Anmerkungen zur Quantenmechanik

Norbert Dragon

Der Artikel hat zur Zeit noch nicht seine endgültige Form, die jeweils neueste Fassung befindet sich im Internet bei `http://www.itp.uni-hannover.de/~dragon`. Für Hinweise auf Unverständliches oder Falsches, insbesondere auch auf Tippfehler, bin ich dankbar.

Dieser Text wurde mit dem Textsatzsystem TeX, genauer mit LaTeX 2$_\epsilon$ und der KOMA-Script-Klasse scrbook, am 13. April 2017 erstellt.

Überblick

Von Feynman stammt die Einschätzung, man müsse gerechterweise zugeben, daß niemand Quantenmechanik verstehe. Die folgende Darstellung ist als Widerlegung dieser Koketterie gedacht: von der Grundgleichung für die Wahrscheinlichkeit von Meßergebnissen ausgehend wird die Quantenmechanik entwickelt, ohne daß ein größeres Rätsel bleibt als die Frage, warum diese Grundgleichung gilt. Sie wird zwar als Kopenhagener Deutung der Quantenmechanik bezeichnet, als könne man Quantenmechanik auch anders deuten. Aber ohne diese Grundgleichung kommt keine Formulierung der Quantenmechanik aus. Erst sie besagt, was denn physikalisch der Fall ist, wenn das System mathematisch in einem Zustand ist.

Daß, wie die Grundgleichung besagt, die Wahrscheinlichkeit für ein Meßergebnis quadratisch von der Amplitude abhängt, die den Zustand charakterisiert und die sich mit der Zeit ändert, ist nicht ohne Beispiel in der Theoretischen Physik: ebenso hängen Energiedichten und -ströme in der Elektrodynamik quadratisch von Feldern ab. Unbegreiflich, das heißt, nicht durch Einfacheres erklärbar, bleibt an der Quantenmechanik nur, warum bei kleiner werdenden Energiedichten die Auswirkungen im Einzelfall nicht kleiner sondern seltener werden, warum also, wie beim photoelektrischen Effekt, sich die Auswirkungen wie die von Teilchen verhalten.

So einfach dieser Befund ist, so unbegreiflich ist er. Die experimentell bestätigte Verletzung der Bellschen Ungleichung zeigt, daß die Ergebnisse von Spinmessungen in verschiedene Richtungen nicht als reale Eigenschaften einzelner Teilchen vor der Messung festliegen. Aber auf die einfache Frage, wann denn dann der Meßwert festliegt, wenn er vorher nicht festlag und später feststeht, haben wir keine Anwort. Die Frage ist vermutlich falsch gestellt, weil sie außer Betracht läßt, daß unsere Sicherheit über den Meßwert mit der Zeit zunehmen statt sich sprunghaft ändern kann.

Aus der Grundgleichung folgt, wie wir in Abschnitt 5.6 zeigen, daß die Anteile eines Zustandes, die zu verschiedenen Meßergebnissen geführt haben, nicht kohärent sind. Für diese Dekohärenz ist nicht wichtig, ob ein Beobachter zusieht, sondern nur, ob der Zustand eine Meßanzeige so verändert hat, daß man sie ablesen kann.

Zustandsreduktion, oder spektakulärer der Kollaps der Wellenfunktion, als Ergebnis einer Messung ist keine unstetige Änderung des zu messenden Zustandes, sondern der unstetige Übergang zu bedingten Amplituden, die zur unstetig geänderten Frage nach bedingten Wahrscheinlichkeiten bei Kenntnis eines Ergebnisses gehören. Nicht anders verhalten sich klassische Wahrscheinlichkeiten, beispielsweise bei der Ziehung der Lottozahlen, bei der sich die Gewinnwahrscheinlichkeit unstetig mit jeder gezogenen Zahl ändert, ohne daß man blumig von einen Kollaps redet.

Der Text ist 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 anspruchsvolle Darstellung [8] und insbesondere für die begrifflichen Grundlagen [11].

Inhaltsverzeichnis

1 Wahrscheinlichkeit von Meßwerten

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

Die Quantenmechanik befaßt sich mit dem zu messenden System, dem Zustand, der mit einem Meßapparat vermessen wird. Konkret kann es sich dabei um jeweils ein Atom in einem Strahl handeln, den ein Meßapparat wie ein Stern-Gerlach-Apparat in mehrere Teilstrahlen aufspaltet. Bei den Meßwerten $a_1, a_2, \ldots, a_i, \ldots$ können wir an die Ablenkwinkel denken. So wie man die Grundrechenarten zunächst an natürlichen, ganzen und rationalen Zahlen kennenlernt, betrachten wir einfachheitshalber zunächst nur Messungen mit diskreten, bestunterscheidenden Ergebnissen. Dabei heißt ein Ergebnis bestunterscheidend oder nicht entartet, wenn es keine feinere Messung gibt, die es als Zusammenfassung verschiedener, unterscheidbarer Ergebnisse erweist.

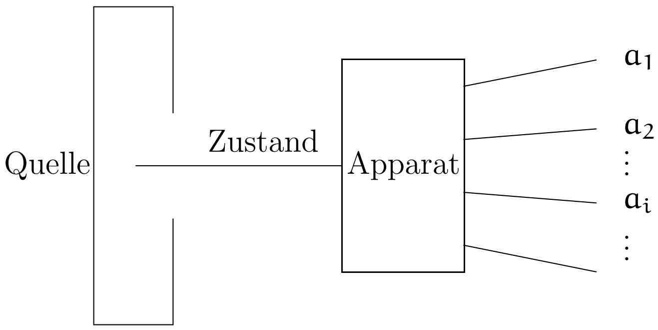


Abbildung 1.1: prinzipielle Meßanordnung

Die Quantenmechanik beruht auf den folgenden Befunden:

> Für jeden nicht entarteten Meßwert a_i eines idealen Meßapparats A kann ein Zustand Λ_i präpariert werden, bei dem a_i mit Sicherheit gemessen wird. Dieser Zustand heißt Eigenzustand von A zum Eigenwert a_i.
>
> Auch wenn das zu messende System, der Zustand Ψ, ideal präpariert worden ist, liegt nicht für jeden Meßapparat A fest, welcher seiner Meßwerte $a_1, a_2, \ldots$ auftritt, sondern es gilt die *Grundgleichung*:
>
> *Wenn der Zustand* Ψ *mit dem Meßapparat* A *vermessen wird, so ist*
>
> $$w(i, A, \Psi) = |\langle \Lambda_i | \Psi \rangle|^2 \tag{1.1}$$
>
> *die Wahrscheinlichkeit dafür, daß der* i*-te Meßwert* a_i *festgestellt wird.*

Ein nicht idealer Apparat besteht beispielsweise aus zwei hintereinander stehenden Polarisationsfiltern mit zueinander schiefen Polarisationsrichtungen. Man kann Photonen nicht so präparieren, daß sie sicher durchkommen.

1.1 Orthonormalbasis

Die Grundgleichung (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. Zudem ist im Hilbertraum ein Skalarprodukt definiert. Es ordnet jedem Paar von Vektoren Λ, Ψ eine komplexe Zahl $\langle \Lambda | \Psi \rangle \in \mathbb{C}$ zu, ist im zweiten Argument linear und ist konjugiert symmetrisch,

$$\langle \Lambda | \Psi_1 c_1 + \Psi_2 c_2 \rangle = \langle \Lambda | \Psi_1 \rangle c_1 + \langle \Lambda | \Psi_2 \rangle c_2 \quad \forall c_1, c_2 \in \mathbb{C} \ , \tag{1.2a}$$

$$\langle \Lambda | \Psi \rangle^* = \langle \Psi | \Lambda \rangle \ . \tag{1.2b}$$

Folglich ist das Skalarprodukt antilinear im ersten Argument

$$\langle c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 | \Lambda \rangle = c_1^* \langle \Psi_1 | \Lambda \rangle + c_2^* \langle \Psi_2 | \Lambda \rangle \ . \tag{1.3}$$

Mathematiker nennen das Skalarprodukt sesquilinear, denn lateinisch sesqui bedeutet anderthalb. Das Skalarprodukt ist ja im ersten Argument nur reell linear.

Das Skalarprodukt eines Vektors mit sich ist positiv definit und wird verwendet, um die Länge von Vektoren (und damit die Norm und die Topologie im Hilbertraum) zu definieren

$$0 \leq \langle \Psi | \Psi \rangle = \|\Psi\|^2 < \infty \ , \quad \|\Psi\| = 0 \Leftrightarrow \Psi = 0 \ . \tag{1.4}$$

Voraussetzungsgemäß ist jeder Hilbertraum vollständig: Cauchyfolgen konvergieren.

Die Wahrscheinlichkeit $w(i, A, \Psi)$, mit der ein Meßapparat A den i-ten 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 i-ten Meßwert a_i.

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

$$\langle \Lambda_i | \Lambda_j \rangle = \delta^i{}_j = \begin{cases} 0 & \text{falls} \quad i \neq j \\ 1 & \text{falls} \quad i = j \end{cases} \tag{1.5}$$

Denn falls der Eigenzustand Λ_j vermessen wird, tritt mit Sicherheit der Meßwert a_j auf, $w(i, A, \Lambda_j) = |\langle \Lambda_i | \Lambda_j \rangle|^2 = \delta^i{}_j$. Aus den Betragsquadraten folgen die Skalarprodukte (1.5) der Λ_j, weil nichtverschwindende Längenquadrate positiv sind.

Quantenmechanik macht über (1.1) hinaus die Annahme, daß die Eigenzustände Λ_i ein vollständiges System bilden, das heißt, daß sich jeder Zustand Ψ mit beliebig vorgegebener Genauigkeit $\varepsilon > 0$ durch eine endliche, komplexe Linearkombination der $\Lambda_i \in \mathcal{H}$ nähern läßt,

$$\Psi \approx \sum_j \Lambda_j \psi_j \ , \quad \psi_j \in \mathbb{C} \ , \quad \|\Psi - \sum_j \Lambda_j \psi_j\| < \varepsilon \ . \tag{1.6}$$

Physiker nennen ein vollständiges System auch einfach Basis und vernachlässigen ε,

$$\Psi = \sum_j \Lambda_j \psi_j \ . \tag{1.7}$$

Die Komponenten ψ_i erhält man wegen (1.5) als Skalarprodukt mit Λ_i

$$\psi_i = \langle \Lambda_i | \Psi \rangle \ . \tag{1.8}$$

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. So wie in klassischer Mechanik die anfängliche Lage und die anfängliche Geschwindigkeit eines Massepunktes gemessen werden, so erschließt man in der Quantenmechanik durch Messen, welcher Zustand vorliegt.

