also gilt

$$\Psi_{m_i}|(\frac{d}{d\lambda}H)\Psi_{m_j} = 0 \text{ für } E_{m_i} = E_{m_j} \text{ und } m_i \neq m_j. \quad (4.82)$$

Im Unterraum, in dem ein Eigenwert entartet ist, muß also die Orthonormalbasis so gewählt werden, daß der auf den Unterraum eingeschränkte Störoperator $\frac{d}{d\lambda}H$ diagonal ist.

Durch (4.81), (4.82) und durch (4.77) sind die Skalarprodukte von $\frac{d}{d\lambda}\Psi_n$ mit allen Basisvektoren Ψ_m festgelegt. Daher gilt

$$\frac{d}{d\lambda}\Psi_n = - \sum_{m: E_m \neq E_n} \Psi_m \frac{\Psi_m|(\frac{d}{d\lambda}H)\Psi_n}{E_m - E_n}. \quad (4.83)$$

Die Koeffizienten von $\frac{d}{d\lambda}\Psi_n$ sind quadratsummierbar, wenn der Vektor Ψ_n differenzierbar von λ abhängt,

$$\sum_{m: E_m \neq E_n} \left| \frac{\Psi_m|(\frac{d}{d\lambda}H)\Psi_n}{E_m - E_n} \right|^2 < \infty \quad (4.84)$$

Die Gleichungen (4.80) und (4.83) sind ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem für E_n und Ψ_n , aus dem man algebraisch durch wiederholtes Differenzieren alle höheren Ableitungen und dadurch die Potenzreihenentwicklung in λ bestimmen kann.

Hängt der Hamiltonoperator $H(\lambda)$ linear von λ ab, so ist die zweite Ableitung der Grundzustandsenergie $E_0(\lambda)$ negativ und sie wird in zweiter Ordnung abgesenkt, die Grundzustandsenergie ist dann eine konvexe Funktion des Störparameters.

$$\frac{d^2 E_0}{d\lambda^2} = -2 \sum_{m: E_m > E_0} \frac{|\Psi_m| \frac{dH}{d\lambda} \Psi_0|^2}{E_m - E_0} < 0 \quad (4.85)$$

In relativistischen Theorien will man für jeden Wert der Kopplungskonstante einen Poincaré-invarianten Grundzustand haben. Es soll identisch in der Kopplung λ die Gleichung $H(\lambda)\Psi_0 = 0$ gelten. Dann kann nicht einfach H linear von λ abhängen, denn sonst wäre die Grundzustandsenergie eine konvexe Funktion von λ .

Betrachten wir den Spin-Operator $S_{\theta, \varphi}$ für $\theta = \frac{\pi}{2}$ als Funktion von φ und durchlaufen wir mit φ einen Kreis, so geht der Operator wieder in sich über

$$S_{\frac{\pi}{2}, 0} = S_{\frac{\pi}{2}, 2\pi} . \quad (4.86)$$

Der zugehörige Eigenzustand mit Spin nach oben, dessen Phase und Normierung durch (4.77) und (4.76) festgelegt ist, geht nur bis auf eine Phase, allgemeiner bei Operatoren mit entarteten Zuständen bis auf eine unitäre Transformation, in sich über

$$\Psi_{\frac{\pi}{2}, 0} = e^{i\pi} \Psi_{\frac{\pi}{2}, 2\pi} . \quad (4.87)$$

Kapitel 5

kontinuierliches Spektrum

5.1 Wellenfunktion

Viele Meßapparate, insbesondere die Orts- oder Impulsmessung, haben ein Kontinuum möglicher Meßwerte, die eventuell gemeinsam mit diskreten Meßwerten, wir nennen sie im folgenden Spin, gemessen werden können. In der Eigenbasis der zur Messung gehörigen, miteinander kommutierenden Operatoren wird Ψ durch die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\psi_i(\mathbf{x})$ angegeben für kontinuierliche, reelle Meßwerte \mathbf{x} und für diskrete Meßwerte \mathbf{a}_i , $i \in I$, die durch eine Indexmenge I abgezählt werden. Der Zustand Ψ ist durch eine Abbildung der Menge der gemeinsam meßbaren, reellen Meßwerte $\mathbb{D} \subset (I \times \mathbb{R}^n)$ in die komplexen Zahlen \mathbb{C} gegeben.

$$\Psi : (i, \mathbf{x}) \rightarrow \psi_i(\mathbf{x}) \quad (5.1)$$

Gehört \mathbf{x} zur Ortsmessung, so heißen die Funktionen $\psi_i(\mathbf{x})$ die Ortswellenfunktionen.

Das Betragsquadrat $|\psi_i(\mathbf{x})|^2$ ist eine Wahrscheinlichkeitsdichte. Das heißt: Die Wahrscheinlichkeit, daß der Meßwert \mathbf{x} in einem Bereich Δ liegt und daß die Spinmessung den Wert \mathbf{a}_i ergibt, ist

$$w(\mathbf{a}_i, \Delta, \Psi) = \int_{\Delta} d^n \mathbf{x} |\psi_i(\mathbf{x})|^2. \quad (5.2)$$

Für Meßintervalle Δ , die den Wert \mathbf{x} enthalten und so klein sind, daß die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_i(\mathbf{x})|^2$ in ihnen fast konstant ist, können wir das Integral nähern. Bezeichnen wir die Größe des Meßintervalls mit $d^n \mathbf{x}$, so erhalten wir

$$w(\mathbf{a}_i, \Delta, \Psi) \approx |\psi_i(\mathbf{x})|^2 d^n \mathbf{x}. \quad (5.3)$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß der Meßwert bei \mathbf{x} in einem kleinen Bereich liegt und daß der Spin den Wert α_i hat, ist das Betragsquadrat der Wellenfunktion $|\psi_i(\mathbf{x})|^2$ multipliziert mit der Größe $d^n\mathbf{x}$ des Bereichs.

Da Wahrscheinlichkeiten dimensionslos sind, haben Wellenfunktionen die Dimension

$$\dim(\psi_i(\mathbf{x})) = \left(\dim(d^n\mathbf{x})\right)^{-1/2}. \quad (5.4)$$

Umfaßt das Meßintervall Δ die Menge aller möglichen kontinuierlichen Meßwerte und summiert man über alle möglichen Spinwerte, so impliziert die Summenregel für Wahrscheinlichkeiten, daß Ψ normiert ist.

$$\sum_i \int d^n\mathbf{x} |\psi_i(\mathbf{x})|^2 = 1 \quad (5.5)$$

Hieraus liest man das Skalarprodukt ab.

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \sum_i \int d^n\mathbf{x} \phi_i^*(\mathbf{x}) \psi_i(\mathbf{x}) \quad (5.6)$$

Genau genommen wird nur über alle mögliche Meßwerte $(i, \mathbf{x}) \in \mathbb{D} \times \mathbb{I} \subset \mathbb{R}^n$ integriert. Wir können diese Einschränkung leicht berücksichtigen, indem wir uns auf den Hilbertraum der quadratintegrablen Funktionen beschränken, die außerhalb von \mathbb{D} verschwinden.

Angewendet auf Wellenfunktionen ergeben die zu den kontinuierlichen Meßwerten gehörigen Operatoren X^l , $l \in \{1, 2, \dots, n\}$, die Wahrscheinlichkeitsamplitude multipliziert mit dem Meßwert

$$X^l : \Psi \rightarrow X^l \Psi \quad X^l \Psi : (i, \mathbf{x}) \rightarrow x^l \psi_i(\mathbf{x}). \quad (5.7)$$

Funktionen $f(X)$ der Operatoren X^l , zum Beispiel $e^{ik \cdot X}$, wirken durch Multiplikation mit $f(\mathbf{x})$

$$f(X) : \Psi \rightarrow f(X) \Psi \quad f(X) \Psi : (i, \mathbf{x}) \rightarrow f(\mathbf{x}) \psi_i(\mathbf{x}). \quad (5.8)$$

Die Operatoren X^l sind nur auf Zuständen Ψ definiert, deren zugehörige Wellenfunktionen $\psi_i(\mathbf{x})$ nach Multiplikation mit x^l quadratintegrabel bleibt. Die Operatoren $e^{ik \cdot X}$ sind für alle $k \in \mathbb{R}^n$ im ganzen Hilbertraum definiert.

5.2 Transformationen des Ortes

Der Begriff Ortswellenfunktion überträgt sich zwanglos auf Mannigfaltigkeiten. Gleichung (5.3) gibt die Wahrscheinlichkeit an, das Teilchen mit Spinquantenzahl α_i im Bereich der Punkte zu finden, die zum Koordinatenintervall Δ gehören. Dieser Sachverhalt ist unabhängig vom verwendeten Koordinatensystem, wenn unter allgemeinen Koordinatentransformationen der Orte

$\chi'(\chi)$ die Wellenfunktion wie eine Halbdichte transformiert

$$\psi'_i(\chi') = \left| \det \frac{\partial \chi}{\partial \chi'} \right|^{\frac{1}{2}} \psi_i(\chi(\chi')) . \quad (5.9)$$

Dies definiert die zu invertierbaren Selbstabbildungen $T : \chi \rightarrow \chi' = T(\chi)$ der Mannigfaltigkeit gehörigen unitären Transformationen $U(T)$ von Zuständen. Bezeichnen wir mit dT die Jacobi-Matrix der partiellen Ableitungen

$$(dT)^k_l = \frac{\partial \chi'^k}{\partial \chi^l} \quad (5.10)$$

so schreiben sie sich mit $\Psi' = U(T)\Psi$ in (5.9) als

$$U(T)\Psi = |\det dT|^{-\frac{1}{2}} \Psi \cdot T^{-1} \quad (5.11)$$

Die Operatoren $U(T)$ sind linear und unitär. Linearität in Ψ ist offensichtlich. Unitarität besagt, daß Skalarprodukte invariant bleiben. Sie ergibt sich aus der Definition von $U(T)$ und dem Integralsubstitutionssatz

$$\begin{aligned} \langle U\Phi | U\Psi \rangle &= \sum_i \int d^n \chi' (U\Phi)_i^*(\chi') (U\Psi)_i(\chi') \\ &= \sum_i \int d^n \chi' \left| \det \frac{\partial \chi}{\partial \chi'} \right| \phi_i^*(\chi(\chi')) \psi_i(\chi(\chi')) = \sum_i \int d^n \chi \phi_i^*(\chi) \psi_i(\chi) = \langle \Phi | \Psi \rangle . \end{aligned} \quad (5.12)$$

Invertierbare Selbstabbildungen T der Mannigfaltigkeit bilden eine Gruppe mit Hintereinanderausführen der Transformationen als Gruppenmultiplikation und der identischen Abbildung als Einselement. Die unitären Transformationen (5.11) sind eine Darstellung dieser Gruppe im Hilbertraum, das heißt, sie sind lineare Transformationen des Hilbertraumes und genügen dem Multiplikationsgesetz

$$U(T_2)U(T_1) = U(T_2 \cdot T_1) , \quad (5.13)$$

das hintereinander ausgeführte Transformationen verknüpft.

Verwenden wir die Kettenregel

$$(dT_2 \cdot dT_1)^k_l = \frac{\partial \chi''^k}{\partial \chi'^m} \frac{\partial \chi'^m}{\partial \chi^l} = \frac{\partial \chi''^k}{\partial \chi^l} = (d(T_2 \cdot T_1))^k_l \quad (5.14)$$

so folgt die Darstellungseigenschaft aus

$$\begin{aligned} U(T_2)U(T_1)\Psi &= |\det dT_2|^{-\frac{1}{2}} (U(T_1)\Psi) \cdot T_2^{-1} \\ &= |\det dT_2|^{-\frac{1}{2}} |\det dT_1|^{-\frac{1}{2}} \Psi \cdot T_1^{-1} \cdot T_2^{-1} \\ &= |\det dT_2 \cdot dT_1|^{-\frac{1}{2}} \Psi \cdot (T_2 \cdot T_1)^{-1} \\ &= |\det d(T_2 \cdot T_1)|^{-\frac{1}{2}} \Psi \cdot (T_2 \cdot T_1)^{-1} = U(T_2 \cdot T_1)\Psi . \end{aligned} \quad (5.15)$$

Wir betrachten eine einparametrische, kontinuierliche Gruppe T_α von Transformationen, zum Beispiel Drehungen oder Translationen, die so parametrisiert sei, daß $T_{\alpha+\beta} = T_\alpha T_\beta$ gilt. Dann gehört $\alpha = 0$ zur identischen Abbildung $T_0 = \text{id}$ und es gilt $(T_\alpha)^{-1} = T_{-\alpha}$. Variiert α , so durchläuft $T_\alpha x = x'(\alpha, x)$ für jedes festgehaltene x als Funktion von α eine Kurve mit Tangentialvektoren

$$\frac{d(T_\alpha x)^m}{d\alpha} = \xi^m(T_\alpha(x)) . \quad (5.16)$$

Die Tangentialvektoren an diese Kurven definieren ein Vektorfeld, das wegen $T_{\alpha+\varepsilon}(x) - T_\alpha(x) = T_\alpha \cdot (T_\varepsilon(x) - T_0(x)) = (T_\varepsilon - T_0) \cdot T_\alpha(x)$ von α und x nur über $T_\alpha(x)$ abhängt. Bei x kann es demnach durch Differenzieren für $\alpha = 0$ bestimmt werden oder durch Differenzieren und anschließende Transformation mit $T_{-\alpha}$.

$$\xi^m(x) = \frac{d(T_\alpha x)^m}{d\alpha} \Big|_{\alpha=0} = \frac{d(T_\alpha x)^m}{d\alpha} \Big|_{T_{-\alpha} \circ T_\alpha x} \quad (5.17)$$

Das Vektorfeld $\xi^m(x)$ heißt infinitesimale Transformation des Ortes. Die Lösung $x(\alpha)$ des zugehörigen Differentialgleichungssystem

$$\frac{dx^m}{d\alpha} = \xi^m(x(\alpha)) \quad (5.18)$$

definiert T_α als Abbildung der Anfangswerte $x(0)$ auf $x(\alpha)$.

$$T_\alpha(x(0)) = x(\alpha) \quad (5.19)$$

Differenzieren wir das Transformationsgesetz (5.11) für eine einparametrische, kontinuierliche Gruppe T_α bei $\alpha = 0$ oder entwickeln wir $x'^m = x^m + \alpha \xi^m$ und $U(T_\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha N}$ nach α , so erhalten wir die infinitesimale Form

$$-\frac{i}{\hbar} (N\Psi)_i(x) = -\frac{1}{2} (\partial_{x^m} \xi^m) \psi_i(x) - \xi^m \partial_m \psi_i(x) . \quad (5.20)$$

Dabei bezeichnet $N = i\hbar U^{-1} \partial_\alpha U$ den hermiteschen Operator, der die unitäre Transformation $U(T_\alpha)$ erzeugt

$$U(T_\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha N} . \quad (5.21)$$

Er ist hermitesch, wie sich aus der Unitaritätsbedingung $U^\dagger = U^{-1}$ ergibt. Die Ableitung von $|\det dT_\alpha|^{-\frac{1}{2}}$ steuert in (5.20) den Term $-\frac{1}{2} (\partial_{x^m} \xi^m)$ bei, denn die Determinante $\det dT_\alpha$ hat die Entwicklung (D.5)

$$\det \frac{\partial x'^m}{\partial x^n} = 1 + \alpha \partial_{x^m} \xi^m + O(\alpha^2) . \quad (5.22)$$

Auf Mannigfaltigkeiten büßen die Komponenten X^k des Ortsoperators ihre Bedeutung ein, denn Koordinaten x dienen nur der Bezeichnung der Orte, ihr Wert ist irrelevant. Auf dem Kreis zum Beispiel existiert kein hermitescher Ortsoperator: spinlose Zustände auf einem Kreis mit Umfang l sind Strahlen im Hilbertraum der l -periodische Ortswellenfunktionen $\psi(x) = \psi(x + l)$, die im Intervall $0 \leq x \leq l$ quadratintegrabel sind. Es ist aber $x\psi(x)$ nicht periodisch. X ist kein Operator im Hilbertraum der Wellenfunktionen auf dem Kreis.

Daß X auf dem Kreis nicht existiert, ist die Auflösung des Rätsels, warum für einen normierten Impulseigenzustand auf dem Kreis $\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{l}} e^{i \frac{2\pi x}{l} n}$ mit Impuls $p = \frac{2\pi\hbar}{l} n$ der Erwartungswert von $[X, P] \stackrel{?}{=} i\hbar$ je nach Rechnung einmal $i\hbar$ und ein andermal 0 ist.

$$i\hbar \langle \Psi | \Psi \rangle \stackrel{?}{=} \langle \Psi | [X, P] \Psi \rangle = \langle \Psi | (XP - PX) \Psi \rangle = \langle \Psi | (Xp - pX) \Psi \rangle = 0$$

Untersucht man dieselben Rechenschritte statt auf dem Kreis auf der reellen Achse, so existieren zwar die hermiteschen Operatoren X und P , nicht aber ein normierter Eigenzustand zu P oder X .

Ortsmessungen auf dem Kreis messen Winkel und gehören zu einem unitären Operator

$$U : \Psi \rightarrow U\Psi, \quad U\Psi : x \rightarrow e^{i \frac{2\pi}{l} x} \psi(x), \quad (5.24)$$

aus dessen Eigenwerten $e^{i\lambda}$ sich der Ort $x = \frac{\lambda l}{2\pi}$ bis auf Vielfache von l ablesen läßt.

Zu einem periodischen Potential $V(x + l) = V(x)$ gehört der Operator $V\Psi(x) = V(x)\psi(x)$. Das Potential läßt sich als Fourierreihe $V(x) = \sum_n c_n e^{i n \frac{2\pi}{l} x}$ und der Operator daher als Reihe in U darstellen

$$V = \sum_n c_n U^n. \quad (5.25)$$

5.3 Translationen und Impuls

Die Forderung, daß Translationen $T_a : x \rightarrow T_a x = x + a$ definiert werden können, und daß keine Translation außer $T_0 = \text{id}$ einen Punkt fest läßt, legt die möglichen Meßwerte von Ortsmessungen fest $\mathbb{D} = I \subset \mathbb{R}^n$, wobei n die Dimension des Raumes ist.

Translationen bilden gemäß (5.11) auf natürliche Art Zustände Ψ unitär auf verschobene Zustände $U(T_a)\Psi$ ab. Es ist $\det(dT_a) = 1$ und die transformierten Wellenfunktionen haben an der Stelle $T_a x = x + a$ denselben Wert

wie ψ_i am Urbild \mathbf{x} .

$$(\mathbf{U}(\mathbf{T}_\alpha)\Psi)_i(\mathbf{x}) = \psi_i(\mathbf{x} - \alpha) \quad (5.26)$$

Die infinitesimale Form (5.20) dieser Transformation erhalten wir, wenn wir die einparametrischen Transformationen $\mathbf{T}_{\alpha \cdot \mathbf{a}}$ bei $\alpha = 0$ differenzieren. Das erzeugende Vektorfeld $\xi^k = \mathbf{a}^k$ ist \mathbf{x} -unabhängig und daher divergenzfrei $\partial_{x^k} \xi^k = 0$. Die rechte Seite von (5.20) ist also einfach $-\mathbf{a}^k \partial_k \psi_i(\mathbf{x})$. Demnach ist der Operator \mathbf{N} , der die unitäre Transformation $\mathbf{U}(\mathbf{T}_\alpha)$ erzeugt, linear in \mathbf{a}^k : $\mathbf{N} = \mathbf{P}_k \mathbf{a}^k$. Dabei sind die erzeugenden Operatoren \mathbf{P}_k , die zu Translationen in Koordinatenrichtung x^k gehören, definitionsgemäß die zu den Koordinaten gehörigen Impulse \mathbf{P}_k . Koeffizientenvergleich bei den Parametern \mathbf{a}^k in (5.20) ergibt, daß der Impulsoperator die Ortswellenfunktion differenziert.

$$(\mathbf{P}_k \Psi)_i(\mathbf{x}) = -i\hbar \partial_{x^k} \psi_i(\mathbf{x}) \quad (5.27)$$

Die Operatoren \mathbf{P}_k erzeugen die unitäre Transformation $\mathbf{U}(\mathbf{T}_\alpha)$ (5.26), die zu endlichen Translationen gehört.

$$\mathbf{U}(\mathbf{T}_\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot \alpha} \quad (5.28)$$

Der Impulsoperator ist auf Vektoren im Hilbertraum definiert, die zu differenzierbaren Wellenfunktionen mit quadratintegrabler Ableitung gehören. Die Operatoren $\mathbf{U}(\mathbf{T}_\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{P} \cdot \alpha}$ sind für alle $\alpha \in \mathbb{R}^n$ im ganzen Hilbertraum definiert, wenn \mathbb{D} Translationen zuläßt.

Auf Vektoren, die mehrfaches Anwenden von Ortsoperator und Impulsoperator gestatten, vertauschen wegen $x^k x^l = x^l x^k$ und $\partial_{x^k} \partial_{x^l} = \partial_{x^l} \partial_{x^k}$ die Komponenten des Ortsoperators und ebenso die Komponenten des Impulsoperators. Orts- und Impulsoperator erfüllen wegen

$$((X^k P_l - P_l X^k) \Psi)_i(\mathbf{x}) = -i\hbar x^k \partial_{x^l} \psi_i(\mathbf{x}) + i\hbar \partial_{x^l} (x^k \psi_i(\mathbf{x})) = (i\hbar \delta_l^k \Psi)_i(\mathbf{x})$$

die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen

$$[X^k, X^l] = 0, \quad [P_k, P_l] = 0, \quad [X^k, P_l] = i\hbar \delta_l^k. \quad (5.30)$$

Daher können die Ortsunschärfe ΔX^k und die Impulsunschärfe ΔP_k in derselben Richtung nicht durch Präparation des Zustandes gleichzeitig klein gemacht werden, denn aus der allgemeinen Unschärferelation (4.19) und der Heisenbergschen Vertauschungsrelation folgt die Heisenbergsche Unschärferelation

$$\Delta X^k \Delta P_l \geq \frac{\hbar}{2} \delta_l^k. \quad (5.31)$$

Es kann durchaus in zwei Richtungen durch eine Lochblende der Ort und senkrecht dazu in der dritten Richtung der Impuls scharf gemacht werden. So präpariert man Teilchenstrahlen. Engt man die Lochblende ein, so macht sich der unscharfe Impuls in diesen zwei Richtungen als Beugung an der Lochblende bemerkbar.

5.4 Drehungen und Bahndrehimpuls

Drehungen sind lineare Transformationen des Orts $\mathbf{D} : \mathbf{x} \rightarrow \mathbf{D}\mathbf{x}$, die alle Längenquadrate invariant lassen.

$$\sum_k (\mathbf{D}^k_l \mathbf{x}^l)^2 = \mathbf{D}^k_l \mathbf{D}^k_m \mathbf{x}^l \mathbf{x}^m = \mathbf{x}^k \mathbf{x}^k \quad \mathbf{x} \Leftrightarrow \mathbf{D}^k_l \mathbf{D}^k_m = \delta_{lm} \quad (5.32)$$

Die zugehörigen Matrizen \mathbf{D} erfüllen also die Orthogonalitätsrelation

$$\mathbf{D}^T = \mathbf{D}^{-1} . \quad (5.33)$$

Sie bilden die Gruppe $O(n)$ der orthogonalen Transformationen des \mathbb{R}^n . Hierbei und im folgenden gestatten wir uns den unter Physikern verbreiteten, bequemen Sprachgebrauch und unterscheiden nicht ausdrücklich zwischen den Transformationen und den zugehörigen Matrizen.