1.2 Bracket-Schreibweise

Setzen wir die Komponenten in (1.7) ein, so erhalten wir

$$\Psi = \sum_j \Lambda_j \langle \Lambda_j | \Psi \rangle \ . \tag{1.9}$$

Das Skalarprodukt mit irgendeinem Vektor Φ führt zu folgendem Formelbild

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \Phi | \big(\sum_j \Lambda_j \langle \Lambda_j | \Psi \rangle \big) \rangle = \sum_j \langle \Phi | \Lambda_j \rangle \langle \Lambda_j | \Psi \rangle \ . \tag{1.10}$$

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

$$|\Psi\rangle = \sum_j |\Lambda_j\rangle \langle \Lambda_j | \Psi \rangle = \sum_j |\Lambda_j\rangle \psi_j \ . \tag{1.11}$$

Zerlegt man Ψ im Skalarprodukt $\langle \Psi | \Phi \rangle$, so erhält man wegen (1.2b) analog

$$\langle \Psi | = \sum_j \langle \Psi | \Lambda_j \rangle \langle \Lambda_j | = \sum_j \psi_j^* \langle \Lambda_j | \ . \tag{1.12}$$

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 Abbildung[1] von Vektoren auf Ket-Vektoren $\Psi \mapsto |\Psi\rangle$ ist linear, diejenige auf Bra-Vektoren $\Psi \mapsto \langle \Psi|$ antilinear:

$$\langle c\Psi | = \langle \Psi | \, c^* \ . \tag{1.13}$$

Die Abbildung von Bra- auf Ket-Vektoren ist eine Konjugation $|\Psi\rangle^* = \langle \Psi|$.

[1] Sie ähnelt einer militärischen Beförderung, bei der Streifen und Winkel hinzugefügt werden, ohne im übrigen etwas zu ändern.

1.3 Matrixalgebra

Gemäß (1.10) läßt sich das Skalarprodukt einfach aus den Komponenten berechnen.

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \sum_j \phi_j^* \psi_j \tag{1.14}$$

Ordnet man die Komponenten eines Ket-Vektors als Spalte an und die Komponenten des Bra-Vektors als Zeile – diese sind wegen (1.12) 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, eine lineare Abbildung, auf einen Vektor Ψ an, so erhält man den Spaltenvektor der Komponenten von $A\Psi$ durch Matrixmultiplikation der Matrix, die in der n-ten Zeile und m-ten Spalte das Matrixelement

$$A_{nm} = \langle \Lambda_n | A \Lambda_m \rangle \tag{1.15}$$

enthält, mit dem Spaltenvektor der Komponenten von Ψ,

$$(A\Psi)_n = \langle \Lambda_n | A\Psi \rangle = \sum_m \langle \Lambda_n | A \Lambda_m \rangle \langle \Lambda_m | \Psi \rangle = \sum_m A_{nm} \psi_m \ . \tag{1.16}$$

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

$$\langle \Lambda | A\Psi \rangle = \left\langle A^\dagger \Lambda \middle| \Psi \right\rangle \quad \forall \Lambda, \Psi \ . \tag{1.17}$$

Diese Definition des Adjungierten $A^\dagger$ wird insbesondere benötigt, wenn der Operator A nicht als Matrix vorliegt, sondern beispielsweise als Differentialoperator.

Mit ihr ergibt sich $(A^\dagger)^\dagger = A$ und (vergleiche (1.13))

$$\langle A\Lambda | = \langle \Lambda | \, A^\dagger \ , \tag{1.18}$$

daß der transformierte Bra-Vektor $\langle A\Lambda|$ auf Ket-Vektoren $|\Psi\rangle$ wie der adjungierte Operator $A^\dagger$ gefolgt von $\langle \Lambda|$ wirkt.

Adjungieren eines Produkts von Operatoren spiegelt die Reihenfolge

$$\langle \Lambda | AB\Psi \rangle = \left\langle A^\dagger \Lambda \middle| B\Psi \right\rangle = \left\langle B^\dagger A^\dagger \Lambda \middle| \Psi \right\rangle \ , \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \ , \tag{1.19}$$

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

$$(A^\dagger)_{nm} = \left\langle \Lambda_n \middle| A^\dagger \Lambda_m \right\rangle = \langle A\Lambda_n | \Lambda_m \rangle = \langle \Lambda_m | A \Lambda_n \rangle^* = A^*_{mn} \tag{1.20}$$

Hermitesche $n \times n$-Matrizen $A = A^\dagger$ bilden einen reellen, n^2-dimensionalen Vektorraum. Denn jedes komplexe Matrixelement A_{mn} legt mit seinem Real- und Imaginärteil auch das transponierte Matrixelement $A_{nm} = A^*_{mn}$ fest.

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

$$A = \sum_{nm} |\Lambda_n\rangle \, A_{nm} \, \langle \Lambda_m| \tag{1.21}$$

oder in konventionellerer Schreibweise als

$$A : \Psi \mapsto \sum_{nm} \Lambda_n A_{nm} \langle \Lambda_m | \Psi \rangle \ . \tag{1.22}$$

1.4 Projektoren, Zerlegung der Eins

Gemäß (1.11) wird jeder Zustand $|\Psi\rangle$ von $\sum_j |\Lambda_j\rangle \langle \Lambda_j|$ auf sich abgebildet, die Summe ist also der $\mathbb{1}$-Operator

$$\mathbb{1} = \sum_j |\Lambda_j\rangle \langle \Lambda_j| \ . \tag{1.23}$$

Die einzelnen Anteile

$$P_j = |\Lambda_j\rangle \langle \Lambda_j| \tag{1.24}$$

sind hermitesche Projektoren, $\langle \Phi | P_j \Psi \rangle = \langle \Phi | \Lambda_j \rangle \langle \Lambda_j | \Psi \rangle = \langle P_j \Phi | \Psi \rangle$,

$$P_j^2 = P_j \ , \ P_j = P_j^\dagger \ , \tag{1.25}$$

auf zueinander orthogonale Unterräume

$$P_i P_j = 0 \quad \text{falls} \quad i \neq j \ . \tag{1.26}$$

Die Darstellung (1.23) des $\mathbb{1}$-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

$$\langle \Gamma_i | \Psi \rangle = \sum_j \langle \Gamma_i | \Lambda_j \rangle \langle \Lambda_j | \Psi \rangle \ . \tag{1.27}$$

1.5 Endliche Norm

Der Hilbertraum der Zustände ist oft (abhängig von den präparierten und zu vermessenden Systemen) nicht endlichdimensional und die Summen über Basen 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

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_j \psi_j^* \psi_j < \infty \tag{1.28}$$

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

Für physikalische Zustände gilt einschränkender, daß die Betragsquadrate ihrer 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,

$$1 = \sum_i w(i, A, \Psi) = \sum_i |\psi_i|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle \ . \tag{1.29}$$

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 Vakuumzustand gelegentlich als $|0\rangle$ geschrieben wird. Die Bezeichnung $|\Omega\rangle$ für das Vakuum vermeidet diese Verwechslung.

1.6 Strahlen im Hilbertraum

Gemäß (1.5) und (1.29) gehören Zustände zu Vektoren auf der Einheitskugel des Hilbertraums. Aus der Grundgleichung (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

$$w(i, A, \Psi) = w(i, A, e^{i\alpha}\Psi) \quad \forall \alpha \in \mathbb{R} \ . \tag{1.30}$$

Demnach gehören physikalische Zustände zu Äquivalenzklassen von Einheitsvektoren mit der Äquivalenzrelation

$$\Psi \sim \Psi' \Leftrightarrow \exists \alpha \in \mathbb{R} : \Psi = e^{i\alpha}\Psi' \ . \tag{1.31}$$

Eleganter als der Begriff „Einheitsvektor bis auf eine Phase“ ist der gleichwertige Begriff eines „Strahls im Hilbertraum“. Der zum Vektor $\Psi \neq 0$ gehörige Strahl ist der komplex eindimensionale Unterraum,

$$\{\Psi\} = \{\lambda\Psi, \lambda \in \mathbb{C}\} \tag{1.32}$$

der von ihm aufgespannt wird. Die Menge der Strahlen eines n-dimensionalen Hilbertraums (mit anderen Worten eines n-Zustandssystems) ist der komplex projektive Raum CP^{n-1}. Diese Menge der physikalischen Zustände ist komplex $n-1$-dimensional, also reell $2n-2$-dimensional.

Ordnet man physikalischen Zuständen Strahlen im Hilbertraum zu, ist die Grundgleichung (1.1) für die Wahrscheinlichkeit von Meßwerten a_i so abzuändern, daß sie unabhängig von der Normierung der Vektoren $\Lambda_i \neq 0$ und $\Psi \neq 0$ wird, die man als Repräsentanten ihrer Strahlen wählt.

$$w(i, A, \Psi) = \frac{|\langle \Lambda_i | \Psi \rangle|^2}{\langle \Lambda_i | \Lambda_i \rangle \langle \Psi | \Psi \rangle} \tag{1.33}$$

Da Zustände Strahlen im Hilbertraum sind, kann man sie genau genommen nicht addieren. Zwar kann man die Vektoren addieren, aus denen zwei verschiedene Strahlen bestehen, aber die Summen bilden keinen Strahl, sondern einen zweidimensionalen Unterraum des Hilbertraumes.

Man kann also, genauer bedacht, aus Repräsentanten Ψ und Φ der zwei Strahlen auf viele Arten Superpositionen, die zu $a\Psi + b\Phi \neq 0$ gehörigen Strahlen, bilden. Dabei gehören $\lambda(a\Psi + b\Phi)$ mit $\lambda \neq 0$ für festes a und b zu demselben Zustand.

Die verschiedenen Superpositionen zweier verschiedener Zustände Ψ und Φ bilden den Raum $CP^1 = S^2$, jede gegebene Superposition kann also als Punkt einer zweidimensionalen Kugeloberfläche gedacht werden. Auf dieser Kugel zeichnet Ψ einen Punkt als Nordpol und die zu Ψ senkrechte Superposition $\Psi_\perp$ als Südpol aus, dem Äquator entsprechen die gleichgewichtigen Superpositionen $(\Psi + e^{i\alpha}\Psi_\perp)/\sqrt{2}$, deren relative Phase α wichtig ist. Außer durch die Herkunft ist keine Superposition auf natürliche Art gegenüber einer anderen ausgezeichnet.

Das Zusammenfassen zweier Zustände zu einer Superposition ist nicht, wie von Addition zu fordern, assoziativ und kommutativ und parameterfrei. Man sollte Superposition daher nicht schlampig Addition nennen.

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

$$P_{i,A} = \frac{|\Lambda_i\rangle\,\langle\Lambda_i|}{\langle\Lambda_i\,|\,\Lambda_i\rangle} \tag{1.34}$$

und

$$\rho = \frac{|\Psi\rangle\,\langle\Psi|}{\langle\Psi\,|\,\Psi\rangle} \tag{1.35}$$

darstellen. Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des i-ten Meßwertes a_i ist dann durch die Spur von ρ mal $P_{i,A}$ gegeben.

$$w(i, A, \rho) = \mathrm{tr}\,\rho\, P_{i,A} \tag{1.36}$$

Zur Erinnerung: Die Spur $\mathrm{tr}\,A$ eines Operators ist die Summe seiner Hauptdiagonalelemente. In jeder Orthonormalbasis ξ_j gilt

$$\mathrm{tr}\,A = \sum_j \langle\xi_j\,|\,A\xi_j\rangle\ . \tag{1.37}$$

Die Spur eines Operators ist zyklisch: $\mathrm{tr}\,AB = \mathrm{tr}\,BA$ mit der Folge $\mathrm{tr}\,ABC = \mathrm{tr}\,CAB$.

In der Form (1.36) kann die Grundgleichung leicht für den Fall verallgemeinert werden, in dem der Meßwert a entartet ist und mehrere, durch feinere Meßapparate unterscheidbare (und daher zueinander orthogonale) Zustände $\Lambda_{a,k}$, $k = 1, 2, \ldots$, zum Meßwert a gehören. Der Projektor $P_{i,A}$ ist dann zum Projektor $P_{a,A}$ auf den Unterraum derjenigen Zustände zu verallgemeinern, bei denen der Meßwert a mit Sicherheit auftritt.

$$P_{a,A} = \sum_k \frac{|\Lambda_{a,k}\rangle\,\langle\Lambda_{a,k}|}{\langle\Lambda_{a,k}\,|\,\Lambda_{a,k}\rangle} \tag{1.38}$$

Wenn der Zustand ρ vermessen wird, so ist

$$w(a, A, \rho) = \mathrm{tr}\, \rho\, P_{a,A} \tag{1.39}$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, daß der Meßapparat A den Meßwert a anzeigt.

1.7 Dichtematrix

Die Wahrscheinlichkeit (1.1) kann mit der Häufigkeit, mit der in Versuchsreihen die Meßwerte auftreten, erst dann sicher verglichen werden, wenn in der Quelle wiederholt derselbe Zustand Ψ präpariert wird. Dies ist bei vielen Quellen, zum Beispiel bei Öfen, nicht der Fall. Wenn ein 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 $p_1 w(i, A, \Psi_1)$ der Fall auf, daß der Zustand Ψ_1 präpariert und der i-te Meßwert a_i festgestellt wird, mit Wahrscheinlichkeit $p_2 w(i, A, \Psi_2)$ der Fall, daß der Zustand Ψ_2 präpariert und der i-te Meßwert festgestellt wird, und so weiter. Berücksichtigt man alle Möglichkeiten, so erhält man den i-ten Meßwert a_i mit Wahrscheinlichkeit

$$w(i, A, \rho) = \sum_n p_n w(i, A, \Psi_n) = \sum_n p_n \langle \Lambda_i | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \Lambda_i \rangle = \langle \Lambda_i | \rho \Lambda_i \rangle \ , \tag{1.40}$$

wobei die Dichtematrix ρ

$$\rho = \sum_n p_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| \tag{1.41}$$

das Gemisch in allen meßbaren Eigenschaften charakterisiert. Wir identifizieren daher das Gemisch mit seiner Dichtematrix ρ und reden vom Gemisch ρ.

Die Wahrscheinlichkeit, den i-ten Meßwert a_i festzustellen, ist das zugehörige Hauptdiagonalelement der Dichtematrix in der Basis der Eigenzustände des Meßapparates,

$$w(i, A, \rho) = \langle \Lambda_i | \rho \Lambda_i \rangle \ . \tag{1.42}$$

Die Wahrscheinlichkeit (1.42) kann in einer Versuchsreihe nur dann sicher mit der Häufigkeit von Meßwerten verglichen werden, wenn die Wahrscheinlichkeiten p_n 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 philosophischen Frage sind wir allerdings in der Praxis gnädig verschont, da wir diese Wellenfunktion nicht kennen.

Mit der Bezeichnung Gemisch benennt man den Normalfall, daß verschiedene Zustände $\Psi_1, \Psi_2, \ldots$ mit Wahrscheinlichkeiten $p_1, p_2, \ldots$ präpariert werden. Wird in Meßreihen immer derselbe Zustand Ψ präpariert, nennen wir das Gemisch (1.35)

$$\rho_{\text{rein}} = |\Psi\rangle \langle \Psi| \tag{1.43}$$

auch deutlicher einen reinen Zustand. Reine Zustände sind spezielle Gemische, bei denen eine Produktionswahrscheinlichkeit 1 ist und die anderen Produktionswahrscheinlichkeiten verschwinden. Genau dann, wenn ein Gemisch rein ist, erfüllt es die Gleichung

$$\rho^2 = \rho \;\Leftrightarrow\; \rho = \rho_{\mathrm{rein}} \;. \tag{1.44}$$

Jede Dichtematrix $\rho = \sum p_n P_n$ ist eine reelle Linearkombination von hermiteschen Projektoren $P_n = |\Psi_n\rangle\,\langle\Psi_n|$ (1.25), also ist ρ hermitesch.

Die Zustände Ψ_n, aus denen sich das Gemisch zusammensetzt, sind normalerweise nicht paarweise orthogonal und bilden normalerweise keine Basis. Normalerweise lassen sich die einzelnen Summanden $p_n\,|\Psi_n\rangle\,\langle\Psi_n|$ 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[2]

$$\rho\Upsilon_i = \rho_i\Upsilon_i \quad \text{mit} \quad \langle\Upsilon_i|\Upsilon_j\rangle = \delta^i{}_j \tag{1.45}$$

und damit die Dichtematrix, weil sie hermitesch ist, in der mit (1.41) zum Verwechseln ähnlichen Form

$$\rho = \sum_i \rho_i\,|\Upsilon_i\rangle\,\langle\Upsilon_i| \tag{1.46}$$

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

Jedes Hauptdiagonalelement $\langle\Lambda|\rho\Lambda\rangle$ und daher insbesondere jeder Eigenwert ρ_i der Dichtematrix ist nichtnegativ

$$\langle\Lambda|\rho\Lambda\rangle = \sum_n \langle\Lambda|p_n\Psi_n\rangle\,\langle\Psi_n|\Lambda\rangle = \sum_n p_n|\,\langle\Lambda|\Psi_n\rangle\,|^2 \geq 0 \;. \tag{1.47}$$

Ein Hauptdiagonalelement $\langle\Lambda|\rho\Lambda\rangle$ verschwindet genau dann, wenn alle Produkte $p_n\,\langle\Psi_n|\Lambda\rangle$ verschwinden, also wenn $\rho\Lambda$ Null ist,

$$\langle\Lambda|\rho\Lambda\rangle = 0 \Leftrightarrow \rho\Lambda = 0 \;. \tag{1.48}$$

Die Spur der Dichtematrix ist Eins so wie jede Summe von Wahrscheinlichkeiten über eine vollständige Menge von Ereignissen, die sich wechselseitig ausschließen,

$$\mathrm{tr}\,\rho = \sum_i \langle\Lambda_i|\rho\Lambda_i\rangle = \sum_{in} \langle\Lambda_i|p_n\Psi_n\rangle\,\langle\Psi_n|\Lambda_i\rangle = \sum_n \langle\Psi_n|p_n\Psi_n\rangle = \sum_n p_n = 1 \;. \tag{1.49}$$

1.8 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,

[2] Das Zeichen Υ ist der griechische Buchstabe Ypsilon.

so daß mit einer Wahrscheinlichkeit λ Teilchen aus dem ersten Strahl $\hat{\rho}$ und mit der Restwahrscheinlichkeit $(1-\lambda)$ Teilchen aus dem zweiten Strahl $\tilde{\rho}$ gewählt werden.

Wenn wir an dieser Mischung von Gemischen messen, so tritt mit Wahrscheinlichkeit $\lambda \langle \Lambda_i | \hat{\rho} \Lambda_i \rangle$ der Fall auf, daß der erste Strahl ausgewählt und a_i gemessen wird, mit Wahrscheinlichkeit $(1-\lambda) \langle \Lambda_i | \tilde{\rho} \Lambda_i \rangle$ der Fall, daß der zweite Strahl gewählt und a_i gemessen wird. Insgesamt wird mit Wahrscheinlichkeit

$$\lambda \langle \Lambda_i | \hat{\rho} \Lambda_i \rangle + (1-\lambda) \langle \Lambda_i | \tilde{\rho} \Lambda_i \rangle = \langle \Lambda_i | (\lambda \hat{\rho} + (1-\lambda) \tilde{\rho}) \Lambda_i \rangle \tag{1.50}$$

der Meßwert a_i gemessen. Die Mischung beider Gemische führt zu Wahrscheinlichkeitsverteilungen, die zur Dichtematrix

$$\rho(\lambda) = \lambda \hat{\rho} + (1-\lambda) \tilde{\rho} \ , \ 0 \leq \lambda \leq 1 \ , \tag{1.51}$$

gehört. $\rho(\lambda)$ heißt auch konvexe Summe von $\hat{\rho}$ und $\tilde{\rho}$.

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

Die Menge der Dichtematrizen ist eine konvexe Untermenge der hermiteschen Matrizen: mit je zwei Dichtematrizen $\tilde{\rho}$ und $\hat{\rho}$ sind alle Matrizen auf der Verbindungsstrecke auch Dichtematrizen. Denn wenn der Mischungsparameter λ die Zahlen zwischen Null und Eins durchläuft, so durchläuft $\rho(\lambda) = \lambda \hat{\rho} + (1-\lambda) \tilde{\rho}$ die Verbindungsstrecke. Dabei ist jedes $\rho(\lambda)$ eine Summe von Projektionsoperatoren $P_j = |\Psi_j\rangle \langle \Psi_j|$ mit nichtnegativen Produktionswahrscheinlichkeiten, also eine Dichtematrix.