Aus (5.33) folgt $\det \mathbf{D} = (\det \mathbf{D})^{-1}$, also $\det \mathbf{D} = \pm 1$. Orthogonale Transformationen, deren Determinante den speziellen Wert 1 hat, bilden die Untergruppe $SO(n)$ der speziellen orthogonalen Transformationen.

Jede einparametrische Untergruppe von Drehungen ist eine Schar von Matrizen $\mathbf{D}_\alpha = e^{\alpha\omega}$ mit erzeugender Matrix ω , die wegen $\mathbf{D}_\alpha^{-1} = e^{-\alpha\omega} = \mathbf{D}_\alpha^T = e^{\alpha\omega^T}$ (5.33) antisymmetrisch ist.

$$(\omega)^k_l = -(\omega)^l_k \quad (5.34)$$

In $n=3$ Raumdimensionen ist die Matrix ω daher eine Linearkombination von drei antisymmetrischen Basismatrizen τ_m , deren Matrixelemente wir mit dem ε -Tensor schreiben

$$\omega^k_l = \varphi^m \varepsilon_{kml} , \quad (\tau_m)^k_l = \varepsilon_{kml} . \quad (5.35)$$

Ist $\vec{\varphi} = \vec{e}$ ein Einheitsvektor, so ist α der Drehwinkel, denn $\mathbf{D}_\alpha = e^{\alpha\omega}$ hat folgende Eigenschaften: ω wirkt auf jeden Vektor \vec{v} wie ein Kreuzprodukt $\omega\vec{v} = \vec{e} \times \vec{v}$. Daher verschwindet $\omega\vec{e}$ und \vec{e} markiert die Drehachse $\mathbf{D}_\alpha\vec{e} = \vec{e}$. Ein zu \vec{e} senkrechter Einheitsvektor \vec{n}_1 wird durch ω auf den auf beiden senkrecht stehenden Einheitsvektor \vec{n}_2 abgebildet.

$$\omega\vec{n}_1 = \vec{n}_2 , \quad \omega\vec{n}_2 = -\vec{n}_1 . \quad (5.36)$$

Wendet man die Reihe $e^{\alpha\omega}$ auf \vec{n}_1 und \vec{n}_2 an und trennt man die geraden und ungeraden Potenzen von ω , so erhält man die Kosinus- und Sinusreihe

$$e^{\alpha\omega}\vec{n}_1 = \vec{n}_1 \cos \alpha + \vec{n}_2 \sin \alpha, \quad e^{\alpha\omega}\vec{n}_2 = -\vec{n}_1 \sin \alpha + \vec{n}_2 \cos \alpha. \quad (5.37)$$

Insbesondere führt eine Drehung um 2π zur Ausgangslage zurück.

Das zur Transformation $x' = D_\alpha x$ gehörige Vektorfeld $\xi(x) = \partial_\alpha D_\alpha x|_{\alpha=0}$ ist $\xi^k = \omega^k_l x^l = (\vec{\omega} \cdot \vec{x})^k$. Das Vektorfeld ist divergenzfrei $\partial_{x^k} \xi^k = \delta^k_l \omega^l_k = 0$ und die infinitesimale Transformation (5.20) der Wellenfunktion ist

$$-\frac{i}{\hbar}(N\Psi)_i(x) = -\omega^k_l x^l \partial_{x^k} \psi(x) = -\varphi^m \varepsilon_{kml} x^l \partial_{x^k} \psi(x). \quad (5.38)$$

Die rechte Seite ist linear in φ^m , daher ist der Operator N linear in φ^m und von der Form $N = L_m \varphi^m$. Definitionsgemäß sind die hier auftretenden Operatoren L_m die Komponenten des Bahndrehimpulses: sie erzeugen Drehungen um die Koordinatenachsen, $\vec{L} \cdot \vec{e}$ erzeugt Drehungen um \vec{e} . Der Koeffizientenvergleich von φ^m ergibt

$$(L_m \Psi)_i(x) = -i\hbar \varepsilon_{mkl} x^k \partial_{x^l} \psi_i(x), \quad L_m = \varepsilon_{mkl} X^k P_l. \quad (5.39)$$

Mit der Heisenbergalgebra (5.30) folgt, daß die Komponenten des Bahndrehimpulses die Drehimpulsalgebra (4.45) erfüllen.

$$\begin{aligned} [L_i, L_j] &= \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} [X^k P_l, X^m P_n] \\ &= \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} ([X^k, X^m P_n] P_l + X^k [P_l, X^m P_n]) \\ &= i\hbar \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} (X^m \delta_n^k P_l - X^k \delta_l^m P_n) \\ &= i\hbar (\varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmk} - \varepsilon_{imk} \varepsilon_{jkl}) X^m P_l \\ &= i\hbar (\delta_{im} \delta_{lj} - \delta_{ij} \delta_{lm} + \delta_{ij} \delta_{ml} - \delta_{il} \delta_{mj}) X^m P_l \\ &= i\hbar \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{lmn} X^m P_n = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k. \end{aligned} \quad (5.40)$$

Die endliche, unitäre Transformation, die zu einer Drehung um den Winkel α um die Drehachse \vec{e} gehört, ist

$$(U(\vec{e}, \alpha)\Psi)_i(x) = (\exp(-\frac{i\alpha}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{e}) \Psi)_i(x) = \psi_i(D_{\vec{e}, \alpha}^{-1}(x)). \quad (5.41)$$

Drehungen um $\alpha = 2\pi$ bilden Orte auf sich ab $D_{\vec{e}, 2\pi}^{-1} x = x$. Für Bahndrehimpulse (5.39) gilt daher einschränkend $U(\vec{e}, 2\pi) = \exp(-\frac{2\pi i}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{e}) = \mathbb{1}$. Angewendet auf L_3 -Eigenzustände heißt dies für Drehungen um die z -Achse $\exp(-2\pi i m) = 1$. Daher können die m -Quantenzahlen des Bahndrehimpulses und in der Folge auch seine l -Quantenzahlen nur ganzzahlige Werte haben.

5.5 kontinuierliche Basis

Führen wir geeignet verallgemeinerte Basiselemente $\Lambda_{i,x}$ ein, so können wir Zustände Ψ mit den Ortswellenfunktionen als Entwicklungskoeffizienten schreiben.

$$\Psi = \sum_i \int d^n x \Lambda_{i,x} \psi_i(x) \quad (5.42)$$

Das Skalarprodukt (5.62) mit einem ebenso zerlegten Vektor Φ legt die Skalarprodukte der Basiselemente fest.

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} \int d^n x d^n x' \phi_i^*(x) \cdot \Lambda_{i,x} | \Lambda_{j,x'} \cdot \psi_j(x') &= \sum_i \int d^n x \phi_i^*(x) \psi_i(x) \cdot \Phi, \Psi \\ \Leftrightarrow \quad \Lambda_{i,x} | \Lambda_{j,x'} &= \delta^n(x - x') \delta_j^i \end{aligned} \quad (5.43)$$

Man liest hieraus ab, daß $\Lambda_{i,x}$ keine endliche Länge hat und kein Vektor im Hilbertraum ist, sondern daß $\Lambda_{i,x}$ eine Distribution ist. Erst das Integral (5.42) mit den quadratintegrablen Wellenfunktionen $\psi_i(x)$ ergibt einen Vektor im Hilbertraum. Verallgemeinerte Basiselemente, deren Skalarprodukte wie in (5.43) durch δ -Funktionen gegeben sind, nennt man kontinuumsnormiert.

Die Ortswellenfunktionen $\psi_i(x)$ sind wegen (5.43) die Skalarprodukte von Ψ mit der Ortsbasis

$$\psi_i(x) = \Lambda_{i,x} | \Psi \quad (5.44)$$

Insbesondere sind die Ortswellenfunktionen der Basiselemente $\Lambda_{j,x'}$ Deltafunktionen $\delta^n(x - x') \delta_j^i$. Die Basiselemente sind verallgemeinerte Eigenvektoren des Ortsoperators

$$X^k \Lambda_{j,x'} = x'^k \Lambda_{j,x'} \quad (5.45)$$

Setzen wir in (5.42) ein, so ergibt sich in Bracket-Schreibweise

$$| \Psi \rangle = \sum_i \int d^n x | \Lambda_{i,x} \rangle \Lambda_{i,x} | \Psi \rangle \quad (5.46)$$

Es läßt sich also analog zu (2.19) mit den Basiselementen $\Lambda_{i,x}$ die Eins kontinuierlich zerlegen.

$$\mathbb{1} = \sum_i \int d^n x | \Lambda_{i,x} \rangle \langle \Lambda_{i,x} | \quad (5.47)$$

Die verallgemeinerten Eigenzustände $\Gamma_{j,p}$ des Impulsoperators

$$P_k \Gamma_{j,p} = p_k \Gamma_{j,p} \quad (5.48)$$

zu den Eigenwerten \mathbf{p}_k , $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$, bilden wie die Ortszustände $\Lambda_{i,k}$ eine kontinuierliche Basis. Ihre Ortswellenfunktionen $(\Gamma_{j,p})_i(\mathbf{x}) = \langle \Lambda_{i,x} | \Gamma_{j,p} \rangle$ sind Lösungen der Eigenwertgleichung

$$-i\hbar \partial_{\mathbf{x}^k} (\Gamma_{j,p})_i(\mathbf{x}) = p_k (\Gamma_{j,p})_i(\mathbf{x}) \quad (5.49)$$

und daher, nach geeigneter Wahl von Normierungsfaktoren c_j^i , durch

$$\langle \Lambda_{i,x} | \Gamma_{j,p} \rangle = (\Gamma_{j,p})_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n}} \delta_j^i e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \quad (5.50)$$

gegeben. Wie man mit

$$\int \frac{d^n \mathbf{x}}{(2\pi)^n} e^{-i\mathbf{x} \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{y}')} = \delta^n(\mathbf{y} - \mathbf{y}') \quad (5.51)$$

sieht, sind die Basiselemente $\Gamma_{j,p}$ kontinuierlich normiert

$$\langle \Gamma_{i,p} | \Gamma_{j,p'} \rangle = \delta^n(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta_j^i \quad (5.52)$$

und bilden eine kontinuierliche Basis, mit der man die Eins zerlegen kann.

$$\mathbb{1} = \sum_i \int d^n \mathbf{p} |\Gamma_{i,p}\rangle \langle \Gamma_{i,p}| \quad (5.53)$$

Analog zur Ortswellenfunktion definiert man die Impulswellenfunktion¹ eines Zustandes Ψ als Skalarprodukt mit der kontinuierlichen Basis von Impulseigenzuständen

$$\tilde{\psi}_j(\mathbf{p}) = \langle \Gamma_{j,p} | \Psi \rangle = \sum_i \int d^n \mathbf{x} \langle \Gamma_{p,j} | \Lambda_{i,x} \rangle \langle \Lambda_{i,x} | \Psi \rangle. \quad (5.54)$$

Die Impulswellenfunktion ist also die Fouriertransformierte der Ortswellenfunktion und, bis auf ein Vorzeichen, umgekehrt

$$\tilde{\psi}_i(\mathbf{p}) = \int d^n \mathbf{x} \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n}} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \psi_i(\mathbf{x}), \quad \psi_i(\mathbf{x}) = \int d^n \mathbf{p} \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \tilde{\psi}_i(\mathbf{p}). \quad (5.55)$$

Wir können also einen Zustand Ψ statt durch die Ortswellenfunktionen $\psi_i(\mathbf{x})$ durch die Impulswellenfunktionen $\tilde{\psi}_i(\mathbf{p})$ darstellen und daraus, wenn wir wollen, die Ortswellenfunktion rekonstruieren.

¹ Zur Unterscheidung von Ortswellenfunktionen markieren wir Impulswellenfunktionen durch „ $\tilde{}$ “.

Zu $P_k \Psi$ gehört wegen $\Gamma_{j,p} |P_k \Psi\rangle = p_k \Gamma_{j,p} |\Psi\rangle$ die Impulswellenfunktion $p_k \tilde{\psi}_j(p)$. Zu $X^k \Psi$ gehören die Impulswellenfunktionen $i\hbar \partial_{p_k} \tilde{\psi}_j(p)$

$$\begin{aligned} \Gamma_{j,p} |X^k \Psi\rangle &= \sum_i \int d^n x \Gamma_{j,p} |\Lambda_{i,x}\rangle \Lambda_{i,x} |X^k \Psi\rangle \\ &= \int \frac{d^n x}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n}} e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot x} x^k \psi_j(x) = i\hbar \partial_{p_k} \tilde{\psi}_j(p), \\ (P_k \Psi)^\sim_i(p) &= p_k \tilde{\psi}_i(p), \quad (X^k \Psi)^\sim_i(p) = i\hbar \partial_{p_k} \tilde{\psi}_i(p). \end{aligned} \quad (5.56)$$

Das Betragsquadrat der Impulswellenfunktion ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für Impulsmessungen. Die Wahrscheinlichkeit, den Impuls im Intervall Δ zu finden und den diskreten Meßwert a_i zu messen, ist

$$w(a_i, \Delta, \Psi) = \int_{\Delta} d^n p |\tilde{\psi}_i(p)|^2. \quad (5.57)$$

Der Bahndrehimpuls $\vec{L} = \vec{X} \times \vec{P}$ dreht die Argumente der Impulswellenfunktion $\tilde{\psi}_i(p)$ genauso wie die Ortsargumente der Ortswellenfunktion (5.41).

$$(L_m \Psi)^\sim_i(p) = -i\hbar \varepsilon_{mkl} p^k \frac{\partial}{\partial p^l} \tilde{\psi}_i(p) \quad (5.58)$$

$$(U(\vec{\varepsilon}, \alpha) \Psi)^\sim_i(p) = \left(\exp\left(-\frac{i\alpha}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{\varepsilon}\right) \tilde{\Psi} \right)^\sim_i(p) = \tilde{\psi}_i(D_{\vec{\varepsilon}, \alpha}^{-1}(p)). \quad (5.59)$$

5.6 Mehrteilchenzustände

Die Berücksichtigung mehrerer kontinuierlicher Meßwerte, wie etwa die sechs Ortskoordinaten eines Zweiteilchensystems, und die Berücksichtigung zusätzlicher diskreter Meßwerte, wie zum Beispiel der Spins der beiden Teilchen, ist offensichtlich. Solch ein Zweiteilchenzustand Ψ ordnet sechs kontinuierlichen Meßwerten und zwei diskreten Quantenzahlen eine Wahrscheinlichkeitsamplitude zu

$$\Psi : (i, \vec{x}, j, \vec{y}) \rightarrow \psi_{ij}(\vec{x}, \vec{y}) \quad (5.60)$$

und wird durch Wellenfunktionen $\psi_{ij}(\vec{x}, \vec{y})$ angegeben. Dabei ist

$$w(i, \vec{x}, j, \vec{y}, d^3x, d^3y, \Psi) = |\psi_{ij}(\vec{x}, \vec{y})|^2 d^3x d^3y \quad (5.61)$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, das erste Teilchen mit Spin i bei \vec{x} im Bereich d^3x und das zweite Teilchen mit Spin j bei \vec{y} im Bereich d^3y zu messen. Aus der Wahrscheinlichkeitsformel liest man das Skalarprodukt ab

$$\Phi | \Psi \rangle = \sum_{ij} \int d^3x d^3y \phi_{ij}^*(\vec{x}, \vec{y}) \psi_{ij}(\vec{x}, \vec{y}). \quad (5.62)$$

Es handelt sich um identische Teilchen, wenn für alle Zweiteilchenzustände die Wahrscheinlichkeit, das erste Teilchen bei \vec{x} mit Spin i und das zweite Teilchen bei \vec{y} mit Spin j zu messen, mit derjenigen übereinstimmt, das erste Teilchen bei \vec{y} mit Spin j und das zweite Teilchen bei \vec{x} mit Spin i zu messen, wenn also für alle Zustände der zwei identischen Teilchen die Wellenfunktion $\psi_{ji}(\vec{y}, \vec{x})$ mit $\psi_{ij}(\vec{x}, \vec{y})$ bis auf eine Phase übereinstimmt. Ist diese Phase 1, heißen die Teilchen Bosonen, ist sie -1 heißen sie Fermionen. Genauer gesagt sind bei n -Teilchenzuständen identischer Bosonen die Wellenfunktionen invariant unter jeder Permutation $\pi: (1, \dots, n) \rightarrow (\pi(1), \dots, \pi(n))$.

$$(\psi_{\text{Boson}})_{i_1, \dots, i_n} (x_1, \dots, x_n) = (\psi_{\text{Boson}})_{i_{\pi(1)}, \dots, i_{\pi(n)}} (x_{\pi(1)}, \dots, x_{\pi(n)}) \quad (5.63)$$

Unter ungeraden Permutationen $\text{sign}(\pi) = -1$ gehen n -Teilchen-Wellenfunktionen identischer Fermionen in ihr Negatives über.

$$(\psi_{\text{Fermion}})_{i_1, \dots, i_n} (x_1, \dots, x_n) = \text{sign}(\pi) (\psi_{\text{Fermion}})_{i_{\pi(1)}, \dots, i_{\pi(n)}} (x_{\pi(1)}, \dots, x_{\pi(n)}) \quad (5.64)$$

Als Konsequenz unterliegen Fermionen dem Pauli-Verbot, daß Mehrfermionenzustände nicht ein Produkt gleicher Einteilchenzustände enthalten können oder, umgangssprachlich, daß nicht zwei Fermionen in demselben Zustand sein können. Es kann aber zum Beispiel die Grundzustandswellenfunktion der zwei Elektronen im Heliumatom ein Produkt derselben Ortswellenfunktion χ sein, weil sie in der Spinquantenzahl antisymmetrisch ist

$$\psi_{ij}(\vec{x}, \vec{y}) = \varepsilon_{ij} \chi(\vec{x}) \chi(\vec{y}), \quad \varepsilon_{ij} = -\varepsilon_{ji}, \quad \varepsilon_{\uparrow\downarrow} = 1, \quad i, j \in \{\uparrow, \downarrow\}. \quad (5.65)$$

Slater-Determinanten sind total antisymmetrische n -Teilchenzustände. Sie entstehen aus einem Produkt (7.1) von orthonormierten Einteilchenzuständen χ_i , das antisymmetrisiert wird.

$$\begin{aligned} \Psi_n &= \frac{1}{n!} \sum_{\pi} \text{sign}(\pi) \chi_{\pi(1)} \cdot \chi_{\pi(2)} \cdot \dots \cdot \chi_{\pi(n)} \\ &= \frac{1}{n!} \varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_n} \chi_{i_1} \cdot \chi_{i_2} \cdot \dots \cdot \chi_{i_n} \end{aligned} \quad (5.66)$$

Das Pauli-Verbot und die Tatsache, daß Elektronen Spin $1/2$ haben, machen die Grundzüge des Periodensystem der Elemente verständlich, wenn man das Wasserstoffatom verstanden hat, und sind grundlegend für die Chemie. Ebenso wird die Festkörperphysik vom Pauli-Verbot beherrscht zum Beispiel mit der Folge, daß im Grundzustand Elektronen alle Einteilchenzustände bis zur Fermikante besetzen.

Fermionen haben halbzahligen Spin, Bosonen haben ganzzahligen Spin. Dies ist zunächst ein experimenteller Befund. Als Spin-Statistik-Theorem

folgt dieser Sachverhalt aus den Grundannahmen relativistischer Quantenmechanik.

Bei Zuständen identischer Teilchen existieren keine Operatoren, die individuelle Quantenzahlen, etwa den Impuls \mathbf{p}_1 des ersten Teilchens messen. Denn die Eigenzustände Λ der Meßoperatoren unterliegen ebenfalls der Bose- oder Fermisymmetrie und die Operatoren bewahren die Bose- oder Fermisymmetrie der Zustände. Die individuellen Quantenzahlen \mathbf{p}_1 und \mathbf{p}_2 kann man nur bis auf Teilchenpermutation aus den Eigenwerten der symmetrischen Operatoren $\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2$ und $\mathbf{P}_1^2 + \mathbf{P}_2^2$ rekonstruieren.

Kapitel 6

Zeitentwicklung, Grundzustandsenergie

6.1 Schrödingergleichung

Wir können in Abbildung (1.1) den Abstand zwischen Quelle und Apparat und damit die Flugzeit variieren und fragen, wie die Verteilung der Meßergebnisse von der Zeit abhängt. Diskutieren wir dies zunächst für reine Zustände. Am Eingang des Meßapparates liegt ein Zustand $\Psi(t)$ vor, der von der Flugdauer t abhängt. Die Zeitentwicklung bildet Strahlen im Hilbertraum $\Psi(0)$ auf Strahlen $\Psi(t)$ ab. Verwenden wir normierte Vektoren, um die Strahlen zu repräsentieren, so muß für alle Zeiten

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1 \quad (6.1)$$

gelten und eine Phasenänderung von $\Psi(0)$ darf höchstens zu einer Phasenänderung von $\Psi(t)$ führen. Mit dieser Einschränkung bildet die Zeitentwicklung die Einheitskugel im Hilbertraum auf sich ab. Differenzieren wir nach der Zeit, so erhalten wir

$$\langle \partial_t \Psi(t) | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \partial_t \Psi(t) \rangle = 0 \quad (6.2)$$

Die Zeitentwicklungsgleichung sollte eine Differentialgleichung erster Ordnung sein, sonst würde nicht Ψ das System vollständig charakterisieren und zusätzliche, nicht in Ψ enthaltene Daten wie $\partial_t \Psi$ könnten präpariert werden und würden im Laufe der Zeitentwicklung meßbar.

Der eigentliche Inhalt des Superpositionsprinzip der Quantenmechanik ist die Annahme, daß die Zeitentwicklung linear in Ψ ist. Mit dieser Annahme postuliert man die Schrödingergleichung.

$$i\hbar \partial_t \Psi = H \Psi \quad H = H^\dagger \quad (6.3)$$

Denn wenn $\partial_t \Psi = O\Psi$ für irgendeinen linearen Operator O gilt, so ist er nach (6.2) antihermitesch. Die Schrödingergleichung drückt diesen Sachverhalt nach Abspalten von i und einem maßsystemabhängigen Faktor \hbar , dem Wirkungsquantum, aus. Der Hamiltonoperator H erzeugt die Zeitentwicklung. Er hat die Dimension einer Energie.

In einem Gemisch $\rho = \sum_j p_j |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j|$ ändern sich als Funktion der Zeit die Zustände Ψ_j . Die Wahrscheinlichkeiten p_j sind die Produktionswahrscheinlichkeiten, mit der diese Zustände im Gemisch vorliegen. Sie ändern sich nicht durch Schrödingersche Zeitentwicklung.

$$\rho(t) = \sum_j p_j |\Psi_j(t)\rangle \langle \Psi_j(t)| \quad (6.4)$$

Differenziert man nach der Zeit, so erhält man aus der Schrödingergleichung (6.3) die von-Neumann-Gleichung für die Zeitentwicklung der Dichtematrix

$$i\hbar \partial_t \rho = H\rho - \rho H = [H, \rho] . \quad (6.5)$$

Es ist mit den Grundstrukturen der Quantenmechanik durchaus verträglich, daß bei physikalischen Systemen $\Psi(t)$ nichtlinear von $\Psi(0)$ abhängt und durch eine Selbstabbildung $\Psi(t) = \Phi_t(\Psi(0))$ von $\mathcal{H} - \{0\}$ gegeben ist, die Strahlen des Hilbertraumes auf Strahlen abbildet

$$\Phi_t(\lambda\Psi) = f_t(\lambda, \Psi)\Phi_t(\Psi) , \quad \Psi \in \mathcal{H} , \quad \lambda \neq 0 , \quad (6.6)$$

wobei der komplexe Faktor $f_t(\lambda, \Psi) \in \mathbb{C}$ für nichtverschwindendes λ nicht Null wird. Die zugehörigen, allgemeineren Zeitentwicklungsgleichungen heißen „nichtlineare Schrödingergleichung“ und sind Gegenstand der Forschung, ihre physikalische Bedeutung ist unklar. Wir folgen dem normalen Sprachgebrauch und beschränken die Bezeichnung quantenmechanisch auf solche Systeme, deren Zeitentwicklung durch einen linearen Hamiltonoperator gegeben ist.