Offensichtlich liegt jeder Punkt $\rho(\lambda)$ auf der Verbindungsstrecke (1.51) von $\hat{\rho}$ und $\tilde{\rho}$ für $0 \leq \lambda_1 < \lambda < \lambda_2 \leq 1$ auch auf der Verbindungsstrecke von $\rho(\lambda_1)$ nach $\rho(\lambda_2)$,

$$\rho(\lambda) = \frac{\lambda_2 - \lambda}{\lambda_2 - \lambda_1} \rho(\lambda_1) + \frac{\lambda \ - \lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \rho(\lambda_2) \ . \tag{1.52}$$

Weil Dichtematrizen hermitesch sind (1.20) und Spur Eins haben, bilden im n-Zustandssystem die Dichtematrizen mit positiven Eigenwerten eine $n^2 - 1$-dimensionale Mannigfaltigkeit: die hermiteschen Matrizen mit Spur Eins und mit Eigenwerten aus dem offenen Intervall $(0, 1)$.

Der Rand dieser Menge besteht aus den Dichtematrizen mit mindestens einem verschwindenden Eigenwert. Die reinen Zustände sind die $2n-2$-dimensionale Untermannigfaltigkeit CP^{n-1} derjenigen Dichtematrizen, deren Eigenwerte alle bis auf einen verschwinden. Ihre konvexe Hülle, das heißt die Menge, die man aus den reinen Zuständen durch wiederholte konvexe Summen erzeugt, ist die Menge der Gemische.

2 Operatoren

2.1 Erwartungswerte

Die Formel (1.36) 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. Der Mittelwert ist daher der Meßwert, den man erwartet. Deshalb nennen ihn Physiker auch 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 daher nicht zu erwarten ist.

Der Mittelwert $\langle A \rangle$ der Meßwerte des Apparates A ist die Summe der mit den Wahrscheinlichkeiten gewichteten Meßwerte a_i

$$\langle A \rangle = \sum_i a_i\, w(i, A, \rho) = \sum_i a_i \, \langle \Lambda_i \,|\, \rho \Lambda_i \rangle = \mathrm{tr}\Big(\sum_i a_i \,|\Lambda_i\rangle \, \langle \Lambda_i| \; \rho \Big) \; . \tag{2.1}$$

Er ist also durch

$$\langle A \rangle = \mathrm{tr}\, A\, \rho = \mathrm{tr}\, \rho\, A \tag{2.2}$$

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

$$A = \sum_i a_i \,|\Lambda_i\rangle \, \langle \Lambda_i| \tag{2.3}$$

bezeichnet. Er ist für den zugehörigen 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.

Leider bleiben die Hersteller von Meßapparaten von diesem Postulat unbeeindruckt und legen nicht den zugehörigen Operator der Gebrauchsanweisung bei.

Im Gegensatz zu weitverbreitetem Irrglauben entspricht das Anwenden des Operators auf den Zustand nicht der Messung des Zustands. Was aus einem Zustand $|\Psi\rangle$ bei der Messung mit einem Apparat A wird, hat nichts mit $|A\Psi\rangle$ zu tun.

Die Notation $\langle A \rangle$ für den Mittelwert $\mathrm{tr}\, \rho\, A$ stammt vom reinen Zustand (1.35). In diesem Fall gilt spezieller, wenn wir wieder ein normiertes Ψ verwenden,

$$\langle A \rangle = \langle \Psi \,|\, A \Psi \rangle \; . \tag{2.4}$$

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 unwesentlich ist, ob der Operator A auf das zweite oder das erste Argument des Skalarproduktes wirkt. Denn A ist eine reelle Linearkombination (2.3) von hermiteschen Projektionsoperatoren (1.25), also ebenfalls hermitesch

$$A = A^\dagger \ . \tag{2.5}$$

Mit $\langle\Lambda_i|\Lambda_j\rangle = \delta^i{}_j$ (1.5) folgt unmittelbar, daß die Zustände Λ_i Eigenzustände des Operators A sind und daß seine Eigenwerte die Meßwerte a_i sind,

$$A\Lambda_i = a_i\Lambda_i \ . \tag{2.6}$$

So ist ja in (2.3) der Operator A aus den Meßwerten und Eigenzuständen konstruiert.

Umgekehrt lassen sich bei gegebenem hermiteschem 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. Dies ergibt sich aus $A\Lambda = a\Lambda$ und $\langle\Lambda|\Lambda\rangle \neq 0$ mit der Argumentationskette

$$(a^* - a)\,\langle\Lambda|\Lambda\rangle = \langle a\Lambda|\Lambda\rangle - \langle\Lambda|a\Lambda\rangle = \langle A\Lambda|\Lambda\rangle - \langle\Lambda|A\Lambda\rangle = \left\langle\Lambda\middle|(A^\dagger - A)\Lambda\right\rangle = 0 \ . \tag{2.7}$$

Die Eigenzustände zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal zueinander,

$$(a_i - a_j)\,\langle\Lambda_i|\Lambda_j\rangle = \langle A\Lambda_i|\Lambda_j\rangle - \langle\Lambda_i|A\Lambda_j\rangle = 0\,, \quad a_i \neq a_j \Rightarrow \langle\Lambda_i|\Lambda_j\rangle = 0 \ . \tag{2.8}$$

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

$$\langle U\Phi|U\Psi\rangle = \left\langle U^\dagger U\Phi\middle|\Psi\right\rangle = \langle\Phi|\Psi\rangle \ . \tag{2.9}$$

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

$$U^\dagger = U^{-1} \text{ und } U\Psi = \lambda\Psi \Rightarrow \lambda = e^{i\alpha}\,, \quad \alpha \in \mathbb{R} \ . \tag{2.10}$$

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

2.2 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 Operator A nicht auf allen Vektoren Ψ definiert. Mit einer beliebig kleinen Änderung eines Zustandes, auf dem A definiert ist, kann man eine beliebig große Änderung des Erwartungswertes bewirken.

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 $\hbar\omega$

$$H\,|\Lambda_n\rangle = E_n\,|\Lambda_n\rangle\ ,\quad E_n = n\hbar\omega\ ,\quad n = 0, 1, 2, \dots\ . \tag{2.11}$$

Wir unterstellen, daß die Λ_n normiert sind. Dann bilden sie eine Orthonormalbasis (1.5) und ein allgemeiner Zustand kann als Linearkombination $|\Psi\rangle = \sum_n |\Lambda_n\rangle\,\psi_n$ mit quadratsummierbaren Komponenten $\psi_n \in \mathbb{C}$, $\sum_n |\psi_n|^2 < \infty$, geschrieben werden.

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

$$\langle\Lambda_n\,|\,H\Psi\rangle = \hbar\omega n\,\langle\Lambda_n\,|\,\Psi\rangle = \hbar\omega n\psi_n \tag{2.12}$$

ab. Es lassen sich nun leicht quadratsummierbare Komponenten angeben, beispielsweise $\psi_n = 1/(n+1)$, so daß die Komponenten $(H\psi)_n = \hbar\omega\, n\psi_n$ nicht quadratsummierbar sind. Damit ist H auf dem zu ψ_n gehörigen Vektor nicht definiert. Aber selbst wenn man diese Reihe bei großem n abbricht und mit einem genügend kleinen Vorfaktor zu einem physikalischen Zustand hinzufügt, dann zeigt sich, 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.

Zu jedem hermiteschen (genauer jedem wesentlich selbstadjungierten) Operator A gehört, wie die mathematische Untersuchung zeigt, eine Schar von Projektoren E_a, die auf den Unterraum der Zustände projiziert, bei denen nur Meßwerte kleiner gleich a auftreten. Diese Schar von Projektoren erfüllt

$$E_a\,E_b = E_{\min(a,b)}\ ,\quad \lim_{a\to-\infty} E_a = 0\ ,\quad \lim_{a\to\infty} E_a = 1\ ,\quad \lim_{\varepsilon\to 0+} E_{a+\varepsilon} = E_a \tag{2.13}$$

und heißt die zum Operator A gehörige spektrale Zerlegung. Sie ist auch bei kontinuierlichem Spektrum wohldefiniert. Mit ihr schreibt sich der Operator A als

$$A = \int \mathrm{d}E_a\, a\ . \tag{2.14}$$

Zahmer als ein Meßoperator mit unbeschränktem Spektrum sind die Projektoren E_a. Nur sie werden benötigt, um die Wahrscheinlichkeit $w(\Delta, A, \rho) = \mathrm{tr}\int_\Delta \mathrm{d}E_a\rho$ dafür anzugeben, daß der Meßwert beim Vermessen eines Gemisches ρ in einem Bereich Δ liegt.

2.3 Unschärfe

Die nach dem Mittelwert der Meßwerte eines Apparates A nächstwichtige Größe ist die Schwankung seiner Meßwerte, blumig sein Quantenrauschen, genauer der Erwartungswert der quadratischen Abweichung vom Mittelwert,

$$(\Delta_\rho A)^2 = \left\langle (A - \langle A\rangle)^2\right\rangle = \sum_n p_n\left\langle\Psi_n\,\middle|\,(A - \langle A\rangle)^2\Psi_n\right\rangle = \left\langle A^2\right\rangle - \langle A\rangle^2\ . \tag{2.15}$$

Die Größe $\Delta_\rho A$ heißt die Unschärfe oder Schwankung von A im Gemisch ρ. Die Unschärfe hängt vom hermiteschen Operator A und vom Gemisch ρ ab, auch wenn die weitverbreitete Notation ΔA die Abhängigkeit von ρ unterschlägt. Meßwerte haben nicht an sich Quantenfluktuationen, sondern schwanken mehr oder weniger in diesen oder jenen Zuständen. In Eigenzuständen verschwindet das Quantenrauschen.

Das Schwankungsquadrat $(\Delta_\rho A)^2$ ist nichtnegativ, denn es ist eine mit nichtnegativen Wahrscheinlichkeiten p_n gewichtete Summe von Längenquadraten,

$$\sum_n p_n \left\langle \Psi_n \middle| (A - \langle A \rangle)^2 \Psi_n \right\rangle = \sum_n p_n \left\langle (A - \langle A \rangle)\Psi_n \middle| (A - \langle A \rangle)\Psi_n \right\rangle \geq 0 \ . \tag{2.16}$$

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

$$0 = \sum_n p_n \|(A - \langle A \rangle)\Lambda_n\|^2 \Leftrightarrow (A - a)\Lambda_n = 0 \text{ oder } p_n = 0 \ . \tag{2.17}$$

Die Summe $\sum_n p_n \|\big(C + iD\big)\Psi_n\|^2$ ist nicht negativ. Aus dieser Bemerkung folgt eine allgemeine untere Schranke für das Produkt $\Delta_\rho A \Delta_\rho B$ der Schwankungen von hermiteschen Operatoren A und B im Gemisch ρ. Mit der Schreibweise

$$[C, D] = CD - DC \tag{2.18}$$

für den Kommutator von C mit D gilt für hermitesche Operatoren C und D

$$\begin{aligned} 0 \leq \sum_n p_n \|\big(C + iD\big)\Psi_n\|^2 &= \sum_n p_n \left\langle \big(C + iD\big)\Psi_n \middle| \big(C + iD\big)\Psi_n \right\rangle \qquad (2.19) \\ = \sum_n p_n \left\langle \Psi_n \middle| \big(C - iD\big)\big(C + iD\big)\Psi_n \right\rangle &= \sum_n p_n \left\langle \Psi_n \middle| \big(C^2 + D^2 + i[C, D]\big)\Psi_n \right\rangle \ . \end{aligned}$$

Wir werten diese Ungleichung für $C = \Delta_\rho B\,(A - \langle A \rangle)$ und $D = \Delta_\rho A\,(B - \langle B \rangle)$ aus

$$0 \leq 2(\Delta_\rho A)^2\,(\Delta_\rho B)^2 + i\,\Delta_\rho A\,\Delta_\rho B\,\left\langle [A, B] \right\rangle \ . \tag{2.20}$$

Falls $\Delta_\rho A\,\Delta_\rho B$ nicht verschwindet, ist

$$\Delta_\rho A \Delta_\rho B \geq \pm\frac{1}{2} i \left\langle [A, B] \right\rangle \ . \tag{2.21}$$

Diese Ungleichung gilt mit beiden Vorzeichen vor dem Kommutator, da sie für alle hermiteschen A und B gilt, also auch, wenn wir A mit B vertauschen und damit das Vorzeichen des Kommutators wechseln.