Es gehört zu den Besonderheiten der Quantenmechanik, daß die Zeit nicht an den physikalischen Systemen der Abbildung (1.1) gemessen wird, sondern daß die Zeit ebenso wie der Meßapparat zur Außenwelt gehört. Durch Messen eines Zustandes kann man nicht sagen, wie spät es ist, auch wenn man durch Verfolgen der Entwicklung und Vergleich mit Uhren durchaus sagen kann, wieviel Zeit zwischen zwei Ereignissen vergangen ist.

Es gibt in der Quantenmechanik keinen Operator, der die Zeit mißt. Das hat die erfreuliche Konsequenz, daß es keine Eigenzustände zu einem Zeitoperator gibt. Diese Zustände wären zu einer Zeit und zu keiner anderen, für sie würde die Zeit nicht laufen.

Die Variable t in zeitabhängigen Ortswellenfunktionen ist auch in relativistischer Quantenmechanik grundverschieden von den Ortsvariablen \mathbf{x} . Mehrteilchenzustände haben Wellenfunktionen mit mehreren Ortsvariablen aber mit nur einer Zeit. Über t wird im Skalarprodukt nicht integriert, die Wahrscheinlichkeit $w(\Delta, \Psi(t))$ ist nicht eine Wahrscheinlichkeit, einen Meßwert t im Zeitintervall dt zu finden. Vielmehr parametrisiert t die Zustände $\Psi(t)$ zwischen Austritt aus der Quelle bis zum Erreichen des Meßapparates. Wo genau die Quelle aufhört und der Meßapparat anfängt, ist dabei unerheblich. Der Aufbau in Bild (1.1) verändert sich nicht wesentlich, wenn wir einen Teil der Laufstrecke zur Quelle und einen anderen Teil zum Apparat zählen. Die Zeit zwischen Präparation des Zustands und Messung ist positiv.

Ist der Hamiltonoperator zeitunabhängig und ist zu Beginn der Zustand $\Psi(t=0)$ Eigenzustand zu H , so sind die Wahrscheinlichkeiten für alle Meßwerte zeitunabhängig, denn aus

$$i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi = E\Psi \quad (6.7)$$

folgt $\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\Psi(0)$ und der zu $\Psi(t)$ gehörige Strahl im Hilbertraum ändert sich nicht. Energieeigenzustände heißen daher auch stationäre Zustände.

Vertauscht der zeitunabhängige Hamiltonoperator mit einem hermiteschen Operator A ,

$$[H, A] = 0 \quad (6.8)$$

der einem zeitunabhängigen Meßapparat entspricht, so ändert sich die Wahrscheinlichkeit $w(\mathbf{a}_i, \Psi(t))$ (1.1) für Meßwerte \mathbf{a}_i nicht mit der Zeit. Denn der zum Meßwert gehörige, normierte Eigenzustand Λ_i kann zeitunabhängig und als Eigenzustand zu H gewählt werden (4.24) $H\Lambda_i = E_i\Lambda_i$. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\Lambda_i|\Psi(t)$ ändert sich daher nur um eine Phase

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \Lambda_i|\Psi(t) &= \Lambda_i|H\Psi(t) = H\Lambda_i|\Psi(t) = E_i \Lambda_i|\Psi(t) \\ \Lambda_i|\Psi(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_it} \Lambda_i|\Psi(0) \end{aligned} \quad (6.9)$$

Ist insbesondere $\Psi(0)$ Eigenzustand zu A zum Meßwert \mathbf{a} , so bleibt er Eigenzustand und die Quantenzahl \mathbf{a} ist eine Erhaltungsgröße. Hierauf beruht die überragende Bedeutung von Energie-, Impuls- und Drehimpulsoperatoren, denn außerhalb von Wechselwirkungszonen, das heißt vor und nach Streuung, sind Energie, Impuls und Drehimpuls der Stoßpartner erhalten.

Ist der Hamiltonoperator zeitunabhängig und kennt man sein Spektrum $\{E_1, E_2, \dots, E_i, \dots\}$ und seine Eigenzustände $\Lambda_1, \Lambda_2, \dots, \Lambda_i, \dots$, so ist das Problem, die Zeitentwicklung eines allgemeinen Zustands zu bestimmen, dazu vereinfacht, die Komponenten des Anfangszustands in der normierten Eigenbasis des Hamiltonoperators zu bestimmen und den Zustand zur späteren

Zeit mit diesen Komponenten zusammenzusetzen

$$\Psi(t) = \sum_i e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} \Lambda_i \psi_i, \quad \psi_i = \Lambda_i |\Psi(t=0)|. \quad (6.10)$$

Zu gegebenem Hamiltonoperator gehört daher die Standardaufgabe, das Spektrum und die Eigenzustände zu bestimmen.

Die Eigenwertgleichung des Hamiltonoperators

$$(H - E_i) \Lambda_i = 0 \quad (6.11)$$

heißt zeitunabhängige Schrödingergleichung. Trotz weitverbreiteter, anderer Meinung erlaubt sie nicht, auszurechnen, in welchem Zustand sich das quantenmechanische System befindet, denn quantenmechanische Systeme müssen sich nicht in Energieeigenzuständen befinden. Zum Beispiel sind instabile Teilchen oder Wellenpakete freier Teilchen keine Energieeigenzustände. Allerdings trennen sich, wenn man genügend wartet, verschiedene, durch eine endliche Energiedifferenz getrennte Energieanteile, wenn sie verschieden schnell sind. Auf diese Art präparieren sich häufig Energieeigenzustände von selbst.

Handelt es sich bei dem Zustand um ein Teilchen ohne Spin, das sich in einer Dimension bewegt, so kann der allgemeinste Zustand als Linearkombination von Ortseigenzuständen Λ_x mit der Wellenfunktion $\psi(x)$ als Entwicklungskoeffizient (5.42) geschrieben werden

$$\Psi = \int dx \Lambda_x \psi(x). \quad (6.12)$$

Der Hamiltonoperator für die Bewegung im Potential besteht aus kinetischer Energie $\frac{p^2}{2m}$ und potentieller Energie $V(X)$. Auf die Ortswellenfunktion wirkt der Impulsoperator als Ableitung $(P\Psi)(x) = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}$ (5.27) und das Potential multipliziert die Ortswellenfunktion $(V\Psi)(x) = V(x)\psi(x)$ (5.8). Also lautet die Eigenwertgleichung $(H - E)\Psi = 0$ auf Ortswellenfunktionen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - E\right) \psi(x) = 0. \quad (6.13)$$

Die Lösungen müssen normierbar sein, wenn ihnen Vektoren im Hilbertraum der quadratintegrablen Wellenfunktionen entsprechen sollen. Zusätzlich sind aber auch alle Lösungen interessant, die für $x \rightarrow \pm \infty$ nicht anwachsen. Denn aus solchen verallgemeinerten Lösungen lassen sich normierte Wellenpakete Ψ zusammensetzen, die der Eigenwertgleichung mit jeder vorgegebenen Genauigkeit $\varepsilon > 0$ nahe kommen. $\|(H - E)\Psi\|^2 < \varepsilon$. Zum Beispiel

sind für verschwindendes Potential die verallgemeinerten Impulseigenzustände $\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p x}$ verallgemeinerte Energieeigenzustände mit $E = \frac{p^2}{2m}$. Sie gehören zum kontinuierlichen Spektrum der kinetischen Energie, das aus den reellen, nichtnegativen Zahlen $E \geq 0$ besteht.

Um die mathematischen Schwierigkeiten klein zu halten, untersucht man vorzugsweise die Eigenwertgleichung (6.13) für vereinfachte Potentiale, wie den Topf oder die Schwelle.

6.2 Schrödingerbild, Heisenbergbild

Es läßt sich in der Quantenmechanik nicht entscheiden, ob die Wahrscheinlichkeitsverteilung von Meßwerten sich ändert, weil sich der Zustand Ψ bei unverändertem Meßapparat im Laufe der Zeit ändert, oder weil sich die Meßapparate ändern und die Zustände unverändert bleiben.

Im Schrödingerbild, das wir bisher verwendet haben, ordnet man die Zeitentwicklung den Zuständen zu und verwendet zeitlich unveränderte Meßoperatoren.

Sei als Funktion der Zeit t eine Schar $U(t)$ von unitären Operatoren

$$U^\dagger(t) = U^{-1}(t) \quad (6.14)$$

gegeben. Verwendet man statt der zu vermessenden Zustände $\Psi(t)$ und der Eigenzustände Λ_i der Meßapparate A die Zustände und Operatoren

$$\Psi'(t) = U(t)\Psi(t), \quad \Lambda'_i(t) = U(t)\Lambda_i, \quad A'(t) = U(t)AU^{-1}(t), \quad (6.15)$$

so erhält man zu allen Zeiten und für alle Meßapparate und alle physikalischen Zustände unveränderte Wahrscheinlichkeitsamplituden und unveränderte Eigenwerte der zu den Meßapparaten gehörenden Operatoren

$$\Lambda'_i(t)|\Psi'(t)\rangle = U(t)\Lambda_i|U(t)\Psi(t)\rangle = \Lambda_i|U^\dagger(t)U(t)\Psi(t)\rangle = \Lambda_i|\Psi(t)\rangle.$$

$$A\Lambda_i = a_i\Lambda_i \Leftrightarrow U(t)AU^{-1}(t)U(t)\Lambda_i = a_iU(t)\Lambda_i.$$

Durch Differenzieren $\partial_t(U(t)U^{-1}(t)) = 0$ mit der Produktregel lernt man

$$\partial_t U^{-1} = -U^{-1}(\partial_t U)U^{-1}. \quad (6.18)$$

Daher und wegen $U^\dagger = U^{-1}$ ist $U^{-1}(t)\partial_t U(t)$ antihermitesch

$$(U^\dagger \partial_t U)^\dagger = (\partial_t U^{-1})U = -U^{-1} \partial_t U. \quad (6.19)$$

Mit der Bezeichnung

$$U^{-1}(t)i\hbar\partial_t U(t) = -H_0(t) \quad H_0 = H_0^\dagger \quad (6.20)$$

und der Schrödingergleichung für $\Psi(t)$ folgt für $\Psi'(t)$ die Zeitentwicklung

$$i\hbar\partial_t \Psi' = H'(t)\Psi' \quad \text{mit } H' = U(H - H_0)U^{-1}. \quad (6.21)$$

Operatoren, die zu Meßapparaten gehören, erfüllen die Gleichung

$$i\hbar\partial_t A'(t) = -[\tilde{H}, A'(t)] \quad \text{mit } \tilde{H} = UH_0U^{-1}. \quad (6.22)$$

Wählt man insbesondere $H_0 = H$, bestimmt also $U(t)$ als Lösung von $i\hbar\partial_t U = -HU$ mit $U(0) = 1$, so ist Ψ' zeitunabhängig und $\tilde{H} = H$. Die gestrichenen Größen heißen Zustände und Meßoperatoren im Heisenbergbild und erfüllen die Gleichungen

$$i\hbar\partial_t \Psi_H = 0, \quad i\hbar\partial_t \rho_H = 0, \quad i\hbar\partial_t A_H = -[H, A_H]. \quad (6.23)$$

Für $t = 0$ stimmen Zustände und Meßoperatoren im Heisenbergbild und im Schrödingerbild überein.

Für Zustände, die in eine Wechselwirkungszone ein- und auslaufen, sollte für frühe und späte Zeiten die Wechselwirkung H_{int} verschwinden. Im Wechselwirkungsbild wählt man H_0 so, daß $H_{\text{int}} = U(H - H_0)U^{-1}$. Man arbeitet also mit Zuständen, die für frühe und späte Zeiten zeitunabhängig werden, so daß der Grenzwert $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \Psi_W(t)$ existiert. Dies ist für die Diskussion von Streuexperimenten günstig.

Wenngleich alle Bilder mathematisch äquivalent sind, so sind sie doch unterschiedlich intuitiv. Zum Beispiel zerläuft ein freies Wellenpaket. Im Schrödinger-Bild ist das verständlich, weil das Wellenpaket Anteile mit unterschiedlichem Impuls und, bei massiven Teilchen, mit unterschiedlicher Geschwindigkeit hat. Das Zerfließen eines Wellenpakets ist so intuitiv erfaßbar, wie ein Hundertmeter-Rennen, bei dem am Ziel die Teilnehmer nacheinander einlaufen. Im äquivalenten Heisenberg-Bild ändert sich nicht der Zustand sondern der Meßapparat, als würden nicht die Läufer sondern die Zielrichter auseinander streben.

6.3 Grundzustandsenergie

Energien, die Eigenwerte des Hamiltonoperators, der die Zeitentwicklung erzeugt, sind streng genommen nicht meßbar, sondern nur Differenzen der Energien. Insbesondere ist die Grundzustandsenergie von physikalischen Systemen nicht aus der Zeitentwicklung rekonstruierbar.

Gilt nämlich die Schrödingergleichung (6.3) für alle Zustände $\Psi(t)$, so lassen sich diese Zustände nicht von $\Psi'(t) = e^{i\alpha t}\Psi(t)$ für reelles α unterscheiden, denn Ψ' und Ψ ergeben zu allen Zeiten für alle Meßapparate dieselbe Verteilung von Meßwerten. Es erfüllt aber $\Psi'(t)$ die Schrödingergleichung mit $H' = H - \alpha$. Also kann nicht zwischen H und $H - \alpha$ unterschieden werden. Diskussionen über die Größe der Grundzustandsenergie ähneln daher mittelalterlichen Erörterungen der Frage, wieviel Engel auf eine Nadelspitze passen: immerhin wissen wir, daß wir dies durch keine Messung klären können.

Im Heisenbergbild ist es noch einfacher einzusehen, daß sich die Zeitentwicklung der Meßapparate nicht ändert, wenn zum Hamiltonoperator eine Zahl α hinzugefügt wird, denn α vertauscht mit jedem Operator.

Zwar nicht aus der Zeitentwicklung, wohl aber aus anderen Gründen, kann durchaus die Energie absolut festgelegt werden. Energiedichte, genauer der Energie-Impulstensor, führt in der Allgemeinen Relativitätstheorie zu Raumkrümmung. Kosmologische Beobachtungen ergeben, daß der Beitrag der Energiedichte des Grundzustandes zur Raumkrümmung unmeßbar klein und verträglich mit einer verschwindenden Grundzustandsenergie ist. Problematisch ist allerdings, daß keine erfolgreiche Theorie existiert, die Quantenmechanik und Allgemeine Relativitätstheorie vereint.

Einem freien, nichtrelativistischen Teilchen mit Impuls \vec{p} schreibt man die Energie $E = \vec{p}^2/(2m) + 0$ zu und hat dabei über die Grundzustandsenergie so verfügt, daß die Ruhenergie verschwindet.

Das Wasserstoffatom hat ein kontinuierliches, positives Spektrum der Schwerpunktsbewegung. In Bindungszuständen hat die Relativbewegung von Proton und Elektron ein diskretes Spektrum von Energiewerten mit Energien $E_{n,l,m} = -\frac{R_y}{n^2}$ und Eigenzuständen $\Lambda_{n,l,m}$. Hierbei ist $R_y = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2}$ die Rydbergkonstante, die Hauptquantenzahl $n = 1, 2, \dots$ durchläuft die natürlichen Zahlen, für gegebenes n gibt es je ein Drehimpulsmultiplett mit $l = 0, 1, \dots, n-1$ und jedes Drehimpulsmultiplett wird von $2l+1$ Zuständen mit $m = -l, -l+1, \dots, l$ aufgespannt. Berücksichtigt man genauer, daß das Elektron Spin $1/2$ hat, so verdoppelt sich die Zahl der Zustände, bezieht man auch den Spin $1/2$ des Protons ein, so verdoppeln sich diese Zustände nochmal. Der Spin des Elektrons ist entscheidend für das Periodensystem der Elemente, der Spin des Protons bewirkt die Hyperfeinstruktur der Energien und wird in manchen Lehrbüchern nicht einmal erwähnt. Über den diskreten Energien der Bindungszustände schließt sich das Kontinuum der positiven Energien der Relativbewegung des ionisierten Elektron-Proton-Paares an. Es ist natürlich, der Ionisationskante die Energie der Schwerpunktsbewegung von Elektron und Proton zuzuschreiben.

In relativistischen Theorien im nichtgekrümmten Raum liegt die Grundzustandsenergie fest. Der Hamiltonoperator $H = cP^0$ ist hier eine Kom-

ponente des Viererimpulses P^m , $m = 0, 1, 2, 3$, der mit den Operatoren $M^{mn} = -M^{nm}$, die Lorentztransformationen erzeugen, folgende Kommutatorrelationen erfüllt

$$[M^{mn}, P^l] = -i(\eta^{ml}P^n - \eta^{nl}P^m) \quad m, n, l \in \{0, 1, 2, 3\}. \quad (6.24)$$

Diese Relationen erlauben nicht, zu P^m Zahlen hinzuzufügen. In relativistischen Theorien muß das Vakuum, der Zustand niedrigster Energie, wenn er existiert, die Energie Null haben. Ebenso muß für freie Teilchen mit Impuls \vec{p} und Masse m die Energie $E = \sqrt{m^2c^4 + \vec{p}^2c^2}$ sein.

Es gibt eine durch die ganze Literatur durchgängige Wahl, dem harmonischen Oszillator die Grundzustandsenergie $\hbar\omega/2$ zuzuordnen. Das wußte Planck bei der Ableitung seiner Strahlungsformel, mit der im Jahr 1900 die Quantenmechanik begann, schon besser: er ordnete Zuständen mit n Photonen die Energie $n\hbar\omega$ zu und nicht den Wert $(n + 1/2)\hbar\omega$, der mit relativistisch kovarianter Beschreibung der Photonen unverträglich ist.

Wir haben schon gesehen, daß die Grundzustandsenergie unmeßbar ist, man sollte daher über sie so verfügen, daß Berechnungen einfach und insbesondere daß sie endlich sind. Energien frei zusammengesetzter Systeme sollten additiv sein. Es gibt in jedem Hohlraum unendlich viele Frequenzen ω_i für Photonen. Ordnet man jeder Frequenz einen Beitrag $\hbar\omega_i/2$ zur Grundzustandsenergie zu, so hat schon der Grundzustand ohne Photonen unendlich viel Energie $\sum_i \hbar\omega_i/2 = \infty$.

Das Mißverständnis, die Grundzustandsenergie liege fest, beginnt in der klassischen Physik. Die Wahl der Hamiltonfunktion

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad (6.25)$$

verfügt über die klassisch nicht meßbare Grundzustandsenergie so, daß der Zustand niedrigster Energie, der Punkt ($x = 0, p = 0$) im Phasenraum, die Energie 0 hat. Diese Wahl macht den algebraischen Ausdruck für die potentielle Energie $V(x)$ einfach, man hätte aber genauso gut $V(x) = 1/2 m\omega^2x^2 - \hbar\omega/2$ wählen können.

6.4 kanonische Quantisierung, Normalordnung

Das Mißverständnis, Grundzustandsenergie liege fest, setzt sich fort bei kanonischer Quantisierung. Kanonische Quantisierung besteht darin, im algebraischen Ausdruck für die Hamiltonfunktion $H(p, x)$ die Symbole p und

x als hermitesche Operatoren P und X zu lesen, die die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen (5.30) erfüllen. So erhält man zum Beispiel aus der Hamiltonfunktion des eindimensionalen, harmonischen Oszillators den Hamiltonoperator

$$H_{\text{Oszillator}} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2. \quad (6.26)$$

Er hat Eigenwerte $(n + 1/2)\hbar\omega$.

So einfach kanonische Quantisierung ist, sie ist nicht einmal definiert: sie ist keine Abbildung von Phasenraumfunktionen $H(p, x)$ auf Operatoren. Das Ergebnis kanonischer Quantisierung hängt nicht nur von der Phasenraumfunktion $H(p, x)$ ab, sondern von der Schreibweise der Funktion.

Mit $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ und mit komplexen Phasenraumkoordinaten

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} + \frac{i}{\hbar}x_0 p\right), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{x_0} - \frac{i}{\hbar}x_0 p\right) \quad (6.27)$$

können wir die Hamiltonfunktion des harmonischen Oszillators als Betragsquadrat schreiben.

$$H = \hbar\omega a^\dagger a \quad (6.28)$$

Quantisieren wir die Hamiltonfunktion in dieser Schreibweise, werden a und a^\dagger Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren (4.33) und der zu (6.28) gehörige Hamiltonoperator hat Eigenwerte $n\hbar\omega$ (Kapitel 4.5).

Schreiben wir die Hamiltonfunktion als $H = \hbar\omega((1 - \lambda)a^\dagger a + \lambda a a^\dagger)$ mit beliebigem $\lambda \in \mathbb{R}$, so erhalten wir bei kanonischer Quantisierung jede Grundzustandsenergie $\lambda\hbar\omega$, die wir wollen.

Unabhängig vom Wert der Grundzustandsenergie erfüllt der Grundzustand die Gleichung $a\Psi_0 = 0$, die für die Ortswellenfunktion

$$\left(\frac{x}{x_0} + x_0 \partial_x\right)\psi_0(x) = 0 \quad (6.29)$$

besagt. Die Grundzustandswellenfunktion des harmonischen Oszillators ist eine Gaußfunktion

$$\psi_0(x) = (\pi^{-\frac{1}{4}} x_0^{-\frac{1}{2}}) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}. \quad (6.30)$$

Das Ergebnis kanonischer Quantisierung und insbesondere die Grundzustandsenergie hängt von der Schreibweise der klassischen Hamiltonfunktion ab. Kanonische Quantisierung ist also keine Abbildung von Phasenraumfunktionen auf zugehörige Operatoren.

Es gibt allerdings eine andere, sehr einfache Quantisierung, die analytischen Phasenraumfunktionen H Operatoren zuordnet: die Normalordnung $:H:$. Die Normalordnung ist linear

$$:c_1 H_1 + c_2 H_2: = c_1 :H_1: + c_2 :H_2:, \quad :1: = 1 \quad (6.31)$$

und ist für Monome in a, a^\dagger rekursiv erklärt

$$:aH: = :Ha: = :H:a, \quad :a^\dagger H: = :Ha^\dagger: = a^\dagger :H:. \quad (6.32)$$

Das Argument der Normalordnung besteht aus kommutierenden Phasenraumvariablen, das Ergebnis der Normalordnung von Monomen ist ein Produkt von Erzeugungsoperatoren a^\dagger und Vernichtungsoperatoren a , wobei die Erzeuger links und die Vernichter rechts stehen. Die Definition der Normalordnung erweitert man leicht auf mehrere, verschiedene Erzeuger a_i^\dagger und Vernichter a_j , solange die Reihenfolge der Erzeuger und die Reihenfolge der Vernichter irrelevant ist

$$[a_i, a_j] = 0, \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0, \quad [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}. \quad (6.33)$$

Das Argument der Normalordnung besteht aus kommutierenden Größen, denn wenn das Argument ein Produkt von H_1, H_2 und H_3 ist, so gilt

$$:H_1 H_2 H_3: = :H_2 H_1 H_3: = :H_2 H_3 H_1:. \quad (6.34)$$

Dann kann für das Argument der Normalordnung keine Operatoridentität wie $XP - PX = i\hbar$ (5.30) gelten, denn die Normalordnung von $XP - PX$ verschwindet.

Normalordnung ist linear, aber die Normalordnung eines Produkts von Faktoren ist nicht das Produkt der normalgeordneten Faktoren.

$$:H_1 H_2: \neq :H_1: :H_2: \quad (6.35)$$

Dies ist erwünscht. Ansonsten würden wegen (6.34) alle normalgeordneten Operatoren kommutieren im Gegensatz zur Heisenbergschen Vertauschungsrelation (5.30).

Normalordnung von (6.25) führt zu verschwindender Grundzustandsenergie. Aber Normalordnung ist eine willkürliche Vorschrift zur Quantisierung. Leider hängt sie von den verwendeten Phasenraumkoordinaten ab. Nicht quantisierte physikalische Systeme lassen sich durch kanonische Transformationen in andere, äquivalente Form bringen. Die Quantisierung der verschiedenen, klassisch äquivalenten Formen führt aber zu quantenmechanischen Modellen, die nicht äquivalent sind.

Die Enttäuschung darüber, daß es keine willkürfreie Quantisierung gibt, hält sich bei mir in Grenzen. Es muß keinen Zusammenhang von klassischen Systemen und quantisierten Systemen geben. Das hieße doch, daß man einem klassischen System, also dem quantisierten System nach Vernachlässigung der Quanteneigenschaften, das zugrunde liegende Quantensystem ansehen kann. Kanonische Quantisierung leitet die Intuition, welche Quantentheorien man untersuchen solle. Ob aber ein wie auch immer konstruiertes quantenmechanisches Modell richtig ist, entscheidet sich daran und nur daran, ob die Konsequenzen des quantenmechanischen Modells mit den Beobachtungen übereinstimmen.

6.5 Zustandsreduktion

Unter den Axiomen, denen quantenmechanische Systeme zu genügen haben, findet man bei vielen Autoren die Zustandsreduktion, daß nämlich als Ergebnis der Messung mit einem idealen Meßapparat A das gemessene System augenblicklich in den zum angezeigten Meßwert gehörenden Eigenzustand übergeht.

Das Axiom führt auf scheinbare Widersprüche wie das Einstein-Rosen-Podolsky-Paradoxon oder Zenons Paradoxon. Es kann durch unspektakuläre, physikalische Analyse des Meßapparates ersetzt werden.

Blenden wir in Abbildung (1.1) alle Strahlen, die zu Meßwerten a_2, a_3, \dots gehören, aus, und betrachten wir Messungen am verbleibenden Teilstrahl a_1 . Wir haben auf diese Art aus Quelle, Strahl und Apparat eine neue Quelle konstruiert. Welche Eigenschaften der in dieser Quelle präparierte Zustand hat, hängt vom Meßapparat ab und sollte nicht axiomatisch gefordert werden. Zum Beispiel beeinflußt es nicht die Strahlaufspaltung, wohl aber nachfolgende Messungen, wenn am Ausgang einer Stern-Gerlach-Apparatur ein homogenes Magnetfeld quer zur Richtung, in der die Strahlen aufspalten, die Spins der auslaufenden Teilchen dreht. Ohne die Anzeige des Meßapparates zu ändern, kann man den Zustand ändern, der nach der Messung präpariert ist.

Man kann natürlich die Bezeichnung „idealer Meßapparat“ auf Meßapparate beschränken, die Eigenzustände zur erneuten Messung mit einem zweiten, baugleichen Meßapparat präparieren. Dann dient aber Zustandsreduktion als Bezeichnung für eine Klasse von Meßapparaten. Bei jedem realen Meßapparat muß man messen, ob er Eigenzustände für eine zweite Messung mit einem baugleichen Meßapparat präpariert.

Welcher Zustand nach der Messung vorliegt, hängt vom experimentellen Aufbau ab. Werden alle Ausgänge eines Meßapparates, der Eigenzustände für

eine erneute Messung präpariert, nach der Messung zu einem neuen Strahl zusammengefaßt und bestehen keine festen Phasenbeziehungen zwischen den Zuständen nach der Messung, so ist der zusammengefaßte Strahl ein Gemisch

$$\rho_{A,\Psi} = \sum_i w(\mathbf{a}_i, \Psi) |\Lambda_i\rangle \langle \Lambda_i|. \quad (6.36)$$

In dem derart gemischten Strahl ist die bedingte Wahrscheinlichkeit dafür, den Meßwert \mathbf{a}_i zu erhalten, wenn zuvor schon \mathbf{a}_i gemessen wurde, Eins. Die Reduktion der Ereignismenge auf diejenigen Ereignisse, bei denen schon bei der ersten Messung \mathbf{a}_i gemessen wurde, ist die Zustandsreduktion. Die Zustandsreduktion kann beliebig lange nach den Messungen vorgenommen werden, wenn nur die Meßergebnisse aufgezeichnet wurden. Sie kann augenblicklich erfolgen, sobald ein Meßergebnis bekannt ist. Sie kann sogar rückwirkend erfolgen: ist das Ergebnis der zweiten Messung bekannt und das der ersten nicht, so kann man das Ergebnis der früheren Messung vorhersagen und später durch die Meßaufzeichnung bestätigen.

Bei manchen, einfach nachvollziehbaren Meßanordnungen kann man die Phasenbeziehungen zwischen den Strahlen kontrollieren, die zu den verschiedenen Meßwerten \mathbf{a}_i gehören. Der aus den zugehörigen Teilstrahlen kombinierte Gesamtstrahl hängt dann empfindlich davon ab, wie er aus den Teilstrahlen kombiniert wurde. Im Extremfall, zum Beispiel beim Doppelspalt, kann aus den verschiedenen Teilstrahlen ein reiner Zustand zusammengesetzt werden, dessen Anteile miteinander interferieren. Falls die Meßwerte \mathbf{a}_i abgelesen werden können, werden die Phasenbeziehungen zwischen den zugehörigen Teilstrahlen unkontrollierbar und der zusammengefaßte Strahl ist das Gemisch (6.36).

Viele Meßapparate präparieren nicht Eigenzustände zur erneuten Messung. Dies gilt insbesondere bei jeder Messung der Zahl von Photonen, die eine Detektorfläche innerhalb einer Nachweisdauer durchströmen: Photoschichten und Photomultiplier zählen Photonen, indem sie sie vernichten.

Der Meßapparat wird in Abbildung (1.1) als ein Apparat mit Eingang und Ausgang idealisiert. Das Durchlaufen des Apparates und das Auftrennen in verschiedene Teilstrahlen braucht Zeit, die vom inneren Aufbau des Apparates abhängt. Bei keinem Apparat verschwindet, wie bei Zenons Paradoxon unterstellt, diese Meßdauer. Die Messung ist nicht instantan. Die gedankliche Idealisierung, daß die Zeit zwischen Beginn der Messung und Ablesen des Meßergebnisses beliebig klein gehalten werden kann, ist im Widerspruch zur quantenmechanischen Unschärferrelation (9.10) $\Delta t \Delta E \geq \hbar/2$.

6.6 Zeitentwicklung im Zweizustandssystem

Die Zeitentwicklung im Zweizustandssystem ist einfach genug, um bei zeitunabhängigem Hamiltonoperator eine Übersicht über die Zeitabhängigkeit der Wahrscheinlichkeit für Meßwerte an allen physikalischen Zuständen und für alle Meßapparate zu geben.

Wir verwenden zur Diskussion die Eigenbasis des Hamiltonoperators. Dann ist er diagonal und hat in jedem Fall die Form

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad E_1, E_2 \in \mathbb{R} . \quad (6.37)$$

Wir wählen die Eigenzustände Λ_i , $i = 1, 2$, von H zeitunabhängig, dann erfüllen die Komponenten $\psi_i(t) = \langle \Lambda_i | \Psi(t) \rangle$, $i = 1, 2$, die folgende, entkoppelte Schrödingergleichung

$$i\hbar \partial_t \psi_i(t) = E_i \psi_i(t), \quad i = 1, 2, \quad (6.38)$$

mit der Lösung

$$\psi_1(t) = \psi_1(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t}, \quad \psi_2(t) = \psi_2(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t}. \quad (6.39)$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß der erste Meßwert irgend eines Meßapparates angezeigt wird, wenn zur Zeit t gemessen wird, beträgt

$$w(t) = |\phi_1^* \psi_1(t) + \phi_2^* \psi_2(t)|^2. \quad (6.40)$$

Hierbei sind ϕ_1 , ϕ_2 die Komponenten des ersten Eigenvektors des Meßapparates. Einfaches Rechnen zeigt, daß $w(t)$ die Form

$$w(t) = a + b \cos(\omega t + \alpha), \quad a, b \in [0, 1], \quad \omega, \alpha \in \mathbb{R} \quad (6.41)$$

hat mit $a = |\phi_1^* \psi_1(0)|^2 + |\phi_2^* \psi_2(0)|^2$, $b e^{i\alpha} = 2\phi_1 \phi_2^* \psi_1(0)^* \psi_2(0)$ und

$$\omega = \frac{E_1 - E_2}{\hbar}. \quad (6.42)$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß der erste Meßwert angezeigt wird, oszilliert mit der Rabi-Frequenz $\omega/2\pi$. Die Frequenz ist durch die Energiedifferenz gegeben. Absolute Energiewerte treten in der Zeitentwicklung meßbarer Größen nicht auf.

Die Amplitude b der Rabi-Oszillation verschwindet, wenn $\Psi(0)$ oder der Eigenzustand Φ des Meßapparates Energieeigenzustand ist.

Rabi-Oszillationen treten in physikalisch unterschiedlichen Situationen auf, wenn für die Zeitentwicklung und die Messung nur zwei Zustände relevant sind. In der Teilchenphysik heißt das entsprechende Phänomen Teilchenoszillation. Es wird an neutralen K-Mesonen und vermutlich an Neutrinos beobachtet. In der Quantenoptik ist das Phänomen eingedeutscht und heißt „quantum beat“.

Wird nicht ein reiner Zustand sondern ein Gemisch ρ mit Eigenwerten ρ_i und Eigenzuständen Υ_i vermessen, behält die Rabi-Frequenz ihren Wert. Die Parameter \mathbf{a} , \mathbf{b} und α sind $\mathbf{a} = \rho_1 \mathbf{a}_1 + \rho_2 \mathbf{a}_2$ und $\mathbf{b} e^{i\alpha} = \rho_1 \mathbf{b}_1 e^{i\alpha_1} + \rho_2 \mathbf{b}_2 e^{i\alpha_2}$, wobei \mathbf{a}_i , \mathbf{b}_i und α_i zu $\Psi = \Upsilon_i$ gehören. Berücksichtigt man, daß $\langle \Upsilon_1 | \Upsilon_2 \rangle = 0$ ist, so sieht man, daß die Amplitude \mathbf{b} der Rabi-Oszillation proportional zur Differenz der Eigenwerte ($\rho_1 - \rho_2$) ist. Sie nimmt also bei abnehmender Polarisierung ab.

6.7 Energiebänder

Wir untersuchen in eindimensionaler, spinloser Quantenmechanik das Spektrum (6.13) eines Hamiltonoperators mit periodischem Potential [2, Kapitel XIII.16] mit Periodizitätslänge l

$$V(x + l) = V(x) \quad \forall x. \quad (6.43)$$

Die Differentialgleichung (6.13) mit periodischer Funktion $V(x)$ heißt Hill'sche Differentialgleichung. Sie kommt in der Mechanik bei Schwingungen mit periodisch zeitabhängiger Frequenz zum Beispiel bei der Bahn des Mondes vor.

Weil das Potential periodisch ist, vertauscht der Hamiltonoperator mit der Verschiebung U_l (5.26) um die Periodizitätslänge

$$\begin{aligned} (H U_l \Psi)(x) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) (U_l \Psi)(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x - l) \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x - l) \right) \psi(x - l) = (U_l H \Psi)(x). \end{aligned} \quad (6.44)$$

Der Hamiltonoperator und die unitäre Transformation U_l können demnach gemeinsam diagonalisiert werden (4.24). Die Verschiebung ist eine unitäre Transformation (5.26) mit komplexen Eigenwerten vom Betrag 1 (4.11). Diese Eigenwerte schreiben wir als e^{-ikl} mit reellem k . Dann lautet die Eigenwertgleichung $U_{-l} \Psi_k = e^{ikl} \Psi_k$

$$\psi_k(x + l) = e^{ikl} \psi_k(x). \quad (6.45)$$

Diese Periodizitätsbedingung der Wellenfunktion heißt unter Physikern Blochsches Theorem, Mathematiker nennen sie Floquetsches Theorem. Sie ist verträglich mit der Energieeigenwertgleichung und kann zur Vereinfachung der mathematischen Analyse verlangt werden. Aber sie besagt nicht, daß jede Ortswellenfunktion im periodischen Potential bis auf eine Phase periodisch ist. Als Gegenbeispiel denke man an das freie Teilchen mit verschwindendem Potential. Das Potential $V = 0$ ist trivialerweise periodisch. Dennoch sind die Wellenpakete, die freien Teilchen entsprechen, nicht periodisch, sie sind aus periodischen Funktionen zusammengesetzt.

Die Eigenwertgleichung (6.13) ist eine reelle, lineare, homogene Differentialgleichung zweiter Ordnung für die Wellenfunktion $\psi(x)$. Daher hängt die Wellenfunktion und ihre Ableitung bei $x = l$ linear von den Anfangswerten bei $x = 0$ ab. Fassen wir die Wellenfunktion und ihre Ableitung zu zwei Komponenten eines Vektors u zusammen, so gilt mit einer Matrix A

$$u(x) = \begin{pmatrix} \psi(x) \\ \psi'(x) \end{pmatrix}, \quad (6.46)$$

$$u(l) = A u(0). \quad (6.47)$$

Die lineare Abbildung A der Anfangswerte $u(0)$ auf $u(l)$ heißt Wiederkehrabbildung oder stroboskopische Abbildung.

Die 2. 2-Matrix A ist reell, denn zu reellen Anfangswerten $u(0)$ gehört eine reelle Lösung $u(x)$.

$$A = A^* = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad a, b, c, d \in \mathbb{R}. \quad (6.48)$$

Die Matrixelemente der Matrix A sind differenzierbare Funktionen der Energie E , denn die Lösung $\psi(x)$ und ihre Ableitung hängt bei $x = l$ differenzierbar von dem Parameter E der Differentialgleichung ab.

Aus der Eigenwertgleichung (6.13) folgt unmittelbar, daß der quantenmechanische Strom, die Wronski-Determinante, x -unabhängig ist

$$\frac{2mi}{\hbar} j = \psi^* \overset{\leftrightarrow}{\partial}_x \psi = \psi^* \partial_x \psi - \partial_x \psi^* \psi = u^\dagger(x) I u(x), \quad \text{mit } I = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\partial_x (u^\dagger(x) I u(x)) = 0. \quad (6.49)$$

Insbesondere hat $u^\dagger(x) I u(x)$ für $x = 0$ und für $x = l$ denselben Wert. Daher gilt für alle Anfangswerte $u = u(0)$

$$(Au)^\dagger I Au = u^\dagger I u = u \quad (6.50)$$

und daher

$$A^\dagger I A = I . \quad (6.51)$$

Diese Matrixrelation ist für reelle 2×2 -Matrizen A genau dann erfüllt, wenn die Determinante den speziellen Wert 1 hat.

$$ad - bc = 1 \quad (6.52)$$

Die Matrix A ist aus der Gruppe der speziellen linearen Transformationen von zweidimensionalen reellen Vektorräumen.

$$A \in \text{SL}(2, \mathbb{R}) \quad (6.53)$$

Die Eigenwerte von A

$$\lambda_{1,2} = \frac{a+d}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a+d}{2}\right)^2 - 1} \quad (6.54)$$

sind reell, falls $|\text{tr} A| = |a+d| \geq 2$ ist. Wegen $\det A = 1$ sind sie zueinander invers und der Betrag von einem der reellen Eigenwerte ist größer gleich 1.

$$|\text{tr} A| \geq 2 \Rightarrow \lambda_1 = \lambda_1^* = \frac{1}{\lambda_2} \quad (6.55)$$

Lösungen $u(x)$, die zu Eigenwerten mit $|\lambda| > 1$ gehören, wachsen für $x \rightarrow \infty$ wegen $u(x + nl) = \lambda^n u(x)$ exponentiell an. Die zum anderen Eigenwert $\lambda_2 = \lambda^{-1}$ gehörige Lösung wächst wegen $u_2(x - nl) = \lambda_2^{-n} u_2(x)$ für $x \rightarrow -\infty$. Aus solchen Lösungen lassen sich keine normierbaren Wellenpakete zusammensetzen.

Falls der Betrag der Spur von A kleiner als 2 ist, sind die Eigenwerte komplex, zueinander konjugiert und wegen $\det A = 1$ vom Betrag 1

$$|\text{tr} A| < 2 \Rightarrow \lambda_1 = \lambda_2^*, \quad |\lambda_1| = 1 . \quad (6.56)$$

Die Periodizitätsbedingung (6.45) besagt, daß die Eigenfunktion $\psi(x)$ zu Eigenvektoren der Matrix A mit Eigenwerten e^{ikl} gehört

$$(A - e^{ikl}) \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix} = 0 . \quad (6.57)$$

Dies schränkt die Energie E auf Bänder ein, für die $|\text{tr} A(E)| \geq 2$ gilt, für die also die Eigenwerte von A auf dem Einheitskreis in der komplexen Ebene liegen.

In der Umgebung der Bandkante, zum Beispiel bei $\text{tr}A = 2$, hat A die Form

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & 2-a \end{pmatrix} + \delta E \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}. \quad (6.58)$$

Dabei ist δE die Abweichung der Energie von der Bandkante, die Matrixelemente b und c sind durch $\det A = 1$ eingeschränkt $bc = -(1-a)^2$, und α , β , γ und δ sind die Ableitungen der Matrixelemente a , b , c und d nach der Energie. Hat $|\text{tr}A| - 2$ einen Nulldurchgang und ist $\frac{d}{dE} \text{tr}A = \alpha + \delta = 0$, dann variieren die Eigenwerte in einer Umgebung der Bandkante in niedrigster Ordnung in $(\delta E)^{\frac{1}{2}}$ mit

$$\lambda_{1,2} = 1 \pm \sqrt{\delta E (\alpha + \delta) \text{sign}(\text{tr}A)}. \quad (6.59)$$

An der unteren Bandkante ist $(\alpha + \delta) \text{sign}(\text{tr}A) < 0$ und Energien oberhalb der unteren Bandkante führen zu komplexen Eigenwerten $e^{\pm ikl} = 1 \pm ikl$. Löst man hier nach der Energie als Funktion von k auf, so erhält man am unteren Ende der Bandkante in niedrigster Ordnung

$$E(k) = E(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + \dots \quad \text{mit} \quad M = \frac{\hbar^2}{2l^2} \left| \frac{d}{dE} \text{tr}A \right|. \quad (6.60)$$

Dies ist die Energie-Impulsbeziehung eines Teilchens mit effektiver Masse M .

Wächst mit der Energie im erlaubten Band der Wert von $|k|$ an, so erreicht er bei $k = \pm \frac{\pi}{l}$ die obere Bandkante. Hat dort $|\text{tr}A| - 2$ einen Nulldurchgang und ist $\alpha + \delta = 0$, so verschwindet dort die Ableitung $\frac{dE}{dk}$ und die Krümmung $\frac{d^2 E}{dk^2}$ ist negativ

$$\left. \frac{dE}{dk} \right|_{k=\pm \frac{\pi}{l}} = 0, \quad \left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k=\pm \frac{\pi}{l}} = -2l^2 \left| \frac{d}{dE} \text{tr}A \right|^{-1}. \quad (6.61)$$

Innerhalb jedes Bandes ist $k(E)$ eine monotone Funktion. Dies sieht man, wenn man die Eigenfunktion von (6.13) und (6.45) als Produkt von e^{ikx} und einer periodischen Funktion $u_k(x+l) = u_k(x)$ schreibt.

$$\psi_k(x) = \sqrt{\frac{l}{2\pi}} e^{ikx} u_k(x) \quad (6.62)$$

Die Eigenwertgleichung lautet dann

$$H(k)u_k = \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) u_k, \quad H(k) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\hbar k}{m} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) + V(x). \quad (6.63)$$

Der Hamiltonoperator $H(k)$ wirkt als hermitescher Operator auf l -periodische Funktionen u und v , deren Skalarprodukt durch

$$u|v = \int_0^l dx u^*(x)v(x) \quad (6.64)$$

definiert ist; dies sind Ortswellenfunktionen auf einem Kreis mit Umfang l .

Innerhalb eines Bandes ist $k(E)$ eine differenzierbare Funktion, denn k ist eine differenzierbare Funktion (6.54) der Matrixelemente von A , die wiederum differenzierbar von E abhängen. Differenzieren wir den Eigenwert $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ von $H(k)$ nach E , so erhalten wir wegen (4.80) für normierte u_k und mit

$$Pu_k(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} u_k(x) \quad (6.65)$$

$$1 - \frac{\hbar^2 k}{m} \frac{dk}{dE} = u_k | \frac{dH(k)}{dk} u_k \frac{dk}{dE} = u_k | Pu_k \frac{\hbar}{m} \frac{dk}{dE} . \quad (6.66)$$

Diese Gleichung schließt Nullstellen von $\frac{dk}{dE}$ aus, denn das Matrixelement $u_k | Pu_k$ ist endlich. Es ist $u_k(x)$ differenzierbar, wenn das Potential V nicht-singulär ist, und das Skalarprodukt ist ein Integral über ein endliches Intervall, also ist das Matrixelement endlich. Daher ist $k(E)$ innerhalb eines Bandes invertierbar und die Energie ist eine strikt monotone Funktion von k zwischen $k = 0$ und $k = \frac{\pi}{l}$.