Auch für $\Delta_\rho A = 0$ (oder $\Delta_\rho B = 0$) ist die allgemeine Unschärferelation

$$\Delta_\rho A \Delta_\rho B \geq \left|\frac{1}{2} \left\langle [A, B] \right\rangle\right| \tag{2.22}$$

erfüllt, denn ρ ist dann aus Eigenzuständen zu A (oder B) zu einem Eigenwert a gemischt, $A\Psi_n = a\Psi_n$, und der Erwartungswert eines Kommutators $[A, B]$ verschwindet in jedem Eigenzustand von A (oder B),

$$\langle [A, B] \rangle = \sum_n p_n \langle \Psi_n | [A, B] \Psi_n \rangle = \sum_n p_n \langle \Psi_n | (aB - Ba) \Psi_n \rangle = 0 \ . \qquad (2.23)$$

Das Schwankungsquadrat nimmt beim Mischen nicht ab. Mit $\rho(\lambda) = \lambda\hat{\rho} + (1-\lambda)\tilde{\rho}$ ist

$$(\Delta_{\rho(\lambda)} A)^2 = \mathrm{tr}\, \rho(\lambda) A^2 - (\mathrm{tr}\, \rho(\lambda) A)^2 \qquad (2.24)$$

ein quadratisches Polynom in λ, wobei der Koeffizient bei λ^2, $-(\mathrm{tr}(\hat{\rho} - \tilde{\rho})A)^2$, nicht positiv ist. Das Schwankungsquadrat von $\rho(\lambda)$ ist demnach eine konkave Funktion des Mischungsparameters

$$(\Delta_{\rho(\lambda)} A)^2 \geq \lambda (\Delta_{\hat{\rho}} A)^2 + (1 - \lambda)(\Delta_{\tilde{\rho}} A)^2 \ . \qquad (2.25)$$

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

2.4 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 (2.18) verschwindet,

$$[A, B] = 0 \ . \qquad (2.26)$$

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

$$[A, B] = 0 \wedge (A - a_i)\Lambda_i = 0 \Rightarrow (A - a_i)(B\Lambda_i) = B(A - a_i)\Lambda_i = 0 \qquad (2.27)$$

und kann in diesem Unterraum diagonalisiert werden. Ist die Dimension d_i von $\mathcal{H}_i$ größer als 1, so ist der Meßwert a_i entartet und es gibt linear unabhängige Eigenvektoren Λ_{ij} zu A und B, die durch zwei Quantenzahlen abgezählt werden, die zu den Eigenwerten der zwei miteinander vertauschenden Operatoren gehören,

$$A\Lambda_{ij} = a_i \Lambda_{ij} \quad B\Lambda_{ij} = b_{ij} \Lambda_{ij} \quad j = 1, \ldots, d_i \ . \qquad (2.28)$$

Beispielsweise werden die Bindungszustände $\Lambda_{n,l,m}$ des Wasserstoffatoms durch drei Quantenzahlen n, l, m abgezählt, die Hauptquantenzahl $n = 1, 2, \ldots$, die Nebenquantenzahl $l = 0, 1, \ldots, n-1$ und die magnetische Quantenzahl $m = -l, -l+1, \ldots, l$, die zu den drei miteinander vertauschenden Operatoren H, $\vec{L}^2$ und L_z gehören.

In vielen Beispielen ergeben sich wesentliche Eigenschaften des Energiespektrums daraus, daß der Hamiltonoperator H mit einem weiteren Operator vertauscht, $[H, U_l] = 0$ (4.48), oder aus miteinander vertauschenden Summanden besteht (4.79).

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

Ist B in denselben Unterräumen entartet wie A, so ist $B = f(A)$ eine Funktion von A. B ist dann kein wesentlich anderer Meßapparat, sondern 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. Bei solchen Messungen werden alle Zustände Ψ schon vollständig durch die Betragsquadrate der Skalarprodukte $\langle\Lambda|\Psi\rangle$ mit den gemeinsamen Eigenzuständen Λ der kommutierenden Meßoperatoren charakterisiert, also durch eine klassische Wahrscheinlichkeitsverteilung. Erst Messungen, deren Operatoren nicht miteinander vertauschen, sind empfindlich auf die komplexen Phasen der Komponenten von Ψ. Daher sind Kommutatorrelationen in der Quantenmechanik wichtig.

Die wesentlichen algebraischen Eigenschaften des Kommutators sind Antisymmetrie, Linearität und Produktregel

$$[A, B] = -[B, A] \,, \tag{2.29a}$$

$$[A, \lambda_1 B + \lambda_2 C] = \lambda_1 [A, B] + \lambda_2 [A, C] \quad \forall \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C} \,, \tag{2.29b}$$

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \;. \tag{2.29c}$$

Wegen der Antisymmetrie und weil hermitesch Adjungieren die Reihenfolge vertauscht (1.19), ist der Kommutator hermitescher Operatoren antihermitesch,

$$[A, B]^\dagger = -[A^\dagger, B^\dagger] \;. \tag{2.30}$$

Aus der Regel für Produkte folgt die Produktregel für Kommutatoren, die Jacobi-Identität,

$$\begin{aligned} [A, [B, C]] &= [[A, B], C] + [B, [A, C]] \\ [A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] &= 0 \;. \end{aligned} \tag{2.31}$$

Die Operation „Kommutator nehmen mit dem Operator A" ist eine lineare Abbildung,

$$\mathrm{ad}_A : C \mapsto \mathrm{ad}_A(C) = [A, C] \;, \tag{2.32}$$

die zu A adjungierte Abbildung ad_A des Vektorraums der Operatoren C.[1] Sie verhält sich wie Ableiten: auf Produkte BC angewendet (2.29c), erfüllt sie die Produktregel

$$\mathrm{ad}_A(BC) = \mathrm{ad}_A(B)C + B\,\mathrm{ad}_A(C) \;. \tag{2.33}$$

[1]Die adjungierte Abbildung ad_A hat nichts mit dem hermitesch adjungierten Operator $A^\dagger$ zu tun.

Dabei bleibt der linke Faktor B jeweils links vom rechten Faktor C: die Reihenfolge der Faktoren des Produkts bleibt in der Produktregel unverändert.

Der Kommutator zweier adjungierter Abbildungen ist die adjungierte Abbildung des Kommutators (2.31)

$$[\mathrm{ad}_A, \mathrm{ad}_B] = \mathrm{ad}_{[A,B]}\ . \tag{2.34}$$

Die Eigenwerte λ der Abbildung ad_A sind Schrittweiten im Spektrum von A. Denn wenn der Operator C Eigenvektor von ad_A ist, wenn also $[A, C] = \lambda C$ gilt, und wenn Λ_n Eigenzustand von A mit Eigenwert n ist, $A\Lambda_n = n\Lambda_n$, so ist $C\Lambda_n$, wenn es nicht verschwindet, Eigenzustand von A mit Eigenwert $n + \lambda$,

$$A\bigl(C\Lambda_n\bigr) = \bigl([A, C] + CA\bigr)\Lambda_n = \lambda C\Lambda_n + Cn\Lambda_n = (n + \lambda)\bigl(C\Lambda_n\bigr)\ . \tag{2.35}$$

Ein Eigenvektor C von ad_A fügt also ein Quantum λ zum A-Eigenwert (Meßwert) hinzu. Ist A hermitesch, so ist $C^\dagger$ Eigenvektor von ad_A mit Eigenwert $-\lambda$ und nimmt das Quantum λ vom Eigenwert weg. Das rechtfertigt, C und $C^\dagger$ als Leiteroperatoren, Auf- und Absteiger oder Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren zu bezeichnen.

2.5 Heisenbergalgebra, Erzeuger, Vernichter

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

$$[X, P] = i\hbar \tag{2.36}$$

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

Wie Stone und von Neumann bewiesen haben [14], ist jede irreduzible Darstellung der Heisenbergschen Vertauschungsrelation mit hermiteschen Operatoren X und P unitär äquivalent zur Wirkung der multiplikativen[2] und differentiellen Operatoren

$$X : \Psi \mapsto X\Psi\ ,\ (X\Psi)(x) = x\,\Psi(x)\ ,\quad P : \Psi \mapsto P\Psi\ ,\ (P\Psi)(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x)\ , \tag{2.37}$$

angewendet auf quadratintegrable Funktionen $\Psi : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ mit dem Skalarprodukt[3]

$$\langle\Psi|\Phi\rangle = \int \mathrm{d}x\, \Psi^*(x)\, \Phi(x)\ . \tag{2.38}$$

[2] X multipliziert mit der Funktion $f : x \mapsto f(x) = x$, nicht mit einer Konstanten λ. Dies mache man sich durch Zeichnen des Funktionsgraphen von $\Psi(x) = \exp(-x^2/l^2)$ und $(X\Psi)(x) = x\exp(-x^2/l^2)$ klar.

[3] Kovariant formulierte String-Theorie unterstellt solche Heisenbergpaare $[X^m, P_n] = i\,\hbar\delta^m{}_n$ und verlangt einschränkender, daß die Wellenfunktion physikalischer Zustände außerhalb diskreter Massenschalen, also außerhalb einer Menge vom Maß Null, verschwindet. Nach dem Stone-von Neumann-Theorem verschwindet jedes Skalarprodukt solcher Zustände, sie sind Null. Es gibt sie nicht.

Sei x_0 eine nichtverschwindende Länge, dann erfüllen die komplexen Linearkombinationen

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{X}{x_0} + \frac{i}{\hbar}x_0 P) \ , \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{X}{x_0} - \frac{i}{\hbar}x_0 P) \tag{2.39}$$

des Orts- und des Impulsoperators die Erzeuger-Vernichter-Algebra

$$[a, a] = 0 \, , \ [a^\dagger, a^\dagger] = 0 \, , \ [a, a^\dagger] = 1 \ , \tag{2.40}$$

und es existiert eine Orthonormalbasis

$$\Lambda_{n,\tau} = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} \Lambda_{0,\tau} \, , \ n = 0, 1, 2, \dots \ , \tag{2.41}$$

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

$$a\Lambda_{n,\tau} = \sqrt{n}\Lambda_{n-1,\tau} \ , \quad a^\dagger \Lambda_{n,\tau} = \sqrt{n+1}\Lambda_{n+1,\tau} \ . \tag{2.42}$$

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

$$a^\dagger a \, \Lambda_n = n \, \Lambda_n \ . \tag{2.43}$$

Mit der Produktregel folgt aus der Erzeuger-Vernichter-Algebra (2.40), daß die Operatoren a und $a^\dagger$ Eigenvektoren der zu $a^\dagger a$ adjungierten Abbildung $\mathrm{ad}_{a^\dagger a}$ (2.32) sind. mit den Eigenwerten $\lambda = -1$ und $\lambda = 1$,

$$[a^\dagger a, a] = -a \, , \quad [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger \ . \tag{2.44}$$

Folglich (2.35) erniedrigen und erhöhen a und $a^\dagger$, angewendet auf einen Eigenzustand Λ_n von $a^\dagger a$, den Eigenwert um -1 und $+1$

$$\begin{aligned} \big(a^\dagger a\big) a^\dagger \Lambda_n &= (n+1) a^\dagger \Lambda_n \ , \\ \big(a^\dagger a\big) a \, \Lambda_n &= (n-1) a \, \Lambda_n \ . \end{aligned} \tag{2.45}$$

Da der Operator a den $a^\dagger a$-Eigenwert erniedrigt, heißt er Vernichter. Entsprechend ist $a^\dagger$ der Erzeugungsoperator.

Ist Λ_n normiert, so ergeben sich die Normen von $a\Lambda_n$ und $a^\dagger \Lambda_n$ aus der Algebra und der Eigenwertgleichung

$$\langle a\Lambda_n | a\Lambda_n \rangle = \big\langle \Lambda_n \big| a^\dagger a \Lambda_n \big\rangle = n \tag{2.46a}$$

$$\big\langle a^\dagger \Lambda_n \big| a^\dagger \Lambda_n \big\rangle = \big\langle \Lambda_n \big| a a^\dagger \Lambda_n \big\rangle = \big\langle \Lambda_n \big| ([a, a^\dagger] + a^\dagger a) \Lambda_n \big\rangle = n + 1 \ . \tag{2.46b}$$

Diese Normen sind nicht negativ (1.4). Daher ist n nicht negativ. Wiederholtes Anwenden des Vernichter-Operators a erniedrigt den Anzahleigenwert in ganzen Schritten und muß, bevor n negativ wird, einen Eigenzustand $\Lambda_0 \neq 0$ ergeben, der durch weiteres Anwenden von a auf Null abgebildet wird

$$a\Lambda_0 = 0 \ . \tag{2.47}$$

Solch ein Zustand heißt Grundzustand. Er hat nach (2.43) Anzahleigenwert $n = 0$. Demnach ist jeder Anzahleigenwert n ganzzahlig und nicht negativ. Das Spektrum des Anzahloperators $a^\dagger a$ besteht aus den ganzen, nichtnegativen Zahlen

$$a^\dagger a\, \Lambda_n = n\, \Lambda_n\,, \quad n = 0, 1, 2, \dots\,. \tag{2.48}$$

Man wählt im Raum aller Grundzustände eine Orthonormalbasis $\Lambda_{0,\tau}$ und betrachtet die Vektoren (2.41), die durch n-faches Anwenden des Erzeugungsoperators $a^\dagger$ 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

$$\begin{aligned}(a^\dagger)^n a^n \Lambda_n &= (a^\dagger)^{n-1}(a^\dagger a)a^{n-1}\Lambda_n = (a^\dagger)^{n-1}(n-(n-1))a^{n-1}\Lambda_n = \\ &= 1\cdot(a^\dagger)^{n-2}(a^\dagger a)a^{n-2}\Lambda_n = 1\cdot 2\cdot(a^\dagger)^{n-3}(a^\dagger a)a^{n-3}\Lambda_n = \dots = n!\,\Lambda_n\,.\end{aligned} \tag{2.49}$$

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

2.6 Drehimpulsalgebra

Ein weiteres Beispiel für Kommutatorrelationen ist die Drehimpulsalgebra

$$[L_i, L_j] = i\,\hbar\,\epsilon_{ijk}\,L_k\,, \quad i, j, k \in \{1, 2, 3\}\,. \tag{2.50}$$

Ein Vektorraum mit einem bilinearen Produkt $[A, B]$, das so wie der Kommutator antisymmetrisch ist und die Jacobi-Identität (2.31) erfüllt, ist eine Lie-Algebra. Also sind die Drehimpulsoperatoren Basiselemente einer Lie-Algebra, genauer spannen $-i\,L_i/\hbar$ die zur Drehgruppe in drei Dimensionen, der SO(3), gehörige reelle Lie-Algebra auf.

In (2.50) stehen auf der linken Seite Produkte zweier Drehimpulsoperatoren. Die rechte Seite ist linear im Drehimpuls, daher enthalten die Koeffizienten, genauso wie die Heisenbergalgebra (2.36), einen Faktor $\hbar$ von der Dimension eines Drehimpulses $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$.

Da die Drehimpulsoperatoren L_i hermitesch sind, muß in (2.50) ein Faktor i auftreten, denn der Kommutator hermitescher Operatoren ist antihermitesch (2.30).

Wenn die hermiteschen Drehimpulsoperatoren L_i existieren, so hat der Hilbertraum $\mathcal{H}$ eine Orthonormalbasis $\Lambda_{l,m,\tau}$. Dabei ist τ ein Entartungsindex, die Quantenzahl l legt den Eigenwert $\hbar^2\, l(l+1)$ des Operators $\vec{L}^2$ fest. Die Drehimpulsoperatoren ändern nicht die Werte von l und τ und lassen jeden Unterraum invariant, der von den Basisvektoren mit festen Werten von l und τ aufgespannt wird.

Wir beschränken uns auf solch einen Unterraum, ein Drehimpulsmultiplett mit Gesamtdrehimpuls l, und schreiben kürzer $\Lambda_{l,m}$ statt $\Lambda_{l,m,\tau}$. Das Drehimpulsmultiplett ist $2l+1$-dimensional (mögliche Werte von l sind daher $0, 1/2, 1, 3/2, \dots$) und wird von Basisvektoren mit den m-Werten $-l, -l+1, \dots, +l$ aufgespannt. Auf ihnen wirken die

Drehimpulsoperatoren gemäß

$$L_3\Lambda_{l,m} = \hbar\, m\, \Lambda_{l,m}\ , \tag{2.51a}$$

$$(L_1 + iL_2)\Lambda_{l,m} = \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,\Lambda_{l,m+1}\ , \tag{2.51b}$$

$$(L_1 - iL_2)\Lambda_{l,m} = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,\Lambda_{l,m-1}\ . \tag{2.51c}$$

Dies läßt sich folgendermaßen aus der Drehimpulsalgebra erschließen. Der Gesamtdrehimpuls

$$L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 \tag{2.52}$$

vertauscht mit jedem der Drehimpulsoperatoren L_1, L_2 und L_3. Denn Drehimpulsoperatoren erzeugen Drehungen und lassen Längenquadrate von Vektoren, wie $x^2 + y^2 + z^2$ oder L^2, invariant,

$$[L_i, L^2] = 0\ . \tag{2.53}$$

Die Drehimpulsoperatoren bilden daher Unterräume $\mathcal{H}_l$ von Eigenzuständen von L^2 mit festem Eigenwert $\hbar^2\lambda$ auf sich ab (2.27). Man kann dort gemeinsame Eigenzustände $\Lambda_{l,m}$ zu L^2 und L_3 finden,

$$L^2\Lambda_{l,m} = \hbar^2\,\lambda\,\Lambda_{l,m}\ ,\quad L_3\Lambda_{l,m} = \hbar\, m\,\Lambda_{l,m}\ . \tag{2.54}$$

Die komplexen Linearkombinationen

$$L_+ = L_1 + iL_2\ ,\quad L_- = L_1 - iL_2 = (L_+)^\dagger \tag{2.55}$$

sind Eigenvektoren von ad_{L_3} (2.32) mit Eigenwerten $\hbar$ und $-\hbar$,

$$[L_3, L_+] = \hbar\, L_+\ ,\quad [L_3, L_-] = -\hbar\, L_-\ . \tag{2.56}$$

Angewendet auf einen L_3-Eigenzustand mit Eigenwert $\hbar m$ (2.54), ergeben L_+ und L_- L_3-Eigenzustände mit Eigenwerten $\hbar(m+1)$ und $\hbar(m-1)$ oder Null (2.35),

$$L_3\big(L_+\Lambda_{l,m}\big) = \hbar(m+1)\big(L_+\Lambda_{l,m}\big)\ ,\ L_3\big(L_-\Lambda_{l,m}\big) = \hbar(m-1)\big(L_-\Lambda_{l,m}\big)\ . \tag{2.57}$$

Da L_+ und L_- die L_3-Eigenwerte mit konstanter Schrittweite um ihren ad_{L_3}-Eigenwert erhöhen, heißen sie auch Leiteroperatoren oder Aufsteiger und Absteiger.