Die Gruppengeschwindigkeit von Wellenpaketen

$$v_{\text{Gruppe}} = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{1}{m} (\hbar k + u_k | Pu_k) \quad (6.67)$$

setzt sich zusammen aus dem Impuls, der vom Faktor e^{ikx} getragen wird und dem Impulserwartungswert innerhalb des Periodizitätsintervalls. Für Werte in der Nähe der unteren Bandkante ist er proportional zu k

$$u_k | Pu_k = \hbar k \left(\frac{m}{M} - 1 \right) + O(k^2), \quad (6.68)$$

an der oberen Bandkante kompensiert er den Impuls von e^{ikx}

$$u_{\frac{\pi}{l}} | Pu_{\frac{\pi}{l}} = - u_{-\frac{\pi}{l}} | Pu_{-\frac{\pi}{l}} = -\hbar \frac{\pi}{l}. \quad (6.69)$$

Die Funktionen u_k sind periodisch und lassen sich deshalb als Fourierreihe darstellen.

$$u_k(x) = \sum_n c_n e^{in \frac{2\pi}{l} x} \quad (6.70)$$

Die zugehörigen Eigenfunktionen $\psi_k(x) = \sqrt{\frac{l}{2\pi}} e^{ikx} u_k(x)$ mit $-\frac{\pi}{l} \leq k \leq \frac{\pi}{l}$ sind daher bezüglich k kontinuierlich normiert, wenn die Wellenfunktionen u_k im Periodizitätsintervall normiert sind.

$$\begin{aligned} \langle \Psi_k | \Psi_{k'} \rangle &= \frac{l}{2\pi} \int dx \left(e^{ikx} \sum_n c_n e^{in\frac{2\pi}{l}x} \right)^* \left(e^{ik'x} \sum_m c'_m e^{im\frac{2\pi}{l}x} \right) \\ &= l \sum_{m,n} c_n^* c'_m \delta(k' - k + (m - n) \frac{2\pi}{l}) \\ &= (l \sum_n c_n^* c'_n) \delta(k' - k) = \langle u_k | u'_k \rangle \delta(k' - k) . \end{aligned} \quad (6.71)$$

Gehören die Wellenfunktionen zum selben Band, so stimmen u_k und u'_k überein und mit $\langle u_k | u_k \rangle = 1$ folgt

$$\langle \Psi_k | \Psi_{k'} \rangle = \delta(k' - k) . \quad (6.72)$$

Gehören die Wellenfunktionen zu verschiedenen Bändern, so sind sie orthogonal, weil bei verschiedenen Bändern und gleichem k die Eigenzustände u_k und u'_k zu (6.63) mit verschiedenen Eigenwerten $E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ orthogonal zueinander sind.

Hat an der Bandkante $|\text{tr}A| - 2$ einen Nulldurchgang, so gibt es zwischen den Bändern Lücken. Diese Lücke verschwindet, wenn $|\text{tr}A| = 2$ ein lokales Maximum ist.

Zu jedem Energiewert im Band gehören zwei Eigenwerte e^{ikl} und e^{-ikl} . Die Dispersionsrelation $E(k) = E(-k)$ ist also eine gerade Funktion.

Betrachtet man einen festen Eigenwert $e^{ikl} = 1$ der Verschiebung (6.45), so gehören dazu abzählbar viele Energieeigenzustände mit nichtentarteten Energien. Diese Eigenzustände gehören zu den verschiedenen Bändern. Beim Eigenwert $e^{ikl} = 1$ ist die Energie nur dann entartet und dann zweifach entartet, wenn $A(E) = 1$ ist.

Kapitel 7

zusammengesetzte Systeme

7.1 Produktraum

Häufig ist ein quantenmechanisches System aus identifizierbaren Teilen zusammengesetzt, zum Beispiel aus zwei verschiedenen Teilchen, deren Eigenschaften getrennt gemessen werden können. Dann ist der Hilbertraum \mathcal{H} ein Produktraum

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \quad (7.1)$$

und besitzt eine Orthonormalbasis $\Lambda_{i,\alpha} = \Lambda_i \otimes \Lambda_\alpha$, wobei i eine Orthonormalbasis Λ_i von \mathcal{H}_1 und α eine Orthonormalbasis Λ_α von \mathcal{H}_2 abzählt. Zustände Ψ im Produktraum haben Komponenten

$$\psi_{i,\alpha} = \langle \Lambda_{i,\alpha} | \Psi \rangle \quad (7.2)$$

Können die Komponenten $\psi_{i,\alpha}$ als Produkt $u_i v_\alpha$ geschrieben werden, hat also die Matrix $\psi_{i,\alpha}$ den Rang 1, so ist $\Psi = \mathbf{u} \otimes \mathbf{v}$ ein Produktzustand mit $\mathbf{u} = \sum_i \Lambda_i u_i$ und $\mathbf{v} = \sum_\alpha \Lambda_\alpha v_\alpha$. Allgemeiner sind Zustände in Produkträumen Summen von Produktvektoren. Zustände, die keine Produktzustände sind, nennt man verschränkte Zustände. Alle Mehrteilchenzustände identischer Bosonen oder Fermionen, die wie zum Beispiel Slater-Determinanten (5.66) aus verschiedenen Einteilchenzuständen zusammengesetzt sind, sind verschränkt.

Der Index i zählt Meßwerte a_i am ersten Teilsystem ab, der Index α zählt Meßwerte b_α am zweiten Teilsystem ab. Repräsentiere der Operator A einen Meßapparat, der das erste Teilsystem vermißt, der also \mathcal{H}_1 auf \mathcal{H}_1 abbildet, und repräsentiere B einen Meßapparat des zweiten Teilsystems, dann ist ihr direktes Produkt $A \otimes B$ durch die Matricelemente

$$(A \otimes B)_{i,\alpha; j,\beta} = A_{ij} B_{\alpha\beta} \quad (7.3)$$

definiert. Sie wirken auf Produktzuständen $u \otimes v$ durch

$$(A \otimes B)(u \otimes v) = (Au) \otimes (Bv) \quad (7.4)$$

und sind auf Summen von Produktzuständen, auf verschränkten Zuständen also, durch Linearität erklärt.

Operatoren des zusammengesetzten Systems $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ von der Form $A \otimes \mathbb{1}$ entsprechen den Messungen am ersten Teilsystem, die Operatoren von der Form $\mathbb{1} \otimes B$ den Messungen am zweiten Teilsystem

$$(A \otimes \mathbb{1})\Lambda_{i,\alpha} = a_i \Lambda_{i,\alpha} \otimes \mathbb{1}, \quad (\mathbb{1} \otimes B)\Lambda_{i,\alpha} = \mathbb{1} \otimes b_\alpha \Lambda_{i,\alpha} \quad (7.5)$$

Ihre Meßwerte sind entartet, der Entartungsgrad jedes Eigenwerts a_i von $A \otimes \mathbb{1}$ ist ein Vielfaches der Dimension von \mathcal{H}_2 , der Entartungsgrad der Eigenwerte b_α von $\mathbb{1} \otimes B$ ist ein Vielfaches der Dimension von \mathcal{H}_1 .

7.2 Addition von Drehimpulsen

Betrachten wir das quantenmechanische System, daß von zwei Spin-1/2-Teilchen gebildet wird, die sich einfachshalber nicht bewegen können. Der Hilbertraum der Einteilchenzustände wird dann einfach von Basiszuständen Λ_\uparrow und Λ_\downarrow aufgespannt. Eine Basis des Produktraumes der Zweiteilchenzustände ist

$$\Lambda_{\uparrow\uparrow}, \Lambda_{\uparrow\downarrow}, \Lambda_{\downarrow\uparrow}, \Lambda_{\downarrow\downarrow}. \quad (7.6)$$

Die Basis ist so gewählt, daß die Spinoperatoren für das erste und zweite Teilchen \vec{S}_1 und \vec{S}_2 durch Multiplikation mit den Paulimatrizen wirken.

$$\vec{S}_1 \Lambda_{ij} = \frac{\hbar}{2} \Lambda_{kj} \vec{\sigma}_{ki}, \quad \vec{S}_2 \Lambda_{ij} = \frac{\hbar}{2} \Lambda_{ik} \vec{\sigma}_{kj}. \quad (7.7)$$

Alle Spinoperatoren des ersten Teilchens vertauschen mit allen Spinoperatoren des zweiten Teilchen.

$$[S_{1a}, S_{2b}] = 0 \quad a, b \in \{1, 2, 3\} \quad (7.8)$$

Daher sind die Summen $S_a = S_{1a} + S_{2a}$ Komponenten von Drehimpulsoperatoren, die die Drehimpulsalgebra (4.45) erfüllen.

$$[S_a, S_b] = i\hbar \epsilon_{abc} S_c \quad (7.9)$$

Das Spektrum von $S_3 = S_{13} + S_{23}$ läßt sich unmittelbar ablesen

$$S_3 \Lambda_{\uparrow\uparrow} = \hbar \Lambda_{\uparrow\uparrow}, \quad S_3 \Lambda_{\downarrow\uparrow} = 0 \hbar \Lambda_{\downarrow\uparrow}, \quad S_3 \Lambda_{\uparrow\downarrow} = 0 \hbar \Lambda_{\uparrow\downarrow}, \quad S_3 \Lambda_{\downarrow\downarrow} = -\hbar \Lambda_{\downarrow\downarrow}. \quad (7.10)$$

Demnach gehört $\Lambda_{\uparrow\uparrow}$ zu einem Drehimpulsmultiplett mit Gesamtspin $s = 1$, denn den Gesamtspin s kann man am höchsten S_3 -Eigenwert ablesen (4.59). Ebenso gehört der Zustand $\Lambda_{\downarrow\downarrow}$ mit niedrigstem S_3 -Eigenwert $-\hbar$ zu Gesamtspin $s = 1$. Den Zustand mit $s = 1$ und S_3 -Eigenwert 0 erhält man mit einem Faktor $\sqrt{1(1+1) - 1(1-1)} = \sqrt{2}$ (4.48) durch Anwenden des Leiteroperators S_- auf $\Lambda_{\uparrow\uparrow}$

$$S_- \Lambda_{\uparrow\uparrow} = (S_{1-} + S_{2-}) \Lambda_{\uparrow\uparrow} = \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2} - 1)} (\Lambda_{\downarrow\uparrow} + \Lambda_{\uparrow\downarrow}) \quad (7.11)$$

$$\Lambda_{s=1, s_3=1} = \Lambda_{\uparrow\uparrow}, \quad \Lambda_{s=1, s_3=0} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Lambda_{\downarrow\uparrow} + \Lambda_{\uparrow\downarrow}), \quad \Lambda_{s=1, s_3=-1} = \Lambda_{\downarrow\downarrow}. \quad (7.12)$$

Diese drei Basisvektoren spannen ein Gesamtspin-1-Multiplett auf. Weitere Gesamtdrehimpulsmultipletts sind als Eigenzustände von S^2 senkrecht zu diesem Gesamtspin-1-Multiplett, wenn sie zu anderem Gesamtspin gehören, oder können senkrecht zu diesem Gesamtspin-1-Multiplett gewählt werden. Sie sind demnach in unserem Beispiel aufgespannt vom Zustand

$$\Lambda_{s=0, s_3=0} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Lambda_{\downarrow\uparrow} - \Lambda_{\uparrow\downarrow}). \quad (7.13)$$

Er ist S_3 -Eigenzustand zum Eigenwert 0. Da der Gesamtspin in einem Drehimpulsmultiplett am höchsten und am niedrigsten S_3 -Eigenwert ablesbar ist, gehört dieser Zustand zu Gesamtspin 0. Dies kann man leicht nachprüfen, denn S_3 , S_+ und S_- verschwinden auf diesem Zustand.

Die Zustände $\Lambda_{s=0, s_3=0}$ und $\Lambda_{s=1, s_3=0}$ sind verschränkt.

7.3 unabhängig zusammengesetzte Gemische

Gemische ρ von zusammengesetzten Systemen sind unabhängig zusammengesetzt, falls für alle Messungen A an $\mathbb{1}$ am ersten Teilsystem und für alle Messungen $\mathbb{1}$ an B am zweiten Teilsystem gilt

$$w(a_i, b_\alpha, \rho) = w_1(a_i, \hat{\rho}) \cdot w_2(b_\alpha, \tilde{\rho}). \quad (7.14)$$

Hierbei ist $w(a_i, b_\alpha, \rho)$ die Wahrscheinlichkeit, daß a_i und b_α gemessen wird, $w_1(a_i, \hat{\rho}) = \sum_\alpha w(a_i, b_\alpha, \rho)$ die Wahrscheinlichkeit, daß a_i gemessen wird, und $w_2(b_\alpha, \tilde{\rho}) = \sum_i w(a_i, b_\alpha, \rho)$ die Wahrscheinlichkeit, daß b_α gemessen wird. Ist ein Gemisch nicht unabhängig zusammengesetzt, so nennen wir die Teilsysteme korreliert.

Analysieren wir, was es mathematisch bedeutet, daß Systeme unabhängig zusammengesetzt sind. Die Wahrscheinlichkeiten sind durch Hauptdiagonalelemente $\Lambda|\rho\Lambda$ (3.1) gegeben. Die Bedingung (7.14) muß für alle Λ gelten, die Eigenzustand eines Operators $A \in \mathbb{1}$ und eines Operators $\mathbb{1} \in B$ sind, daher muß (7.14) für alle Λ gelten, die Produktzustände $u \otimes v$ sind.

$$u_i^* v_\alpha^* \rho_{i,\alpha \ j,\beta} u_j v_\beta = u_i^* \left(\sum_\alpha \rho_{i,\alpha \ j,\alpha} \right) u_j \cdot v_\alpha^* \left(\sum_i \rho_{i,\alpha \ i,\beta} \right) v_\beta \quad (7.15)$$

Beide Seiten der Gleichung sind Bilinearformen in u und in v und sind für alle u und v genau dann gleich, wenn das Gemisch ein direktes Produkt von Gemischen ist.

$$\rho_{\text{unabhängig}} = \hat{\rho} \otimes \tilde{\rho} \quad (7.16)$$

$$\rho_{i,\alpha \ j,\beta} = (\hat{\rho})_{ij} (\tilde{\rho})_{\alpha\beta} \quad \text{mit} \quad (\hat{\rho})_{ij} = \sum_\alpha \rho_{i,\alpha \ j,\alpha} \quad \text{und} \quad (\tilde{\rho})_{\alpha\beta} = \sum_i \rho_{i,\alpha \ i,\beta} \quad (7.17)$$

Nur bei unabhängig zusammengesetzten Systemen gibt es keine Korrelationen von Wahrscheinlichkeiten für Meßwerte am ersten und am zweiten Teilsystem. Dann kann man sich auf ein Teilsystem beschränken und es in seinen Eigenschaften isoliert vom zweiten Teilsystem analysieren. In Abbildung (1.1) ist zum Beispiel zunächst zu prüfen, ob die Zusammenfassung von zwei Teilchen im Strahl zu einem Zweiteilchensystem nicht Korrelationen sichtbar macht, die bei einer Deutung, der Strahl enthalte wiederholt präparierte Einteilchenzustände, nicht erfaßt wird.

Sind die Systeme nicht unabhängig zusammengesetzt, so sind Meßergebnisse am ersten und zweiten Teilsystem korreliert. Im Extremfall kann man nach Messung am ersten Teilsystem vorhersagen, was am zweiten Teilsystem gemessen wird.

In der Formulierung „Durch die Messung am ersten Teilsystem wird die zweite Messung festgelegt“ erscheint solch eine Korrelation paradox, insbesondere wenn der Ausgang der ersten Messung am zweiten Meßapparat unbekannt ist und sich nicht ausgewirkt haben kann. Mit der Bezeichnung „Quantenteleportation“ wird eine nichtklassische, überlichtschnelle Übertragung von Quanteneigenschaften suggeriert. Die Bezeichnung unterstellt, die erste Messung sei Ursache für den zweiten Meßwert. Tatsächlich kann sogar rückwirkend, lange nach der ersten und der zweiten Messung aus dem Protokoll der ersten Messung erschlossen werden, was beim zweiten Meßapparat gemessen wurde.

Zustandsreduktion ist der Übergang von Wahrscheinlichkeiten zu bedingten Wahrscheinlichkeiten. Sie findet augenblicklich und auch im Nachhinein

statt, sobald der Ausgang der ersten Messung bekannt ist. Die erste Messung verursacht aber nicht den zweiten Meßwert. Die Korrelation der Meßwerte ergibt sich, weil die beiden Teilsysteme nicht unabhängig hergestellt worden sind.

Die Sprechweise, die erste Messung habe das Ergebnis der zweiten festgelegt, widerspricht der Quantenmechanik. Die Quantenmechanik kennt keinen Grund für die Wahrscheinlichkeitsverteilung (1.1) von Meßwerten. Gäbe es einen Grund und wäre der Meßwert wie in der klassischen Physik vorherbestimmt, so wäre der Zustand Ψ eine unvollständige Beschreibung des zu vermessenden physikalischen Systems.

Zu den überraschenden Eigenschaften korreliert zusammengesetzter Systeme gehört, daß ein reiner, verschränkter Zustand Ψ gemischt erscheint, wenn man nur am ersten Teilsystem mißt. Unvollständige Messung wirkt wie Unkenntnis des zu vermessenden Systems.

$$w_1(a_i, \Psi) = \sum_{\alpha} w(a_i, b_{\alpha}, \Psi) = \sum_{\alpha} |\Lambda_{i,\alpha} \Psi|^2 = \sum_{\alpha} |\psi_{i,\alpha}|^2 \quad (7.18)$$

Bei allen Messungen am ersten Teilsystem erhält man also Wahrscheinlichkeitsverteilungen wie von der Dichtematrix

$$(\hat{\rho})_{ij} = \sum_{\alpha} \psi_{i,\alpha} \psi_{j,\alpha}^* \quad (7.19)$$

Diese Dichtematrix entspricht nur dann einem reinen Zustand u des ersten Teilsystems

$$\sum_{\alpha} \psi_{i,\alpha} \psi_{j,\alpha}^* = u_i u_j^* , \quad (7.20)$$

wenn Ψ ein Produktzustand ist. Aus (7.20) folgt nämlich mit der Definition $v_{\beta} = \sum_i u_i^* \psi_{i\beta}$ und wegen der Normierung von Ψ , daß u und v normiert sind. Zudem folgt aus (7.20) $\sum_{\beta} \psi_{i\beta} v_{\beta}^* = u_i$ und

$$\sum_{\beta} (\psi_{i\beta} - u_i v_{\beta}) (\psi_{j\beta}^* - u_j^* v_{\beta}^*) = 0 . \quad (7.21)$$

Für $i = j$ ist dies eine Summe über Betragsquadrate. Sie verschwindet nur, falls $\psi_{i\alpha} = u_i v_{\alpha}$ gilt, wenn also $\Psi = u \cdot v$ ein Produktzustand ist.

Kapitel 8

Grundlagen der Thermodynamik

8.1 Entropie

Fehlende Polarisierung (4.74) oder Größen wie $1 - (\text{tr } \rho^2)$ können als Maß dafür verwendet werden, wie sehr der präparierte Zustand von einem reinen Zustand abweicht. Ein günstigeres Maß für die Unkenntnis über den präparierten Zustand ist die Entropie S . Sie addiert sich beim unabhängigen Zusammensetzen zweier Systeme, ändert sich nicht während der Schrödingerschen Zeitentwicklung und nimmt beim Mischen und bei zufälligen Störungen zu.

Die Unkenntnis oder Entropie ist als Funktion der Eigenwerte ρ_i der Dichtematrix definiert

$$S = - \sum_i \rho_i \ln \rho_i = -\text{tr } \rho \ln \rho . \quad (8.1)$$

Die Funktion $x \ln x$ ist für $x = 0$ stetig ergänzt und verschwindet dort. Die Entropie ist nichtnegativ, da die Eigenwerte ρ_i der Dichtematrix zwischen Null und Eins variieren. Die Entropie eines reinen Zustands verschwindet.

Ist ein Gemisch unabhängig aus zwei Teilen zusammengesetzt

$$\rho = \hat{\rho} \cdot \tilde{\rho} , \quad (8.2)$$

so sind die Eigenzustände Produktzustände $\hat{\gamma}_i \cdot \tilde{\gamma}_j$ von Eigenzuständen der Dichtematrizen $\hat{\rho}$ und $\tilde{\rho}$. Die Eigenwerte der zusammengesetzten Dichtematrix sind die Produkte der Eigenwerte der einzelnen Dichtematrizen

$$\rho_{ij} = \hat{\rho}_i \tilde{\rho}_j , \quad \sum_i \hat{\rho}_i = 1 , \quad \sum_j \tilde{\rho}_j = 1 . \quad (8.3)$$

Daher addiert sich die Entropie unabhängig zusammengesetzter Systeme.

$$\begin{aligned} S &= - \sum_{ij} \hat{\rho}_i \tilde{\rho}_j \ln(\hat{\rho}_i \tilde{\rho}_j) = - \sum_{ij} (\hat{\rho}_i \tilde{\rho}_j \ln \hat{\rho}_i + \hat{\rho}_i \tilde{\rho}_j \ln \tilde{\rho}_j) \\ &= - \left(\sum_j \tilde{\rho}_j \right) \sum_i \hat{\rho}_i \ln \hat{\rho}_i - \left(\sum_i \hat{\rho}_i \right) \sum_j \tilde{\rho}_j \ln \tilde{\rho}_j = \hat{S} + \tilde{S} \end{aligned} \quad (8.4)$$

Die Dichtematrix ändert sich im Laufe der Zeit (6.5), allerdings ändern sich nicht die Eigenwerte ρ_i durch die Schrödingersche Zeitentwicklung. Überträgt man in (4.80) angemessen die Notation, so folgt nämlich aus (4.80), (6.5) und der Eigenwertgleichung $\rho \Upsilon_i = \rho_i \Upsilon_i$, daß $\partial_t \rho_i(t) = 0$, denn in Eigenzuständen eines hermiteschen Operators ρ verschwindet der Erwartungswert jedes Kommutators $[H, \rho]$.

$$i\hbar \partial_t \rho_i(t) = i\hbar \langle \Upsilon_i | \partial_t \rho(t) | \Upsilon_i \rangle = \langle \Upsilon_i | (H\rho - \rho H) | \Upsilon_i \rangle = \langle \Upsilon_i | (H\rho_i - \rho_i H) | \Upsilon_i \rangle = 0 \quad (8.5)$$

Demnach bleibt die Entropie unverändert, solange sich die Zustände im Gemisch nach der Schrödingergleichung entwickeln.

Bei echtem Mischen von Gemischen wächst die Entropie. Ist ein Gemisch $\rho(\lambda)$ aus verschiedenen Gemischen $\hat{\rho}$ und $\tilde{\rho}$, $\hat{\rho} + \tilde{\rho}$, gemischt

$$\rho(\lambda) = \lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho} \quad \text{mit} \quad 0 < \lambda < 1, \quad (8.6)$$

so ist Entropie $S(\rho(\lambda))$ um die Mischungsentropie größer als die anteilige Summe der Entropien.

$$S(\rho(\lambda)) > \lambda S(\hat{\rho}) + (1 - \lambda) S(\tilde{\rho}). \quad (8.7)$$

Bevor wir diese Behauptung zeigen, zwei Vorbemerkungen:

Wenn $\hat{\rho} + \tilde{\rho}$ und $\lambda + \lambda'$ ist, so ist auch $\rho(\lambda) + \rho(\lambda')$.

Der Nullraum von $\rho(\lambda)$ hängt für $0 < \lambda < 1$ nicht von λ ab. Für jedes gewählte λ verschwinden nämlich im Nullraum von $\rho(\lambda)$ auch $\hat{\rho}$ und $\tilde{\rho}$ und demnach auch $\rho(\lambda')$.

$$\begin{aligned} \Lambda | (\lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho}) \Lambda = 0 &\Rightarrow \Lambda | \hat{\rho} \Lambda = 0 \text{ und } \Lambda | \tilde{\rho} \Lambda = 0 \\ &\Rightarrow \hat{\rho} \Lambda = 0 \text{ und } \tilde{\rho} \Lambda = 0 \end{aligned}$$

Die erste Implikation folgt, weil λ und $(1 - \lambda)$ größer Null und Hauptdiagonalelemente von Dichtematrizen nichtnegativ (3.5) sind. Die zweite Implikation gilt, weil Hauptdiagonalelemente $\Lambda | \rho \Lambda$ einer Dichtmatrix ρ nur verschwinden, wenn $\rho \Lambda$ verschwindet (3.6).