Der Kommutator von L_+ mit L_- ergibt

$$[L_+, L_-] = 2\hbar\, L_3\ . \tag{2.58}$$

Ist $\Lambda_{l,m}$ normiert, so besagt $L_-L_+ = L^2 - L_3^2 - \hbar L_3$ für die Norm von $L_+\Lambda_{l,m}$

$$\begin{aligned}\langle L_+\Lambda_{l,m}|L_+\Lambda_{l,m}\rangle &= \langle\Lambda_{l,m}|L_-L_+\Lambda_{l,m}\rangle = \langle\Lambda_{l,m}|(L^2 - L_3^2 - \hbar L_3)\Lambda_{l,m}\rangle = \\ &= \langle\Lambda_{l,m}|\hbar^2(\lambda - m(m+1))\Lambda_{l,m}\rangle = \hbar^2(\lambda - m(m+1))\ .\end{aligned} \tag{2.59}$$

Wir erhalten so und mit $L_+L_- = L^2 - L_3^2 + \hbar L_3$ ebenso

$$\begin{aligned}\langle L_+\Lambda_{l,m}|L_+\Lambda_{l,m}\rangle &= \hbar^2(\lambda - m(m+1))\ ,\\ \langle L_-\Lambda_{l,m}|L_-\Lambda_{l,m}\rangle &= \hbar^2(\lambda - m(m-1))\ .\end{aligned} \tag{2.60}$$

Diese Normen sind nicht negativ (1.4), daher ist bei gegebenem λ die Quantenzahl m nach unten und oben beschränkt und L_+, angewendet auf den Eigenzustand mit maximalem m, muß verschwinden. Bezeichnen wir mit $l = m_{\max}$ die maximale m-Quantenzahl, so gilt also $\lambda = l(l+1)$,

$$L^2\Lambda_{l,m} = \hbar^2\, l(l+1)\,\Lambda_{l,m}\ . \tag{2.61}$$

Ebenso muß L_- auf dem Zustand mit minimalem m verschwinden. Die quadratische Gleichung $\lambda = l(l+1) = m_{\min}(m_{\min}-1)$ hat die Lösung $m_{\min} = -l$ (die Lösung $m_{\min} = l+1$ ist größer als $m_{\max}$),

$$m_{\max} = l\ , \quad m_{\min} = -l\ . \tag{2.62}$$

Da man durch wiederholtes Anwenden von L_+ auf den Zustand mit minimalem L_3-Eigenwert $m_{\min} = -l$ 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 den Basiszuständen $\Lambda_{l,m}$ mit den m-Quantenzahlen $-l, -l+1, \dots, +l$ aufgespannt wird. Die Normierungsfaktoren in (2.60) sind wegen $\lambda = l(l+1)$ quadratische Polynome in l und m. Sie verschwinden für $l = m$, beziehungsweise $l = -m$, lassen sich also restlos durch $(l-m)$, beziehungsweise $(l+m)$, teilen,

$$l(l{+}1){-}m(m{+}1) = (l{-}m)(l{+}m{+}1)\ \ ,\ \ l(l{+}1){-}m(m{-}1) = (l{+}m)(l{-}m{+}1)\ . \tag{2.63}$$

Für $l = 1/2$ wirken die Drehimpulsoperatoren, die Spin-$1/2$-Operatoren S_1, S_2 und S_3, in einem zweidimensionalen Raum auf die Spinoren des Spin-1/2-Multipletts. Da ein Operator auf die Komponenten von Zuständen durch Multiplikation mit derjenigen Matrix wirkt, deren Spalten die Komponenten der Bilder der Basisvektoren enthalten, wirken die Spin-1/2-Operatoren wegen (2.51) in der Basis $\Lambda_\uparrow$ $(m = 1/2)$ und $\Lambda_\downarrow$ $(m = -1/2)$ auf Spinorkomponenten durch Multiplikation mit dem $\hbar/2$-fachen der Pauli-Matrizen,

$$S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i\ ,\quad i \in \{1,2,3\}\ , \tag{2.64}$$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\ ,\ \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\ ,\ \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\ . \tag{2.65}$$

Die Produkte der Pauli-Matrizen sind

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}\mathbb{1} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k\ . \tag{2.66}$$

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

$$U_{\alpha n} = \exp(-\frac{i\alpha}{\hbar} n \cdot L)\ . \tag{2.67}$$

Für Spin-$1/2$ läßt sich die zu (2.67) gehörige Matrix leicht angeben, weil die e-Reihe wegen $(i\,n\cdot\sigma)^2 = -\mathbb{1}$ (2.66) wie bei der Euler-Formel $e^{-i\alpha} = \cos\alpha - i\sin\alpha$ summiert werden kann $(n\cdot\sigma = n_1\sigma_1 + n_2\sigma_2 + n_3\sigma_3)$,

$$U_{\alpha n} = \exp(-\frac{i\alpha}{2} n\cdot\sigma) = \mathbb{1}\,\cos\alpha/2\ - i\,n\cdot\sigma\,\sin\alpha/2\ . \tag{2.68}$$

Jede Drehung um 2π führt einen Spin-$1/2$-Spinor in sein Negatives über, $U_{2\pi n} = -\mathbb{1}$.

2.7 Messung eines Spin-1/2-Gemisches

Für Systeme mit zwei Basiszuständen Λ_1, Λ_2 lassen sich für alle Messungen die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der zwei Meßwerte an allen Zuständen mit wenigen Parametern charakterisieren. Prominentes Beispiel für Zweizustandssysteme sind Spin-1/2-Teilchen, die mit Stern-Gerlach-Apparaten untersucht werden. Bei dem Zweizustandssystem kann es sich aber auch um ein Atom handeln, bei dem 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 diese Intensität von der Analyserichtung abhängt.

Die Dichtematrix ρ, die das zu messende Zweizustandssystem charakterisiert, ist eine hermitesche Matrix mit Spur 1. 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 (2.65) an. Wegen der Normierungsbedingung $\operatorname{tr}\rho = 1$ ist der Koeffizient bei der $\mathbb{1}$-Matrix $1/2$. Daher hat die allgemeinste Dichtematrix eines Zweizustandssystems die Form

$$\rho = \frac{1}{2}\,\mathbb{1} + a\sigma_1 + b\sigma_2 + c\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1/2 + c & a - ib \\ a + ib & 1/2 - c \end{pmatrix} \ , \ (a, b, c) \in \mathbb{R}^3 \tag{2.69}$$

mit $a^2 + b^2 + c^2 \leq 1/4$, denn die Eigenwerte von ρ sind nicht negativ (1.47). Die Punkte (a, b, c), die zu einer möglichen Dichtematrix des Zweizustandssystems gehören, liegen also in einer Kugel, der sogenannten Blochkugel. Die Randpunkte der Kugel gehören (bei Zweizustandssystemen) zu Dichtematrizen mit einem Eigenwert 1 und verschwindendem anderen Eigenwert, also zu reinen Zuständen. Offensichtlich ist die Blochkugel die konvexe Hülle ihrer Randfläche.

Wir können die Dichtematrix (2.69) durch Wahl der Basisvektoren des Zweizustandssystems vereinfachen. Wählen wir als Basis die Eigenvektoren von ρ, so wird die zu ρ gehörige Matrix diagonal. Ihre Eigenwerte $1/2 \pm c'$ nennen wir einfachheitshalber wieder $1/2 \pm c$,

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 + c & 0 \\ 0 & 1/2 - c \end{pmatrix} \ . \tag{2.70}$$

Wählen wir spezieller als ersten Eigenvektor denjenigen, der zum größeren Eigenwert gehört, so ist c nichtnegativ. Zudem ist das Hauptdiagonalelement $1/2 - c$ nichtnegativ. 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 diese zu berechnen, brauchen wir gemäß (1.42) 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 $\theta/2$, $0 \le \theta \le \pi$. Eine gemeinsame Phase der Komponenten ist irrelevant. Wir wählen die Phase so, daß die Zustände Λ für alle Richtungen außer der negativen z-Richtung (dem Südpol) stetig von der Richtung des Meßapparates abhängen[4]

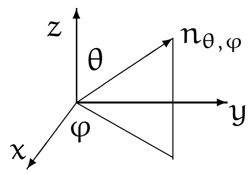
$$\Lambda = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2)e^{+i\varphi} \end{pmatrix} \tag{2.71}$$

Die Winkel θ und φ haben geometrische Bedeutung. Der Zustand Λ (2.71) ist Eigenzustand zum Meßwert $\hbar/2$ des Spin-1/2-Operators

$$S_{\theta,\varphi} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\left(n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z\right) , \tag{2.72}$$

der den Spin in Richtung von $n_{\theta,\varphi}$ mißt.

$$n_{\theta,\varphi} = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi \\ \cos\theta \end{pmatrix} \tag{2.73}$$



Der Vektor $n_{\theta,\varphi}$ 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 $\langle\Lambda|\rho\Lambda\rangle$ gibt nach (1.42) die Wahrscheinlichkeit $w_{\theta,\varphi}(\uparrow)$ an, mit der bei Messung des Spins in Richtung $n_{\theta,\varphi}$ der Spin nach oben steht. Mit (2.70) und (2.71) berechnet man

$$w_{\theta,\varphi}(\uparrow) = 1/2 + c\cos\theta . \tag{2.74}$$

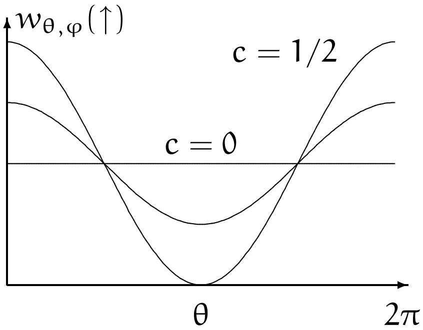


Abbildung 2.1: Strahlaufspaltung bei Spin 1/2

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

Die Wahrscheinlichkeit ist in Abbildung (2.1) 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 die Richtung, in der bei Spin-Messung im Gemisch ρ am meisten Teilchen Spin nach oben haben. Dies

[4]Es gibt keine Wahl der Phase, so daß die Zustände Λ eine stetige Funktion von S^2, der Menge aller Richtungen, sind. Will man eine stetige Größe, die von dieser Phase abhängt, in ganz S^2 beschreiben, muß man S^2 mit mehreren Koordinatenumgebungen überdecken, in denen die Größe stetig ist. Wo zwei Umgebungen überlappen, muß man die Größe von einem ins andere System umrechnen können.

ist beim Gemisch (2.69) die Richtung von (a, b, c). Mißt man in dieser Richtung, so ist der Anteil der Teilchen mit Spin nach oben $1/2 + l$, wobei l die Länge von (a, b, c) ist. Durch Bestimmung dieser Richtung und den Wert der Spinmessung in dieser Richtung sind die drei Parameter der Dichtematrix festgelegt. Die Spinwerte in Richtungen, die mit (a, b, c) einen Winkel θ einschließen, werden durch Abbildung 2.1 vorhergesagt, falls man Spin-1/2-Teilchen mißt.