Nach diesen Vorbemerkungen beweisen wir für verschiedene Dichtematrizen ρ und ρ' , $\rho \neq \rho'$, wobei ρ' nichtverschwindende Eigenwerte habe, den Hilfssatz

$$\text{tr } \rho \ln \rho' < \text{tr } \rho \ln \rho . \quad (8.8)$$

Werten wir nämlich die Spur in der Eigenbasis Υ_i von ρ aus und schieben wir eine Zerlegung der Eins mit den Eigenzuständen Υ'_i von ρ' ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \text{tr } \rho (\ln \rho' - \ln \rho) &= \sum_{ij} \langle \Upsilon_i | \rho | \Upsilon'_j \rangle \langle \Upsilon'_j | (\ln \rho' - \ln \rho) | \Upsilon_i \rangle \\ &= \sum_{ij} |\langle \Upsilon_i | \Upsilon'_j \rangle|^2 \rho_i (\ln \rho'_j - \ln \rho_i) \\ &= \sum_{ij} |\langle \Upsilon_i | \Upsilon'_j \rangle|^2 \rho_i \ln \frac{\rho'_j}{\rho_i} . \end{aligned}$$

Es gilt für positive x die Abschätzung $\ln x \leq (x - 1)$, wobei Gleichheit nur für $x = 1$ auftritt. Wenn die Matrizen ρ und ρ' verschieden sind, gibt es mindestens ein Paar von Eigenwerten ρ'_j und ρ_i , $\rho'_j \neq \rho_i$, mit Eigenvektoren Υ'_j und Υ_i , deren Skalarprodukt nicht verschwindet.

Also folgt der Hilfssatz

$$\begin{aligned} \text{tr } \rho (\ln \rho' - \ln \rho) &< \sum_{ij} |\langle \Upsilon_i | \Upsilon'_j \rangle|^2 \rho_i \left(\frac{\rho'_j}{\rho_i} - 1 \right) = \sum_{ij} |\langle \Upsilon_i | \Upsilon'_j \rangle|^2 (\rho'_j - \rho_i) = \\ &= \sum_{ij} \langle \Upsilon'_j | \rho' | \Upsilon_i \rangle \langle \Upsilon_i | \Upsilon'_j \rangle - \sum_{ij} \langle \Upsilon'_j | \rho | \Upsilon_i \rangle \langle \Upsilon_i | \Upsilon'_j \rangle = \text{tr } \rho' - \text{tr } \rho = 0 . \end{aligned}$$

Wenn $\hat{\rho} = \tilde{\rho}$ und $0 < \lambda < 1$ ist, so ist auch $\hat{\rho} = \rho(\lambda) = \tilde{\rho}$. Wir verwenden den Hilfssatz, wobei wir für ρ' die Dichtematrix $\rho(\lambda)$ einsetzen und für ρ die Matrizen $\hat{\rho}$ und $\tilde{\rho}$. Dabei nehmen wir die Spur über den Unterraum, der orthogonal zum Nullraum von $\rho(\lambda)$ ist.

Aus dem Hilfssatz folgen dann die Ungleichungen

$$\text{tr } \hat{\rho} \ln(\lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho}) < \text{tr } \hat{\rho} \ln \hat{\rho} , \quad (8.9)$$

$$\text{tr } \tilde{\rho} \ln(\lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho}) < \text{tr } \tilde{\rho} \ln \tilde{\rho} . \quad (8.10)$$

Multiplizieren wir Ungleichung (8.9) mit λ , $0 < \lambda < 1$, und Ungleichung (8.10) mit $(1 - \lambda)$ und addieren wir, so erhalten wir

$$\text{tr } (\lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho}) \ln(\lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho}) < \lambda \text{tr } \hat{\rho} \ln \hat{\rho} + (1 - \lambda) \text{tr } \tilde{\rho} \ln \tilde{\rho} \quad (8.11)$$

Drehen wir schließlich das Vorzeichen um, so erhalten wir für die Entropie von Mischungen von $\hat{\rho}$ mit $\tilde{\rho}$, $\hat{\rho} \cdot = \tilde{\rho}$, für $0 < \lambda < 1$

$$S(\rho(\lambda)) > \lambda S(\hat{\rho}) + (1 - \lambda)S(\tilde{\rho}) . \quad (8.12)$$

Die Entropie eines Gemisches ist größer als die anteilige Summe der Entropien der Bestandteile. Entropie nimmt durch Mischen zu.

$$S(\rho(\lambda)) > \frac{\lambda_2 - \lambda}{\lambda_2 - \lambda_1} S(\rho(\lambda_1)) + \frac{\lambda - \lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} S(\rho(\lambda_2)) \quad (8.13)$$

Das Gemisch $\rho(\lambda)$ läßt sich aus Gemischen $\rho(\lambda_1)$ und $\rho(\lambda_2)$ mit benachbarten Mischungsparametern $0 \leq \lambda_1 < \lambda < \lambda_2 \leq 1$ mischen.

$$\rho(\lambda) = \frac{\lambda_2 - \lambda}{\lambda_2 - \lambda_1} \rho(\lambda_1) + \frac{\lambda - \lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \rho(\lambda_2) \quad (8.14)$$

Demnach ist die Entropie $S(\rho(\lambda))$ eine konvexe Funktion des Mischungsparameters λ .

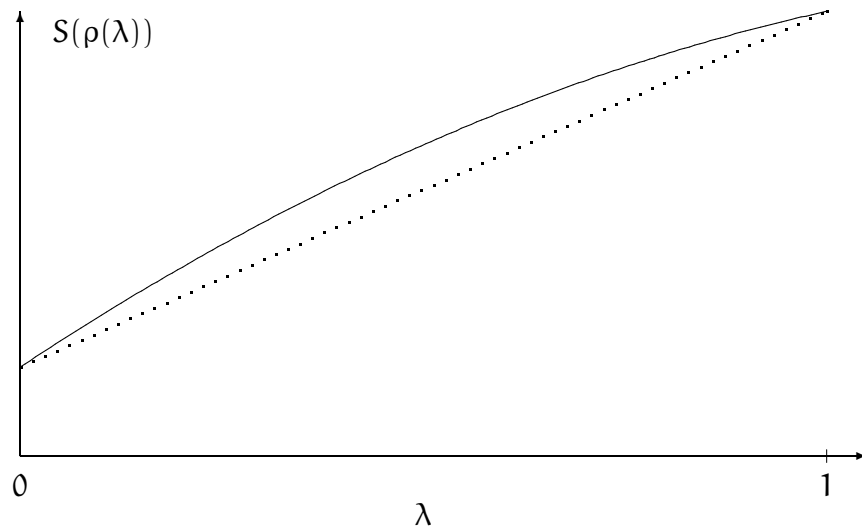


Abbildung 8.1: Entropie als konvexe Funktion des Mischungsparameters

Zufällige Störung der Zeitentwicklung ist ein Mischprozeß und erhöht die Entropie. Stellen wir uns in Abbildung (1.1) vor, daß die Teilchen im Strahl durch ein unvollkommenes Vakuum fliegen, und berücksichtigen wir nur die beiden Alternativen, daß mit Wahrscheinlichkeit λ kein Atom des Restgases den Strahl stört und daß mit Wahrscheinlichkeit $(1 - \lambda)$ ein Atom den Strahl

stört. Bezeichnen wir die Gemische, die sich ohne und mit Störung entwickeln als $\hat{\rho}$ und $\tilde{\rho}$, so liegt am Eingang des Meßapparates das Gemisch $\lambda\hat{\rho} + (1-\lambda)\tilde{\rho}$ vor, falls die Störung durch das Restatom zufällig, also unabhängig von der Präparation in der Quelle, erfolgt.

8.2 Gleichgewicht

Wenn in Abbildung (1.1) das zu vermessende System vor der Messung wieder und wieder gestört worden ist, hängen die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Meßwerte $w(\mathbf{a}_i, \rho(\mathbf{t}))$ nicht mehr davon ab, wann gemessen wird. Nach der von-Neumann-Gleichung (6.5) vertauscht in solch einer Situation die Dichtematrix ρ mit dem Hamiltonoperator

$$i\hbar\partial_t\rho(\mathbf{t}) = [\mathbf{H}, \rho] = 0 \quad (8.15)$$

und beide haben gemeinsame Eigenzustände Λ_i

$$\mathbf{H}\Lambda_i = E_i\Lambda_i, \quad \rho\Lambda_i = \rho_i\Lambda_i. \quad (8.16)$$

Da bei jeder vorhergehenden Störung die Entropie zugenommen hat, erwartet man, solche Gemische ρ zu finden, in denen die Entropie so groß wie möglich geworden ist. Solche zeitunabhängige Gemische, deren Entropie so groß wie möglich ist, definieren thermodynamisches Gleichgewicht.

Wird zum Beispiel Energie des Gemisches mit der Umgebung so ausgetauscht, daß der Mittelwert den festen Wert E hat, so ist im thermodynamischen Gleichgewicht die Entropie als Funktion der Eigenwerte ρ_i maximal, wobei die Eigenwerte ρ_i den Nebenbedingungen $\sum_i \rho_i = 1$ und $\sum_i \rho_i E_i = E$ unterworfen sind. Wir berücksichtigen die Nebenbedingungen mit Lagrange-schen Multiplikatoren α und β und maximieren

$$S = - \sum_j \rho_j \ln \rho_j + \alpha(1 - \sum_j \rho_j) + \beta(E - \sum_j \rho_j E_j). \quad (8.17)$$

Ableiten nach α und β ergibt die Nebenbedingungen und Ableiten nach ρ_i führt auf

$$0 = -(\ln \rho_i + 1) - \alpha - \beta E_i. \quad (8.18)$$

Demnach ist ρ_i durch die Boltzmannverteilung gegeben.

$$\rho_{\text{Boltzmann } i} = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \quad (8.19)$$

Den Normierungsfaktor bestimmt man aus der Nebenbedingung $\sum_i \rho_i = 1$. Z ist die Zustandssumme.

$$Z(\beta) = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (8.20)$$

Die Zustandssumme ist die Laplacetransformierte der Dichte der Energie-eigenzustände. Der Parameter β ist die inverse Temperatur

$$\beta = \frac{1}{T}, \quad (8.21)$$

die man aus der Nebenbedingung $\sum_i \rho_i E_i = \bar{E}$ als Funktion des Energieerwartungswertes \bar{E} implizit bestimmen kann.

$$\bar{E} = \sum_i \rho_i E_i = \frac{1}{Z} \sum_i e^{-\beta E_i} E_i = -\frac{1}{Z} \partial_\beta \sum_i e^{-\beta E_i} = -\partial_\beta \ln Z(\beta) \quad (8.22)$$

Der Logarithmus der Zustandssumme als Funktion von β ist eine Funktion, deren Ableitung den Energieerwartungswert bestimmt.

Die Entropie der Boltzmannverteilung hängt eng mit der Zustandssumme und dem Energiemittel zusammen.

$$S = -\sum_i \rho_i \ln \rho_i = -\sum_i \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} (-\beta E_i - \ln Z) = \beta \bar{E} + \ln Z \quad (8.23)$$

Mit der freien Energie $F = \bar{E} - TS$ gilt daher

$$Z = e^{-\beta F} \quad (8.24)$$

und die Boltzmannverteilung schreibt sich als

$$\rho_i = e^{-\beta(E_i - F)} \quad (8.25)$$

Die Wahrscheinlichkeiten ρ_i hängen nur von Energiedifferenzen und nicht vom absoluten Wert der Energie ab. Auch thermodynamisch ist der Wert der Grundzustandsenergie irrelevant. Die Behauptung „Kaltes Helium verfestigt sich nicht, weil die Grundzustandsenergie nicht verschwindet“ ist falsch.

Wenn kein Wärmebad den mittleren Energieinhalt des Systems ρ einstellt, fehlt in Gleichung (8.17) der Lagrangesche Multiplikator mit β und die Überlegungen laufen so ab wie mit $\beta = 0$. Die Entropie wird maximal bei Gleichverteilung $\rho_i = 1/N$, wobei N die Dimension des Hilbertraumes ist. Daher hat die Entropie den Wert

$$S = \ln N \quad (8.26)$$

Ist die Dimension N unendlich, gibt es keinen Zustand maximaler Entropie.

Wichtige Spezialfälle von Systemen im thermischen Gleichgewicht sind der harmonische Oszillator und das Zweizustandssystem. Wählt man eine verschwindende Grundzustandsenergie, so lautet die Energieformel für den harmonischen Oszillator

$$E_n = n \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (8.27)$$

Für das Zweizustandssystem hat E_n dieselbe Form, aber n durchläuft nur die Werte 0 und 1. Dies sind die Energien von freien, identischen Bosonen

und Fermionen. $\epsilon = \hbar\omega$ ist die Energie eines Teilchens. Ein Zustand mit mehreren Teilchen hat die mehrfache Einteilchenenergie, da die Teilchen frei sind. Das Pauli-Verbot verbietet $n \geq 2$ bei Fermionen.

Die Zustandssumme des harmonischen Oszillators ist eine geometrische Reihe,

$$Z_{\text{Boson}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \epsilon n} = \frac{1}{1 - e^{-\beta \epsilon}} \quad (8.28)$$

die Zustandssumme des Zweizustandssystems ist so einfach, wie sie nicht einfacher sein kann.

$$Z_{\text{Fermion}} = 1 + e^{-\beta \epsilon} \quad (8.29)$$

Den Energieerwartungswert bestimmt man mit (8.22).

$$\langle E \rangle_{\text{Boson}} = \frac{\epsilon}{e^{\beta \epsilon} - 1} \quad \langle E \rangle_{\text{Fermion}} = \frac{\epsilon}{e^{\beta \epsilon} + 1} \quad (8.30)$$

Kompliziertere Systeme bestehen oft aus mehreren, verschiedenen Bosonen und Fermionen, zum Beispiel aus Photonen mit unterschiedlichem Wellenvektor \vec{k} , die wechselwirkungsfrei aus Teilsystemen zusammengesetzt sind.

Wir bezeichnen genauer ein System als frei zusammengesetzt, wenn der Hilbertraum ein Produktraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ist und wenn der Hamiltonoperator $H = H_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes H_2$ sich aus Hamiltonoperatoren der Teilräume zusammensetzt. Dann gibt es Energieeigenzustände $\Lambda_{i,\alpha}$, wobei i eine Basis von \mathcal{H}_1 und α eine Basis von \mathcal{H}_2 abzählt, deren Energie sich aus den Teilenergien zusammensetzt.

$$E_{i,\alpha} = E_1(i) + E_2(\alpha) \quad (8.31)$$

Die Zustandssumme des Gesamtsystems ist in solch einem Fall das Produkt der einzelnen Zustandssummen

$$Z = \sum_{i,\alpha} e^{-\beta(E_1(i) + E_2(\alpha))} = \sum_i e^{-\beta E_1(i)} \sum_{\alpha} e^{-\beta E_2(\alpha)} = Z_1 Z_2, \quad (8.32)$$

und die Energieerwartungswerte addieren sich.

$$\langle E \rangle = \langle E_1 \rangle + \langle E_2 \rangle \quad (8.33)$$

Kapitel 9

Zerfall eines instabilen Teilchens

9.1 Lorentzresonanz

Wir betrachten einen Hamiltonoperator mit kontinuierlichen Energien und kontinuumsnormierten Energieeigenzuständen $\Lambda_{E,p}$

$$H\Lambda_{E,p} = E\Lambda_{E,p} \quad \Lambda_{E,p}|\Lambda_{E',p'} = \delta(E - E')\delta(p - p') . \quad (9.1)$$

Die Variable p unterscheidet energieentartete Zustände. Stellen wir Zustände $\Psi(t)$, die die Schrödingergleichung erfüllen, als Linearkombination dieser kontinuierlichen Basis dar, so hat $\Psi(t)$ folgende Form

$$\Psi(t) = \int dE dp \Lambda_{E,p} \psi(E, p) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}, \quad \psi(E, p) = \langle \Lambda_{E,p} | \Psi(0) \rangle . \quad (9.2)$$

Ein Meßapparat, der nachprüft, ob der normierte Anfangszustand $\Psi(0)$ vorhanden ist, findet zur Zeit t diesen Zustand mit der Wahrscheinlichkeit

$$w(t) = |a(t)|^2 , \quad (9.3)$$

$$a(t) = \langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle = \int dE F(E)^2 e^{-\frac{i}{\hbar} Et} , \quad (9.4)$$

wobei wir die Bezeichnung

$$F(E)^2 = \int dp |\langle \Lambda_{E,p} | \Psi(0) \rangle|^2 \quad (9.5)$$

benutzen.

Diese Wahrscheinlichkeit nimmt mit der Zeit t exponentiell ab, wenn es sich bei dem Zustand um eine Lorentzresonanz handelt.

$$F_{\text{Lorentz}}(E) = \left| \sqrt{\frac{\Gamma}{2\pi}} \frac{1}{(E - E_0) + i\frac{\Gamma}{2}} \right| \quad (9.6)$$

Es sind E_0 die Resonanzenergie und $\Gamma > 0$ die Breite der Resonanzkurve. Allerdings sind Resonanzenergie und Breite nicht als Energieerwartungswert $\langle H \rangle$ und Energieunschärfe ΔH definiert. Diese Größen divergieren, weil die Funktion $F(E)$ nicht schnell genug abfällt (vergleiche Abschnitt (4.2)). Es erfüllt $\Psi(t) = \exp(-iHt/\hbar)\Psi(0)$ die integrierte Schrödingergleichung, aber $\Psi(t)$ ist zu keinem Zeitpunkt differenzierbar, $\langle H\Psi(t) \rangle$ divergiert.

Man kann die Amplitude

$$a_{\text{Lorentz}}(t) = \frac{\Gamma}{2\pi} \int dE \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}{(E - E_0)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \quad (9.7)$$

mit dem Residuensatz auswerten, weil man für positive (negative) Zeiten den Integrationsweg in der unteren (oberen) komplexen Halbebene schließen kann, und erhält

$$a_{\text{Lorentz}}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t} e^{-\frac{\Gamma|t|}{2\hbar}}. \quad (9.8)$$

Es nimmt also die Wahrscheinlichkeit $w(t)$, zur Zeit $t > 0$ die Lorentzresonanz noch vorzufinden, exponentiell ab.

$$w_{\text{Lorentz}}(t) = e^{-t/\tau} \quad \text{für} \quad t > 0 \quad (9.9)$$

Die Lebensdauer ist die inverse Breite $\tau = \hbar/\Gamma$, was als Unschärferelation

$$\Delta t \Delta E \approx \hbar/2 \quad (9.10)$$

gelesen wird. Diese Unschärferelation ist allerdings problematisch: ΔE divergiert und nicht t wird gemessen sondern die Eigenschaft, zur Zeit t noch die Lorentzresonanz $\Psi(0)$ zu sein.

Die Breite Γ ist die Zerfallrate des exponentiell zerfallenden Zustandes

$$\Gamma = -\hbar \frac{1}{w(t)} \frac{d}{dt} w(t). \quad (9.11)$$

Der Gleichung (9.4) entnimmt man, daß die Phase von $\psi(E, p)$ ohne Bedeutung ist. Dies ist verständlich, denn jede kontinuumsnormierte Basis $\Lambda'_{E,p} = e^{i\varphi(E,p)} \Lambda_{E,p}$ mit beliebiger, reeller Funktion $\varphi(E, p)$ hätte ebenso gut verwendet werden können. Es gibt nämlich, anders als bei Ort und Impuls, keinen zum Hamiltonoperator konjugierten Operator T mit Vertauschungsrelation $[T, H] = i\hbar$. Solch ein Operator wäre in einer Energiebasis $T = i\hbar \partial_E$ und würde die relativen Phasen der Basis $\Lambda_{E,p}$ fixieren.

Ebenso ist das Vorzeichen von Γ ohne Bedeutung, wie man an (9.7) sieht. Die Zerfallsrate ist $|\Gamma|$.

9.2 Abweichungen vom exponentiellen Zerfall

Streng genommen gibt es keine Lorentzresonanz, weil jeder realistische Hamiltonoperator ein nach unten beschränktes Spektrum hat ($\psi(E, p) = 0$ für $E < E_{\min}$), und weil der Energieerwartungswert endlich sein muß. Die Lorentzresonanz ist also für kleine und große Energien unrealistisch. Es gibt auch streng genommen keinen exponentiellen Zerfall.

Es gibt keine Zustände, die der differentiellen Schrödingergleichung $i\hbar\partial_t\Psi = H\Psi$ genügen und die zu allen Zeiten einem exponentiellen Zerfallsgesetz genügen. Es ist nämlich $w(t)$ eine Wahrscheinlichkeit, die differenzierbar ist, wenn $\Psi(t)$ differenzierbar ist, und die zur Zeit $t = 0$ maximal ist, $w(0) = 1$. Daher verschwindet dann ihre Zeitableitung

$$\frac{d}{dt}w(t)|_{t=0} = 0 \quad (9.12)$$

und exponentieller Zerfall ist für kleine Zeiten unmöglich.

Alle Abweichungen vom exponentiellen Zerfall beruhen darauf, daß die Zerfallsprodukte wieder den ursprünglichen Zustand aufbauen. Dies sieht man mit folgender Zerlegung der Amplitude

$$a(t + t') = \langle \Psi(0) | \Psi(t + t') \rangle = \langle \Psi(0) | e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} e^{-\frac{i}{\hbar}Ht'} \Psi(0) \rangle. \quad (9.13)$$

Schiebt man zwischen die e-Funktionen eine Zerlegung der Eins

$$1 = |\Psi(0)\rangle \langle \Psi(0)| + \sum_n |\Upsilon_n\rangle \langle \Upsilon_n|, \quad (9.14)$$

wobei die Zustände Υ_n den Anfangszustand $\Psi(0)$ zu einer Orthonormalbasis ergänzen und für die Zerfallsprodukte stehen, so sieht man

$$a(t + t') = a(t)a(t') + \sum_n \langle \Psi(0) | e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \Upsilon_n \rangle \langle \Upsilon_n | e^{-\frac{i}{\hbar}Ht'} \Psi(0) \rangle. \quad (9.15)$$

Der letzte Term ist die Amplitude für Zerfall und Wiedererzeugung des Anfangszustandes. Verschwände dieser letzte Term, so ergäbe sich die Relation $a(t + t') = a(t)a(t')$, aus der exponentieller Zerfall folgte. Da die Zerfallsprodukte den Ort des Geschehens verlassen und da dabei ihre Dichte abnimmt, sollte man bei lokalen Wechselwirkungen vermuten, daß Abweichungen vom exponentiellen Zerfall nur bei Zeitauflösungen zu beobachten sind, die klein gegen die Flugdauer sind, innerhalb derer sich die Zerfallsprodukte so verdünnen, daß die Wiedererzeugung vernachlässigbar wird.

Auch für große Zeiten muß es Abweichungen vom exponentiellen Zerfall geben, falls der zerfallende Zustand durch Wirkung des Hamiltonoperators H während der Zeiten $t < 0$ erzeugt worden ist. Die Forderung, daß die Schrödingergleichung auch zu negativen Zeiten gegolten hat, ist allerdings nicht zwingend: was bei Präparation und Messung geschieht, hängt vom Aufbau der Quelle und des Meßapparates ab und wird nicht unbedingt durch den Hamiltonoperator H beschrieben (vergleiche Abschnitt (6.5)).

Akzeptieren wir aber (9.2) für alle Zeiten, so ist der Betrag der Amplitude $a(t)$ für positive Zeiten genau dann exponentiell abfallend und durch $Ce^{-t/\tau}$ mit positiven Konstanten C und τ beschränkt, wenn $|a(t)| < Ce^{-|t|/\tau}$ zu allen Zeiten gilt. In diesem Fall ist die Fouriertransformierte

$$\tilde{a}(E) = \int \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} a(t) \quad (9.16)$$

eine analytische Funktion komplexer Energien E im Streifen $|\Im(E)| < \hbar/\tau$, die zudem für reelle Energien $E = E^* < E_{\min}$ unterhalb der Minimalenergie verschwindet, wenn die Energie nach unten beschränkt ist. Daher muß $\tilde{a}(E)$ verschwinden. Dies steht aber im Widerspruch zu $a(t) = \int \frac{dE}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}Et} \tilde{a}(E)$ und $a(0) = 1$. Daher kann der Betrag der Amplitude $a(t)$ nicht exponentiell beschränkt sein sondern muß für große Zeiten langsamer abfallen.

9.3 Goldene Regel

Ein Energieeigenzustand kann nicht zerfallen, da aus $\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\Psi(0)$ für reelle Energie E sich $w(t) = 1$ ergibt. Herleitungen des exponentiellen Zerfallsgesetzes für einen Zustand, dem eine definierte Energie zugeschrieben wird, widersprechen sich daher selbst. Auch kann die Energie E keinen negativen Imaginärteil $\Gamma/2$ haben. Dies würde zwar zu $w(t) = e^{-\frac{\Gamma t}{\hbar}}$ führen und wird verwendet, um zerfallende Zustände zu parametrisieren ohne die Zerfallsprodukte beschreiben zu müssen. Ein Hamiltonoperator, der die Zeitentwicklung eines zerfallenden Zustandes vollständig beschreibt, muß aber auch die Zerfallsprodukte und ihre Zeitentwicklung beschreiben. Er muß hermitesch sein, damit $\Psi(t)$ zu allen Zeiten normiert bleibt, und kann nur reelle Eigenwerte haben.

Betrachten wir einen Hilbertraum, der von einem normierten Zustand Υ und von dazu orthogonalen, kontinuumsnormierten Basiszuständen $\Lambda_{E,p}$ mit $E \geq E_{\min}$ aufgespannt wird

$$\Upsilon|\Upsilon = 1, \quad \Upsilon|\Lambda_{E,p} = 0, \quad \Lambda_{E,p}|\Lambda_{E',p'} = \delta(E - E')\delta(p - p') . \quad (9.17)$$

Diese Basis sei der Zerlegung

$$H = H_0 + H_{\text{int}} \quad (9.18)$$

des Hamiltonoperators angepaßt und so gewählt, daß Υ ein normierter H_0 -Eigenzustand mit Eigenwert $E_0 > E_{\text{min}}$ im Kontinuum ist und daß $\Lambda_{E,p}$ zum Kontinuum von H_0 gehörende, verallgemeinerte Eigenzustände mit einem Entartungsindex p sind

$$H_0 \Upsilon = E_0 \Upsilon, \quad H_0 \Lambda_{E,p} = E \Lambda_{E,p}, \quad E \in E_{\text{min}}. \quad (9.19)$$

Konkreter kann man sich bei H_0 die Ruhenergie des zerfallenden Teilchens und die kinetischen Energien einschließlich Ruhenergie der Zerfallsprodukte mit kontinuierlicher kinetischer Energie der Relativbewegung vorstellen und bei p an Winkel denken, unter denen die Zerfallsprodukte auslaufen.

Wir betrachten die Amplitude

$$\Lambda_{E,p} | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Upsilon \quad (9.20)$$

für den Übergang des normierten H_0 -Eigenzustands Υ in dazu orthogonale, kontinuumsnormierte H_0 -Eigenzustände $\Lambda_{E,p}$ in niedrigster Ordnung in der Wechselwirkung H_{int} und entwickeln zu diesem Zweck $e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$ in eine Taylorreihe in $t H_{\text{int}}$. Die Koeffizienten der Reihe entnehmen wir durch wiederholtes Differenzieren der Relation

$$\partial_\lambda e^{A(\lambda)} = \int_0^1 dz e^{z A(\lambda)} \partial_\lambda A e^{(1-z) A(\lambda)}. \quad (9.21)$$

Diese Relation beweist man durch Entwickeln beider Seiten

$$\sum_n \frac{1}{n!} \sum_{l=0}^{n-1} A^{n-l-1} \partial_\lambda A A^l = \sum_k \frac{1}{k!} \sum_l \frac{1}{l!} \int dz z^k (1-z)^l A^k \partial_\lambda A A^l \quad (9.22)$$

mit der kombinatorischen Formel

$$\int_0^1 dz z^k (1-z)^l = \frac{k! l!}{(k+l+1)!}. \quad (9.23)$$

Entwickeln wir mit (9.21) den Zeitentwicklungsoperator $e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$ nach $H_{\text{int}} t$, so verschwindet die Übergangsamplitude in niedrigster Ordnung und ist bis auf Terme höherer Ordnung gegeben durch

$$\Lambda_{E,p} | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Upsilon = -\frac{i}{\hbar} t \Lambda_{E,p} | H_{\text{int}} \Upsilon \int_0^1 dz e^{-\frac{i}{\hbar} z t E} e^{-\frac{i}{\hbar} (1-z) t E_0} + \dots \quad (9.24)$$

Hierbei haben wir die H_0 -Eigenwertgleichungen verwendet.

In dieser Ordnung wird die Wiedererzeugung von Υ aus den Zerfallsprodukten und die Wechselwirkung der Zerfallsprodukte nicht erfaßt.

Die z -Integration ergibt

$$\Lambda_{E,p}|e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Upsilon = \Lambda_{E,p}|H_{\text{int}}\Upsilon \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}Et} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t}}{E - E_0} + \dots \quad (9.25)$$

Die Wahrscheinlichkeit, zur Zeit t einen Zustand $\Lambda_{E,p}$ im H_0 -Energiebereich Δ vorzufinden, ist durch das Betragsquadrat dieser Amplitude bestimmt und niedrigster Ordnung durch

$$w(\Delta, t) = \int_{\Delta} dE dp |\Lambda_{E,p}|H_{\text{int}}\Upsilon|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{t}{\hbar} \frac{(E-E_0)}{2}\right)}{\left(\frac{E-E_0}{2}\right)^2} \quad (9.26)$$

gegeben. Wegen (B.3) gilt für genügend große Zeiten t etwa

$$\frac{w(\Delta, t)}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} \int dE dp |\Lambda_{E,p}|H_{\text{int}}\Upsilon|^2 \delta(E - E_0) \quad (9.27)$$

Allerdings darf nicht der Grenzwert $t \rightarrow \infty$ genommen werden, weil sonst höhere Potenzen von tH_{int} nicht mehr vernachlässigt werden können. Insbesondere muß die Zeit t klein gegen die Lebensdauer des zerfallenden Zustandes bleiben: für größere Zeiten nimmt die Wahrscheinlichkeit, Zerfallsprodukte zu finden nicht mehr linear mit der Zeit zu. Für kleine Zeiten t , die groß genug für die Näherung (B.3) sind, deuten wir $\frac{w(\Delta, t)}{t}$ als Ableitung $-\frac{dw}{dt}$ der Wahrscheinlichkeit, den zerfallenden Zustand noch vorzufinden, und lesen die Zerfallsrate ab.

$$\Gamma_{\text{Goldene Regel}} = 2\pi \int dE dp |\Lambda_{E,p}|H_{\text{int}}\Upsilon|^2 \delta(E - E_0) \quad (9.28)$$

Die Zerfallsrate setzt sich additiv aus partiellen Zerfallsraten $d\Gamma$ von verschiedenen Prozessen zusammen

$$d\Gamma = 2\pi \delta(E - E_0) |\Lambda_{E,p}|H_{\text{int}}\Upsilon|^2 dE dp \quad (9.29)$$

Bei dieser Standardherleitung der Goldenen Regel ist die Zeit t genügend groß, denn kein quantenmechanisches System kann für kleine Zeiten exponentiell zerfallen (siehe Abschnitt (9.2)). Zusätzlich ist diese Zeit t klein gegen die Lebensdauer τ . Es ist bemerkenswert, wie gehorsam die Textbuchherleitung der Goldenen Regel von Studenten akzeptiert und von Dozenten vorgetragen wird. Die Annahmen über t schließen sich im Grenzfall gegenseitig aus und Fehler, die man für mittlere Zeiten macht, die sowohl genügend groß als auch genügend klein sind, sind nicht leicht abzuschätzen.

9.4 Zerfall ins Kontinuum

Man kann die Zeitentwicklung des zerfallenden Zustandes ohne Näherungen exakt durch Integrale angeben. Die Goldene Regel ergibt sich im Grenzfall kleiner und nichtresonanter Übergangsamplituden.

Ein allgemeiner Zustand schreibt sich mit einem Entwicklungskoeffizienten $\psi_0 = \Upsilon |\Psi\rangle$ und einer Wellenfunktion $\psi(E, p) = \Lambda_{E,p} |\Psi\rangle$ in der Basis (9.17) als Linearkombination

$$\Psi = \Upsilon \psi_0 + \int dE dp \Lambda_{E,p} \psi(E, p), \quad \psi(E, p) = 0 \text{ für } E < E_{\min}. \quad (9.30)$$

Die Wahrscheinlichkeit $w_0(\Delta, \Psi)$, bei einer Messung von Ψ die zu H_0 gehörende Energie im offenen Intervall Δ zu finden, beträgt

$$w_0(\Delta, \Psi) = \begin{cases} \int_{\Delta} dE dp |\psi(E, p)|^2 & \text{falls } E_0 \notin \Delta \\ |\psi_0|^2 + \int_{\Delta} dE dp |\psi(E, p)|^2 & \text{falls } E_0 \in \Delta \end{cases}. \quad (9.31)$$

Es trägt also der Anteil $\Upsilon \psi_0$ zur Wahrscheinlichkeitsdichte der Energie eine scharfe Linie bei E_0 bei, die schärfer als jede Detektorauflösung Δ ist und deren Fläche $|\psi_0|^2$ beträgt.

Die Wechselwirkung $H_{\text{int}} = H_{\text{int}}^\dagger$ bewirkt Übergänge vom normierten H_0 -Eigenzustand Υ ins Kontinuum und umgekehrt

$$H_{\text{int}} \Upsilon = \int dE dp \Lambda_{E,p} v(E, p), \quad H_{\text{int}} \Lambda_{E,p} = v^*(E, p) \Upsilon, \quad (9.32)$$

$$v(E, p) = \Lambda_{E,p} |H_{\text{int}} \Upsilon|. \quad (9.33)$$

Die Matrixelemente $\Upsilon |H_{\text{int}} \Upsilon$ und $\Lambda_{E',p'} |H_{\text{int}} \Lambda_{E,p}$ verschwinden in unserer Rechnung. Dies ist keine wesentliche Einschränkung, wir können uns solch einen Teil der Wechselwirkung in H_0 absorbiert vorstellen. Ebenso verschwindet $v(E, p) = \Lambda_{E,p} |H_{\text{int}} \Upsilon|$ für $E < E_{\min}$.

Der Operator H_{int} ist auf Υ nur definiert, falls $\|H_{\text{int}} \Upsilon\| < \infty$ ist.

$$\int dE dp |v(E, p)|^2 < \infty \quad (9.34)$$

Wie klein die Amplitude $v(E, p)$ für Übergänge ins Kontinuum auch ist, wenn sie bei einer Energie E_1 nicht für alle p verschwindet, so gibt es keinen normierbaren H -Eigenzustand mit dieser Energie. Die Gleichung $(H - E_1)\Psi = 0$ bestimmt nämlich die Energiewellenfunktion

$$\psi(E, p) = -\frac{v(E, p)}{E - E_1} \psi_0 \quad (9.35)$$

und die Energie E_1 durch die gap-Gleichung (Energielückengleichung)

$$E_1 - E_0 = - \int_{E_{\min}}^{\infty} dE dp \frac{|\nu(E, p)|^2}{E - E_1} . \quad (9.36)$$

Nur wenn $\int dp |\nu(E_1, p)|^2$ verschwindet, ist $\psi(E, p)$ eine quadratintegrale Funktion.

Ist die Wechselwirkung $\nu(E, p)$ genügend groß, so gibt es unterhalb der kontinuierlichen Energien, dort verschwindet $\nu(E, p)$, einen normierbaren H-Eigenzustand, denn die Energielückengleichung (9.36) hat für $E_1 < E_{\min}$ genau eine Lösung, wenn

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \int_{E_{\min}}^{\infty} dE dp \frac{|\nu(E, p)|^2}{E - E_{\min} + \varepsilon} = E_0 - E_{\min} \quad (9.37)$$

ist. Es ist nämlich die linke Seite von (9.36) eine monoton steigende Funktion von E_1 und die rechte Seite fällt monoton ab. Zudem ist für stark negative E_1 die linke Seite von (9.36) kleiner als die rechte, für $E_1 = E_{\min}$ ist die linke Seite größer als die rechte, wenn die Wechselwirkung $\nu(E, p)$ genügend groß ist.

Wir untersuchen nun die Zeitentwicklung des Zustandes $\Psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Upsilon$, der zur Zeit $t = 0$ als normierter Eigenzustand Υ des ungestörten Hamiltonoperators H_0 präpariert worden ist. Die Amplitude $a(t)$ dafür, daß bei Messung zur Zeit t der Anfangszustand gefunden wird, ist das Matrixelement

$$a(t) = \langle \Upsilon | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Upsilon \rangle . \quad (9.38)$$

Wir nutzen den Residuensatz und stellen $e^{-\frac{i}{\hbar} H t}$ als Wegintegral über einen Weg Γ dar, der das Spektrum von H in der komplexen Ebene im Gegenzugsinn umläuft.

$$e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dz e^{-\frac{i}{\hbar} z t} \frac{1}{z - H} \quad (9.39)$$

Die Formel kann mit dem Residuensatz für den Fall eines diskreten Spektrums $H \Lambda_n = E_n \Lambda_n$ mit $\Psi(0) = \sum_n \Lambda_n \psi_n$ leicht bestätigt werden

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi i} \sum_n \oint_{\Gamma} dz e^{-\frac{i}{\hbar} z t} \frac{1}{z - H} \Lambda_n \psi_n = \\ &= \frac{1}{2\pi i} \sum_n \oint_{\Gamma} dz e^{-\frac{i}{\hbar} z t} \frac{1}{z - E_n} \Lambda_n \psi_n = \sum_n \Lambda_n \psi_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \end{aligned}$$

und gilt auch für kontinuierliches Spektrum.

Die negative Resolvente $(z - H)^{-1}$ kann als geometrische Reihe geschrieben werden. Es gilt nämlich für Operatoren A und V , wenn A und $A - V$ invertierbar sind,

$$(A - V)^{-1} = (A(\mathbb{1} - A^{-1}V))^{-1} = (\mathbb{1} - A^{-1}V)^{-1}A^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} (A^{-1}V)^n A^{-1} \quad (9.40)$$

auf Zuständen, auf denen die Reihe konvergiert. Wir schreiben daher

$$\frac{1}{z - H} = \frac{1}{z - H_0 - H_{\text{int}}} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{z - H_0} H_{\text{int}} \right)^n \frac{1}{z - H_0} . \quad (9.41)$$

Die Potenzen von $(z - H_0)^{-1} H_{\text{int}}$ sind auf Υ leicht anzuwenden, da Υ Eigenzustand zu $((z - H_0)^{-1} H_{\text{int}})^2$ ist. Mit der Notation

$$|V(E)|^2 = \int dp |v(E, p)|^2 \quad (9.42)$$

gilt

$$\frac{1}{z - H_0} H_{\text{int}} \Upsilon = \int dE dp \Lambda_{E,p} \frac{v(E, p)}{z - E} \quad (9.43)$$

$$\left(\frac{1}{z - H_0} H_{\text{int}} \right)^2 \Upsilon = \frac{1}{z - E_0} \int dE \frac{|V(E)|^2}{z - E} \Upsilon . \quad (9.44)$$

Zum Matrixelement $\Upsilon | (z - H)^{-1} \Upsilon$ tragen demnach nur die geraden Potenzen von $(z - H_0)^{-1} H_{\text{int}}$ bei.

$$\begin{aligned} \Upsilon | \frac{1}{z - H} \Upsilon &= \sum_n \left(\frac{1}{z - E_0} \int dE \frac{|V(E)|^2}{z - E} \right)^n \frac{1}{z - E_0} \\ &= \left(z - E_0 - \int dE \frac{|V(E)|^2}{z - E} \right)^{-1} \end{aligned} \quad (9.45)$$

Für $\alpha(t)$ folgt dann wegen (9.38) und (9.39)

$$\alpha(t) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dz e^{-\frac{i}{\hbar} z t} \frac{1}{z - E_0 + \int dE \frac{|V(E)|^2}{E - z}} . \quad (9.46)$$

Wir wählen den Integrationsweg Γ im Gegenzeigersinn um das Spektrum so, daß wir mit festem Imaginärteil $\varepsilon > 0$ die Punkte $z = x + i\varepsilon$ von $x = \infty$ zu $x = E_{\text{min}}$ durchlaufen und nach einem Halbkreis um $z = E_{\text{min}}$ die Punkte $z = x - i\varepsilon$ von $x = E_{\text{min}}$ bis $x = \infty$. Wenn bei $E_1 < E_{\text{min}}$ der Bindungszustand existiert, kann sein Beitrag leicht getrennt berücksichtigt werden. Wir untersuchen eine so schwache Kopplung, daß kein Bindungszustand existiert.

Das Integral hängt nicht von ε ab und wir werten es im Grenzfalle $\varepsilon \rightarrow 0+$ aus. In diesem Grenzfalle verschwindet der Beitrag des Halbkreises bei $z = E_{\min}$ und das komplexe Wegintegral wird zur Differenz von Integralen über die reelle Achse.

$$a(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \frac{i}{2\pi} \int_{E_{\min}}^{\infty} dx \left(e^{-\frac{i}{\hbar} t(x+i\varepsilon)} \frac{1}{x+i\varepsilon - E_0 + \int dE \frac{|V(E)|^2}{E-x-i\varepsilon}} - (\varepsilon \rightarrow -\varepsilon) \right) \quad (9.47)$$

Wie in Anhang A gezeigt, ergibt der Grenzwert

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \frac{1}{x+i\varepsilon} = PV \frac{1}{x} - i\pi\delta(x), \quad (9.48)$$

den Hauptwert von $1/x$ und die δ -Funktion. Damit können wir das Integral in die Form

$$a(t) = \int dE e^{-\frac{i}{\hbar} Et} |F(E)|^2 \quad (9.49)$$

$$F(E) = \frac{V(E)}{E - E_0 + \oint dE' \frac{|V(E'+E)|^2}{E'} + i\pi|V(E)|^2} \quad (9.50)$$

bringen.

Der zerfallende Zustand ist durch die Ankopplung an das Kontinuum nicht länger ein Energieeigenzustand, sondern eine Resonanz ähnlich der Lorentzresonanz, denn für kleine Übergangsamplitude $V(E)$ ist $F(E)$ nahezu die in (9.6) gegebene Funktion $F_{\text{Lorentz}}(E)$. Die Abweichungen von der Lorentzresonanz führen zu Abweichungen vom exponentiellen Zerfall.

Im Nenner von $F(E)$ dominiert der Realteil

$$f(E) = E - E_0 + \oint dE' \frac{|V(E'+E)|^2}{E'} \quad (9.51)$$

außer in einer kleinen Umgebung der Nullstelle \hat{E} von $f(E)$. Der Zähler $V(E)$ beseitigt die unphysikalischen Züge der Lorentzresonanz. Er sorgt dafür, daß die Energiewellenfunktion für $E < E_{\min}$ verschwindet und verbessert das Hochenergieverhalten, so daß $H\Upsilon$ endliche Norm hat. Es existieren dann Γ_H und Δ_H , allerdings hängen diese Größen vom Verhalten von $V(E)$ für $E = \hat{E}$ ab und brauchen nicht mit der Resonanzenergie und der Breite übereinstimmen.

Wenn sich in der Umgebung der Nullstelle von $f(E)$ der Imaginärteil des Nenners von $F(E)$ nicht stark verändert, können wir ihn dort durch $\pi|V(\hat{E})|^2$ nähern und erhalten ungefähr

$$F(E) \approx \frac{V(\hat{E})}{(E - \hat{E})(1 + \partial_{\hat{E}} \oint dE' \frac{|V(E'+\hat{E})|^2}{E'}) + i\pi|V(\hat{E})|^2} \quad (9.52)$$

mit der Resonanzenergie \hat{E} , die durch die Energielückengleichung $f(\hat{E}) = 0$ implizit definiert ist, und der Breite

$$\Gamma = \frac{2\pi \int dp |\nu(\hat{E}, p)|^2}{1 + \partial_{\hat{E}} \oint dE' dp \frac{|\nu(E' + \hat{E}, p)|^2}{E'}} . \quad (9.53)$$

In niedrigster Ordnung ist dies die Goldene Regel.

$$\Gamma_{\text{Goldene Regel}} = 2\pi \int dE dp \delta(E - \hat{E}) |\Lambda_{E,p} |H_{\text{int}} \Upsilon|^2 \quad (9.54)$$

Die Zerfallsrate eines Zustands, der durch Übergänge in ein Kontinuum von Energiezuständen zerfällt, ist das 2π -fache des Integrals der Betragsquadrate der Übergangsamplitude $\nu(\hat{E}, p)$ bei der Resonanzenergie \hat{E} mal einer Deltafunktion für Energieerhaltung. Genauer zeigt Gleichung (9.50), daß der zerfallende Zustand kein Energieeigenzustand, sondern eine Resonanz ähnlich der Lorentzresonanz ist.

Diese Herleitung der Goldenen Regel zeigt, daß eine genaue Berechnung der Übergangsamplitude $|\Lambda_{E,p} |H_{\text{int}} \Upsilon|$ in höherer Ordnung Störungstheorie durch eine genaue Berechnung des Zeitverhaltens des zerfallenden Zustands ergänzt werden muß. Die Goldene Regel gilt in niedrigster Ordnung der Übergangsamplitude.

Die Approximation (9.52) unterstellt nicht nur, daß $V(E)$ klein ist, sondern auch, daß $V(E)$ glatt ist und nicht selbst eine Lorentzresonanz mit Resonanzenergie E_1 und Breite Γ_1 ist. Sonst unterdrückt zwar in (9.50) der Nenner $f(E_1) \cdot (E_1 - E_0)$ den Beitrag der Resonanz bei E_1 , wenn aber die Breite Γ_1 klein gegen $2\pi |V(\hat{E})|^2$ ist, so zerfällt zunächst der Zustand Υ schnell als Resonanz mit Energie \hat{E} bis auf einen kleinen, längerlebigen Rest der Resonanz mit Energie E_1 und Breite Γ_1 .

9.5 Allgemeingültigkeit

Wir haben in (9.49,9.50) ganz allgemein die Amplitude dafür ausgerechnet, daß irgendein normierbarer Zustand $\Psi(t)$, der als Wellenpaket aus kontinuierlichen Energieeigenzuständen zusammengesetzt ist, mit dem Zustand $\Psi(0)$ übereinstimmt. Sei nämlich der normierte Anfangszustand $\Upsilon = \Psi(0)$ aus kontinuierlichen Energieeigenzuständen des Hamiltonoperators H zusammengesetzt. Der Projektor

$$P = |\Upsilon\rangle\langle\Upsilon|, \quad P^2 = P, \quad \mathbb{1} = P + (\mathbb{1} - P), \quad (9.55)$$

werde zur Definition des ungestörten Hamiltonoperators

$$H_0 = PHP + (\mathbb{1} - P)H(\mathbb{1} - P) \quad (9.56)$$

verwendet. Der Zustand $\Upsilon = P\Upsilon$ ist ein normierter Eigenzustand zu H_0

$$H_0\Upsilon = PHP\Upsilon = \Upsilon, \quad \Upsilon|H\Upsilon = E_0\Upsilon \quad (9.57)$$

mit Eigenwert $E_0 = \Upsilon|H\Upsilon$, der im Kontinuum der Eigenwerte von H_0 liegt. Die Wechselwirkung

$$H_{\text{int}} = H - H_0 = PH(\mathbb{1} - P) + (\mathbb{1} - P)HP \quad (9.58)$$

macht Übergänge von Υ zu dazu orthogonalen Zuständen.

Jeder Zustand Υ und jeder Hamiltonoperator H mit kontinuierlichem Spektrum erfüllen also die Annahmen, die wir in Abschnitt (9.4) gemacht haben. Durch Wahl des beliebigen Zustand Υ kann die Funktion $F(E)$ in (9.49) mit den Einschränkungen $F(E) = 0$ für $E < E_{\text{min}}$ und $\int dE |F(E)|^2 = 1$ beliebig vorgegeben werden. Die Amplitude $a(t)$ nimmt daher normalerweise nicht exponentiell ab.

Der Zustand zerfällt exponentiell, wenn die Amplitude $v(E, p)$ für den Zerfall in das Kontinuum der Zerfallsprodukte klein ist und nicht selbst resonantes Verhalten zeigt.

9.6 Zerfall bewegter Teilchen

In relativistischer Quantenmechanik ist der Hamiltonoperator $H = cP^0$ eine Komponente des Viererimpulses. Zu Lorentztransformationen Λ , die $\Lambda^0_0 = 1$ erfüllen und daher die Zeitrichtung nicht umdrehen, gehören unitäre Operatoren $U(\Lambda)$, die auf Zuständen mit ganzzahligem Spin die Lorentztransformationen darstellen.

$$U(\Lambda_2\Lambda_1) = U(\Lambda_2)U(\Lambda_1) \quad (9.59)$$

Für halbzahligem Spin und für Lorentztransformationen, die die Zeitrichtung spiegeln, sind die Verhältnisse verwickelter [3, Kapitel 2]: Zeitumkehr ist als antiunitäre Transformation realisiert und auf Zuständen mit halbzahligem Spin ist die Überlagerungsgruppe $SL(2, \mathbb{C})$ der Lorentzgruppe dargestellt. Diese Komplikationen wirken sich aber hier nicht aus.

Die unitären Transformationen bewirken zeitrichtungstreue Lorentztransformationen der Viererimpulse

$$U^{-1}(\Lambda)P^m U(\Lambda) = \Lambda^m_n P^n. \quad (9.60)$$

Auf einen Viererimpulseigenzustand Φ_p mit $P^m \Phi_p = p^m \Phi_p$ angewendet ergibt $U(\Lambda)$ daher einen Eigenzustand mit lorentztransformiertem Viererimpuls.

$$P^m U(\Lambda) \Phi_p = U(\Lambda) \Lambda^m_n P^n \Phi_p = \Lambda^m_n p^n U(\Lambda) \Phi_p \quad (9.61)$$

Für zerfallende Teilchen, die sich mit Geschwindigkeit v bewegen, folgt hieraus, daß ihre Lebensdauer τ_v durch Zeitdilatation vergrößert ist.

$$\tau_v = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \tau_0 \quad (9.62)$$

Die Relation ist aus quantenmechanischen Gründen nicht mathematisch exakt. Es kann nämlich streng genommen kein Teilchen in Ruhe präpariert werden, dazu würde eine konstante, und daher nicht normierbare Ortswellenfunktion gehören. Arbeitet man, um die Lokalisationsenergie klein zu halten, mit Wellenfunktionen, die in einem großen Raumgebiet konstant sind und außerhalb des Gebiets schnell gegen Null gehen, so sieht ein lorentztransformierter Beobachter in diesem großen Raumgebiet den Zustand vor langer Zeit und nach langer Zeit. Hat man schon die Idealisierung vollzogen, daß der Zustand exponentiell zerfällt, so entspricht diesem Zerfall für einen lorentztransformierten Beobachter eine Wellenfunktion, die entgegen der Geschwindigkeitsrichtung exponentiell anwächst. Ähnlichen Schwierigkeiten begegnet man, wenn man einen zerfallenden Zustand als Impulseigenzustand und als Eigenzustand eines nichthermiteschen Hamiltonoperators beschreiben will. Hat die Energie einen negativen Imaginärteil, so hat der lorentztransformierte Zustand einen komplexen Impulseigenwert. Die entsprechende Wellenfunktion wächst dann in einer Richtung exponentiell an.

Betrachtet man Wellenpakete und arbeitet man mit normierten Zuständen, so ist die Amplitude $\alpha(t)$ (9.4) schon für stabile Teilchen zeitabhängig. Denn Wellenpakete freier, massiver Teilchen zerfließen, weil sie aus Anteilen mit unterschiedlichen Impulsen und daher unterschiedlichen Geschwindigkeiten zusammengesetzt sind. Abgesehen davon ist die Amplitude

$$\Psi_v(0) | \Psi_v(t) \quad (9.63)$$

eines mit Geschwindigkeit v bewegten Zustands aber einfach deshalb zeitabhängig, weil er sich mit Geschwindigkeit v bewegt und daher weniger und weniger mit dem Wellenpaket zur Zeit $t = 0$ überlappt. Um für ein nahezu monochromatisches Wellenpaket die Amplitude dafür zu bestimmen, daß der Zustand noch zur Zeit t vorhanden ist, muß daher $\Psi_v(t)$ mit dem um $x = vt$ verschobenen Zustand (5.26) $e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{P} \vec{v} t} \Psi_v(0)$ verglichen werden.

$$\alpha_v(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{P} \vec{v} t} \Psi_v(0) | \Psi_v(t) = \Psi_v(0) | e^{\frac{i}{\hbar} \vec{P} \vec{v} t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Psi_v(0). \quad (9.64)$$

Die mit Geschwindigkeit v bewegten Zustände Ψ_v erhält man aus ruhenden Zuständen Ψ_0 , sie sind Eigenzustände des räumlichen Impulses $\vec{P}\Psi_0 = 0$, durch die unitäre Transformation

$$\Psi_v = U(\Lambda(v))\Psi_0, \quad (9.65)$$

die zur drehungsfreien Lorentztransformation $\Lambda(v)$ gehört, zum Beispiel

$$\Lambda(v) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} & \begin{pmatrix} 1 & \frac{v}{c} \\ \frac{v}{c} & 1 \end{pmatrix} & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix} \quad (9.66)$$

für einen in x -Richtung bewegten Zustand. Ψ_v ist kein Impulseigenzustand, wenn Ψ_0 instabil ist, da Ψ_0 kein Energieeigenzustand ist.

Setzen wir (9.65) in (9.64) ein und verwenden wir (9.60) so ergibt sich mit $u_m = (ct, -vt, 0, 0)$

$$\Psi_0|U^{-1}e^{-\frac{i}{\hbar}u_m P^m}U\Psi_0 = \Psi_0|e^{-\frac{i}{\hbar}u_m U^{-1}P^m U}\Psi_0 = \Psi_0|e^{-\frac{i}{\hbar}u_m \Lambda^m_n P^n}\Psi_0 \quad (9.67)$$

Verwenden wir hier die idealisierte Relation $\vec{P}\Psi_0 = 0$, so fallen alle Beiträge von den räumlichen Impulsoperatoren weg, und wir erhalten

$$a_v(t) = \Psi_0|e^{-\frac{i}{\hbar}u_m \Lambda^m_0 H}\Psi_0 = a_0\left(\frac{1}{c}u_m \Lambda^m_0\right) = a_0\left(\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}t\right). \quad (9.68)$$

Es zerfällt also das bewegte Teilchen langsamer als das ruhende. Nimmt die Überlebenswahrscheinlichkeit des ruhenden Teilchens exponentiell mit einer Lebensdauer τ ab, gilt also $|a_0(t)|^2 = e^{-\frac{t}{\tau}}$, so gilt für das bewegte Teilchen

$|a_v(t)|^2 = e^{-\frac{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}t}{\tau}}$. Es hat also eine Lebensdauer von

$$\tau_v = \frac{\tau}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}. \quad (9.69)$$

Auf die Frage, ob Beschleunigung die Lebensdauer beeinflusst oder ob quantenmechanische Teilchen ideale Uhren sind und die Weglänge der Weltlinie messen, gibt es keine universelle Antwort. Man muß erwarten, daß die Art der Beschleunigung wesentlich ist. So greift zum Beispiel ein Magnetfeld in die Energieverhältnisse von atomaren Niveaus ein und Beschleunigung in einem Magnetfeld ändert den Gang von Uhren, die Zeit mit atomaren Übergängen messen. Vergegenwärtigt man sich, daß der Begriff Eigenzeit von der Lokalisation der Uhr auf eine Weltlinie Gebrauch macht, daß solch eine Lokalisation zu verschiedenen Zeiten aber im Widerspruch zur Quantenmechanik steht, erkennt man, daß schon die Frage, ob quantenmechanische Uhren die Weglänge längs einer Weltlinie messen, problematisch ist.

Anhang A

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \frac{1}{x+i\varepsilon} = \mathbf{PV} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$$

Um den Grenzwert $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \frac{1}{x+i\varepsilon}$ zu untersuchen, wenden wir $\frac{1}{x+i\varepsilon} = \frac{x-i\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2}$ auf eine reelle Testfunktion $t(x)$ an.

Der Imaginärteil wird durch Variablensubstitution identifiziert.

$$\int dx t(x) \frac{-\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} = - \int \frac{dx}{\varepsilon} t\left(\varepsilon \frac{x}{\varepsilon}\right) \frac{1}{1 + \left(\frac{x}{\varepsilon}\right)^2} = -\text{sign}(\varepsilon) \int dx t(\varepsilon x) \frac{1}{1 + x^2}$$

Bei stetigen, beschränkten Testfunktionen $t(x)$ strebt dies für $\varepsilon \rightarrow 0+$ gegen

$$-t(0) \int \frac{dx}{1+x^2} = -\pi t(0) = - \int dx t(x) \pi\delta(x) . \quad (\text{A.2})$$

Der Realteil $\frac{x}{x^2+\varepsilon^2}$ ist eine ungerade Funktion von x . Auf eine Testfunktion $t(x)$ angewendet, die für große x genügend schnell abfällt, trägt daher nur deren ungerader Anteil $x\hat{t}(x)$ bei.

$$t(x) - t(-x) = 2x\hat{t}(x) \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} \int dx t(x) \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} &= \int dx \frac{1}{2} \frac{xt(x) - xt(-x)}{x^2 + \varepsilon^2} = \int dx \frac{\frac{x^2}{\varepsilon^2}}{1 + \frac{x^2}{\varepsilon^2}} \hat{t}(x) \\ &= \int dx \hat{t}(x) - |\varepsilon| \int d\left(\frac{x}{\varepsilon}\right) \frac{1}{1 + \frac{x^2}{\varepsilon^2}} \hat{t}\left(\varepsilon \left(\frac{x}{\varepsilon}\right)\right) \\ &= \int dx \hat{t}(x) - |\varepsilon| \int dx \frac{\hat{t}(\varepsilon x)}{1 + x^2} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \int dx \hat{t}(x) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Für differenzierbare Testfunktionen t ist \hat{t} stetig ergänzbar bei $x = 0$ und hat dort den Wert $\frac{dt}{dx}$. Das Integral über \hat{t} ist der Hauptwert (principal value)

PV $\frac{1}{x}$ integriert mit einer Testfunktion $t(x)$.

$$\int dx \frac{1}{2} \frac{t(x) - t(-x)}{x} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \left(\int_{-\infty}^{-\varepsilon} dx \frac{t(x)}{x} + \int_{+\varepsilon}^{\infty} dx \frac{t(x)}{x} \right) = \oint dx \frac{t(x)}{x} \quad (\text{A.5})$$

Damit ist die Behauptung

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \frac{1}{x + i\varepsilon} = \text{PV} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x) \quad (\text{A.6})$$

gezeigt.

Anhang B

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(tx)}{tx^2} = \pi \delta(x)$$

Das Integral mit einer Testfunktion $f(x)$ schreibt sich als

$$\int dx f(x) \frac{\sin^2(tx)}{tx^2} = \int t dx f\left(\frac{tx}{t}\right) \frac{\sin^2 tx}{(tx)^2} = \int dx f\left(\frac{x}{t}\right) \frac{\sin^2 x}{x^2} \quad (\text{B.1})$$

und strebt, falls f eine stetige, beschränkte Testfunktion ist, für $t \rightarrow \infty$ gegen

$$f(0) \int dx \frac{\sin^2 x}{x^2} = f(0) \pi . \quad (\text{B.2})$$

Es ist also

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(tx)}{tx^2} = \pi \delta(x) . \quad (\text{B.3})$$

Anhang C

Bemerkung zur Fouriertransformation

Fouriertransformation bildet quadratintegrale Funktionen ψ unitär auf quadratintegrale Funktionen $\tilde{\psi}$ ab

$$\tilde{\psi}(x) = \int \frac{dy}{2\pi} e^{ixy} \psi(y), \quad \psi(x) = \int \frac{dy}{2\pi} e^{-ixy} \tilde{\psi}(y), \quad (\text{C.1})$$

denn das Skalarprodukt

$$\int dx \tilde{\phi}^*(x) \tilde{\psi}(x) = \int dy dy' \frac{dx}{2\pi} e^{-ixy} e^{ixy'} \phi^*(y) \psi(y') \quad (\text{C.2})$$

stimmt wegen (5.51) mit dem ursprünglichen Skalarprodukt $\int dy \phi^*(y) \psi(y)$ überein. Wegen $\tilde{\tilde{f}}(x) = f(-x)$ führt vierfach hintereinander ausgeführte Fouriertransformation zur Ausgangsfunktion f zurück. Da die Fouriertransformation unitär ist, kann sie nur Eigenwerte λ vom Betrag 1 haben, die zudem $\lambda^4 = 1$ erfüllen. Die möglichen Eigenwerte sind also $\pm 1, \pm i$. Zerlegt man eine Funktion in $f = g + u$ in einen geraden $g(x) = g(-x)$ und einen ungeraden $u(x) = -u(-x)$ Anteil, so kann man f als Summe von vier Eigenanteilen unter Fouriertransformation mit den Eigenwerten $\pm 1, \pm i$ schreiben: $g = 1/2(g + \tilde{g}) + 1/2(g - \tilde{g})$ und $u = 1/2(u - i\tilde{u}) + 1/2(u + i\tilde{u})$.

Daß Fouriertransformation eine Funktion wie die Gaußfunktion wieder auf sich abbildet, ist also nicht außergewöhnlich.

Anhang D

Ableitung der Determinante

Die Determinante einer Matrix M ist eine polynomiale Funktion der Matrixelemente M^i_j . Aus ihrer Definition

$$\det M = \varepsilon_{i_1 i_2 \dots i_n} M^{i_1}_1 M^{i_2}_2 \dots M^{i_n}_n \quad (D.1)$$

folgt durch Differenzieren

$$\frac{\partial \det M}{\partial M^i_j} = \varepsilon_{i_1, \dots, i_{j-1}, i, i_{j+1}, \dots, i_n} M^{i_1}_1 \dots M^{i_{j-1}}_{j-1} M^{i_{j+1}}_{j+1} \dots M^{i_n}_n. \quad (D.2)$$

Multipliziert man das Ergebnis mit M^i_l und summiert über i , so erhält man wieder die Determinante, wenn $l = j$ ist. Im anderen Fall $l \neq j$ erhält man Null, weil in der Summe mit dem ε -Tensor schon $M^{i_l}_l$ steht und ε total antisymmetrisch ist. Damit ist die Ableitung $\frac{\partial \det M}{\partial M^i_j}$ identifiziert.

$$\frac{\partial \det M}{\partial M^i_j} = \det M (M^{-1})^j_i \quad (D.3)$$

Die Ableitung der Determinante einer einparametrischen Schar von Matrizen $M(\alpha)$ ist daher nach Kettenregel

$$\partial_\alpha \det M(\alpha) = \det M (M^{-1})^j_i \partial_\alpha M^i_j. \quad (D.4)$$

Ist für $\alpha = 0$ die Matrix $M(0) = \mathbb{1}$, so ist dort die Ableitung der Determinante die Spur der abgeleiteten Matrix $\partial_\alpha M|_{\alpha=0}$

$$\partial_\alpha \det M|_{\alpha=0} = 1, \quad \delta^i_j \partial_\alpha M^i_j|_{\alpha=0} = \partial_\alpha M^i_i|_{\alpha=0} = \text{tr } \partial_\alpha M|_{\alpha=0} \quad (D.5)$$

Literaturverzeichnis

- [1] A. Galindo and P. Pascual, Quantum Mechanics I and II, Springer Verlag, Heidelberg, 1990
- [2] M. Reed and B. Simon, Analysis of Operators, Academic Press, New York, 1978
- [3] Steven Weinberg, The Quantum Theory of Fields Volume 1, Cambridge University Press, Cambridge, 1995

Index

- Bahndrehimpuls, 43
- Basis
 - kontinuierliche \sim , 41–43
 - Orthonormal \sim , 6–7
- Beugung, 39
- Blochsches Theorem, 60
- Boltzmannverteilung, 75
- Boseverteilung, 77
- Bosonen, 44, 45
- Bra-Vektor, 8
- Bracket-Schreibweise, 7–8, 41
- Breite, 79
- Darstellung, 35
- Dichtematrix, 13–15
 - Eigenwert, 14, 70
 - eines reinen Zustands, 30
 - Hauptdiagonalelement, 13, 14, 28
 - Spur, 14
 - Zahl der Parameter, 27
 - Zeitentwicklung, 47
- Dispersionsrelation, 64
- Drehimpuls, 39–41
 - algebra, 24
 - Addition von \sim , 66–67
- Drehung, 26, 39–41
 - eines Spin-1/2-Spinors, 26, 29
- Eigenvektor, 17
- Eigenwert, 5, 17
 - eines hermiteschen Operators, 17
 - eines unitären Operators, 18
- Eigenzustand, 5
 - einer Spin-Messung, 28
 - paarweise orthogonal, 17
- Energie
 - differenzen, 52
 - in relativistischen Theorien, 53
 - freies Teilchen, 52
 - gravitative Auswirkung, 52
 - Grundzustands \sim , 32, 51–53
 - eines harmonischen Oszillators, 53
 - klassisch, 53
- Energieband, 61
- Entartung, 5, 12, 21, 66
- Entropie, 70–74
 - konvexe Funktion, 73
 - Mischungs \sim , 71
- Erwartungswert, 16
 - Energie \sim , 77
- Erzeuger, 22
- Fermionen, 44, 45
- Fermiverteilung, 77
- Floquetsches Theorem, 60
- Fouriertransformation, 43
- gap-Gleichung, 85
- Gemisch, 14
 - Mischen von Gemischen, 15
- Goldene Regel, 81–88
- Gruppe, 35
 - einparametrische \sim , 36
- Heisenbergbild, 50–51

Heisenbergsche Vertauschungsrelation, 22, 38
 Hilbertraum, 6
 Produktraum, 65
 identische Teilchen, 44
 Bosonen, 44
 Fermionen, 44
 Impuls, 37–39
 Jacobi-Identität, 22
 Ket-Vektor, 8
 Kommutator, 20, 21
 Korrelation, 68
 Laplacetransformation, 75
 Mannigfaltigkeit, 34
 Matrixalgebra, 8–9
 Meßapparat, 4
 Meßwerte, 4–5
 in einem Bereich, 33
 kontinuierliche \sim , 33
 Mittelwert, 16
 Normalordnung, 53–55
 Normierung, 10, 34, 46
 Kontinuums \sim , 41, 42
 Operator
 adjungierter \sim , 8
 Definitionsbereich, 19, 34
 der Zeitmessung, 47
 erzeugender \sim , 36, 38
 Hamilton \sim , 47
 hermitescher \sim , 17
 Spin-1/2 \sim , 26
 unitärer \sim , 18
 zum Meßapparat gehöriger \sim , 16
 Pauli-Matrizen, 26
 Pauli-Verbot, 44, 77
 periodisches Potential, 59
 Polarisierung, 30
 Projektor, 9, 11, 19
 quadratintegrabel, 34, 38, 41
 quadratsummierbar, 10, 32
 Quantisierung
 durch Normalordnung, 55
 kanonische \sim , 53–54
 quantum beat, 59
 Rabi-Oszillation, 58–59
 Resolvente, 18, 86
 Resonanz
 -breite, 79
 -energie, 79
 Lorentz \sim , 78
 Schrödingerbild, 50–51
 Schrödingergleichung, 46–50
 nichtlineare \sim , 47
 zeitunabhängige \sim , 49
 Schwankung, 19–20
 Skalarprodukt, 6, 8, 34
 Slater-Determinante, 45
 Spektrum, 18, 85
 Spin-Statistik-Zusammenhang, 45
 Spur, 12
 der Dichtematrix, 14
 im reinen Zustand, 30
 Störungstheorie, 30–32
 Strahl im Hilbertraum, 10–12, 17, 48
 Teilchenoszillation, 59
 Teleportation, 68
 Temperatur, 75
 thermisches Gleichgewicht, 75–77
 Translation, 37–39
 Unkenntnis, 69, 70

- Unschärfe, 19–20
 - allgemeine \sim -relation, 20
 - Heisenbergsche \sim -relation , 39
 - verschwindende \sim , 19
- unvollständige Messung, 69
- Vernichter, 22
- von-Neumann-Gleichung, 47
- Wahrscheinlichkeit
 - für einen Meßwert, 5, 13
 - Produktions \sim , 47
 - Summenregel, 10, 14, 34
- Wahrscheinlichkeitsamplitude, 7, 33
- Wahrscheinlichkeitsdichte, 33, 43
- Wellenfunktion, 33–45
 - des Universums, 14
 - Dimension der \sim , 34
 - Impuls \sim , 43
 - Orts \sim , 33, 41
 - von Mehrteilchenzuständen, 44
- Zeitentwicklung, 46–50
 - Dichtematrix, 47
 - Entropie, 71
- Zeitmessung, 47
- Zerfall, 78–89
 - nichtexponentiell, 80–81
- Zerlegung der Eins, 9, 42
- zusammengesetzte Systeme, 65–69
 - frei \sim , 77
 - korreliert \sim , 68
 - unabhängig \sim , 67
 - Entropie \sim , 71
- Zustand, 4, 10
 - Mehrteilchen \sim , 43–45
 - Produkt \sim , 65
 - reiner \sim , 14, 17
 - verschränkter \sim , 65
- Zustandsreduktion, 56–57, 68
- Zustandssumme, 75
- des harmonischen Oszillators, 77
- eines frei zusammengesetzten Systems, 77
- Zweizustandssystem, 27, 58–59, 77