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 (2.1) 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 (2.71) gehen durch eine Drehung um 2π in ihr Negatives (2.68), nicht aber in den Zustand mit entgegengesetztem Spin, über.

$$U_{2\pi}\Lambda_\uparrow = -\Lambda_\uparrow \neq \Lambda_\downarrow \tag{2.75}$$

Das negative Vorzeichen ist nur eine unmeßbare Phase. Es ist der Strahl im Hilbertraum, das heißt der Vektor Ψ bis auf einen nichtverschwindenden Faktor, der dem physikalischen Zustand entspricht. Dieser Strahl im Hilbertraum geht durch Drehung um 2π in sich über, so wie die grafischen Symbole $\uparrow$ und $\downarrow$ der Basiszustände.

Das negative Vorzeichen kann man 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.

Die Zustände linear polarisierten Lichtes gehen so wie optische Polarisationsfilter durch Drehung um π ineinander über. Die Basiszustände schreibt man folglich als $\Lambda_|$ und $\Lambda_\_$. Die Winkelabhängigkeit der Strahlaufspaltung von Licht in doppelbrechenden Kristallen ist wie in Abbildung 2.1, nur daß der Winkelbereich von 0 bis π läuft. Denn Photonen haben Spin, genauer Helizität, Eins.

Die Polarisationszustände von Gravitationswellen gehen bereits durch Drehung um $\pi/2$ ineinander über, denn sie gehören zu Helizität Zwei. Die Basiszustände bezeichnet man mit Λ_+ und $\Lambda_\times$.

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 $w_{\theta=0,\varphi}(\uparrow) = 1$ und das Gemisch ρ ein reiner Zustand und zwar der Eigenzustand mit Spin nach oben bei Spin-Messung in z-Richtung.

$$\rho_{|c=1/2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \ . \tag{2.76}$$

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 nur einen Term schreiben läßt. In solch einem Fall ist eine Produktionswahrscheinlichkeit 1, und die anderen Terme verschwinden. Die Dichtematrix $\rho = \rho_{\text{rein}}$ ist dann ein Projektor $\rho^2_{\text{rein}} = \rho_{\text{rein}}$. Wegen $\operatorname{tr} \rho = 1$ gilt dann auch

$$\operatorname{tr} \rho^2_{\text{rein}} = 1 \ . \tag{2.77}$$

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 $w_{\theta,\varphi}(\uparrow)$ bezogen auf den Maximalwert ist die Polarisation P des Strahls von Spin-$1/2$-Teilchen.

$$P = \frac{w_{\max} - w_{\min}}{w_{\max}} \tag{2.78}$$

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

Der Unterschied zwischen einem reinen Zustand und einem Gemisch zeigt sich normalerweise erst beim Messen mit unterschiedlichen, im vorliegenden Beispiel gedrehten, Apparaten. Die gemessenen Wahrscheinlichkeiten in drei verschiedenen Richtungen bestimmen zunächst die drei Parameter der Dichtematrix. Alle anderen Funktionswerte in Abbildung 2.1 sind dann Vorhersagen der Quantenmechanik über die Wahrscheinlichkeiten für eine Schar von gedrehten Meßapparaten. Bei reinen Zuständen hängen diese Wahrscheinlichkeiten stark vom Meßapparat, im vorliegenden Fall von θ, ab. Bei Gemischen vermindert sich der Kontrast. Ebenso verschwimmt beispielsweise das Interferenzbild von Licht hinter einem Doppelspalt, wenn es so wie Sonnenlicht aus verschiedenen Farben gemischt ist. Insbesondere gibt es dann nicht mehr eine vollständige negative Interferenz.

2.8 Störungstheorie diskreter Eigenwerte

Wir untersuchen diskrete Eigenwerte und normierbare Eigenzustände einer differenzierbaren Schar $H(\lambda)$ von hermiteschen Operatoren, wie sie beispielsweise als Funktion der Magnetfeldstärke auftreten, mit der Physiker Atome stören, um ihre Eigenschaften verstehen zu lernen. Kennt man das Spektrum etwa für $\lambda = 0$, so kann man mit Reihenentwicklung versuchen, das Spektrum und die Eigenzustände für benachbarte Werte von λ zu nähern.

$$(H(\lambda) - E_n(\lambda))\,\Psi_n(\lambda) = 0 \tag{2.79}$$

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

Da die Eigenwertgleichungen die Normierungen und die Phasen der zugehörigen Eigenvektoren $\Psi_n(\lambda) \neq 0$ nicht festlegen, verlangen wir zusätzlich

$$\langle\Psi_m(\lambda)|\Psi_n(\lambda)\rangle = \delta^m{}_n \tag{2.80}$$

$$\langle\Psi_m(\lambda)|\frac{d}{d\lambda}\Psi_n(\lambda)\rangle_{|m=n} = 0\ . \tag{2.81}$$

Die verschiedenen Eigenzustände sind aufeinander senkrecht (2.80), da in jedem Eigenraum von $H(\lambda)$ eine Orthonormalbasis gewählt werden kann und weil Eigenvektoren eines hermiteschen Operators zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal sind (2.8).

Differenzieren von (2.80) für $n = m$ ergibt, daß $\langle\Psi_n(\lambda)|\frac{d}{d\lambda}\Psi_n(\lambda)\rangle = i\,f(\lambda)$ imaginär ist. Durch Phasenwahl

$$\widetilde{\Psi}_n(\lambda) = e^{i\alpha(\lambda)}\Psi_n(\lambda)\ , \quad \alpha(\lambda) = -\int^{\lambda} d\lambda' f(\lambda') \tag{2.82}$$

kann man die Gleichung (2.81) mit $\widetilde{\Psi}_n$ erfüllen. Wir unterstellen, daß die Redefinitionen schon ausgeführt sind und (2.80) und (2.81) gelten.

Dann ergibt sich die stationäre Störungstheorie aus (2.79) durch Differenzieren nach λ

$$(\frac{d}{d\lambda}H - \frac{d}{d\lambda}E_n)\Psi_n + (H - E_n)\frac{d}{d\lambda}\Psi_n = 0\ . \tag{2.83}$$

Beim Skalarprodukt dieser Gleichung mit Ψ_n verschwindet wegen $H\Psi_n = E_n\Psi_n$ der zweite Term, $\langle\Psi_n|(H - E_n)\frac{d}{d\lambda}\Psi_n\rangle$, und man erhält $\langle\Psi_n|(\frac{d}{d\lambda}H - \frac{d}{d\lambda}E_n)\Psi_n\rangle = 0$. Also ändert sich der Eigenwert um den Erwartungswert der Änderung des Operators im zugehörigen Eigenzustand

$$\frac{d}{d\lambda}E_n = \langle\Psi_n|(\frac{d}{d\lambda}H)\Psi_n\rangle\ . \tag{2.84}$$

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

$$\langle\Psi_m|(\frac{d}{d\lambda}H)\Psi_n\rangle + (E_m - E_n)\,\langle\Psi_m|\frac{d}{d\lambda}\Psi_n\rangle = 0\ . \tag{2.85}$$

Ist der Eigenwert $E_n(\lambda)$ nicht entartet, dann sind durch (2.85) und durch (2.81) die Skalarprodukte von $\frac{d}{d\lambda}\Psi_n$ mit allen Basisvektoren Ψ_m festgelegt. Daher gilt

$$\frac{d}{d\lambda}\Psi_n = -\sum_{m:\ E_m\neq E_n}\Psi_m\frac{\langle\Psi_m|(\frac{d}{d\lambda}H)\Psi_n\rangle}{E_m - E_n}\ . \tag{2.86}$$

Zum Formelbild: die Gleichung ist linear in Ψ_n, daher steht Ψ_n rechts im Übergangsmatrixelement. Zudem ist jeder Eigenzustand Ψ_m nur bis auf eine Phase bestimmt. Er muß daher paarweise als Bra- und als Ketvektor auftreten, damit sich diese Phase weghebt. Wenn dann die Reihenfolge von m und n im Resonanznenner $E_m - E_n$ genauso wie im Zähler gewählt wird, so tritt ein Minuszeichen als Vorfaktor auf.

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

$$\sum_{m:\ E_m\neq E_n}\left|\frac{\langle\Psi_m|(\frac{d}{d\lambda}H)\Psi_n\rangle}{E_m - E_n}\right|^2 < \infty\ . \tag{2.87}$$

Die Gleichungen (2.84) und (2.86) sind ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem für E_n und Ψ_n, aus dem man algebraisch durch wiederholtes Differenzieren alle höheren

Ableitungen und durch Auswerten der Ableitungen bei $\lambda = 0$ 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 konkave Funktion des Störparameters.

$$\frac{d^2 E_0}{d\lambda^2} = -2 \sum_{m:\ E_m > E_0} \frac{|\langle \Psi_m | \frac{dH}{d\lambda} \Psi_0 \rangle|^2}{E_m - E_0} \leq 0 \tag{2.88}$$

In relativistischen Theorien will man für jeden Wert der Kopplungskonstanten 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 konkave Funktion von λ.

Entartete Störungstheorie

Ist für einen Wert von λ ein Eigenwert entartet, gilt also $E_{n_1} = E_{n_2} = \cdots = E_{n_k} = E_n$ für orthonormale Zustände Ψ_{n_i}, die einen k-dimensionalen Unterraum $\mathcal{H}_n$ aufspannen, so verschwindet im Skalarprodukt der Gleichung

$$(\frac{d}{d\lambda} H - \frac{d}{d\lambda} E_{n_i}) \Psi_{n_i} + (H - E_{n_i}) \frac{d}{d\lambda} \Psi_{n_i} = 0 \tag{2.89}$$

mit Ψ_{n_j} für $i \neq j$ wegen $E_{n_i} = E_{n_j}$ der Term $\langle \Psi_{n_j} | (H - E_{n_i}) \frac{d}{d\lambda} \Psi_{n_i} \rangle$ und wegen $\langle \Psi_{n_j} | \Psi_{n_i} \rangle = 0$ der Term $\langle \Psi_{n_j} | \big(\frac{d}{d\lambda} E_n\big) \Psi_{n_i} \rangle$. Es können also die Zustände Ψ_{n_i} nur dann differenzierbar vom Störparameter abhängen, wenn der Störoperator $\frac{dH}{d\lambda}$ keine Übergänge zwischen den entarteten Zuständen macht, wenn also gilt

$$\langle \Psi_{n_j} | \frac{dH}{d\lambda} \Psi_{n_i} \rangle = 0 \text{ für } E_{n_i} = E_{n_j} \text{ und } i \neq j\ . \tag{2.90}$$

Im Unterraum $\mathcal{H}_n$ müssen also die Basisvektoren als Eigenvektoren des auf $\mathcal{H}_n$ eingeschränkten (projizierten) Störoperators $\frac{dH}{d\lambda}$ gewählt sein.

Das Skalarprodukt von (2.89) mit Ψ_{n_i} besagt, wie im nichtentarteten Fall,

$$\frac{d}{d\lambda} E_{n_i} = \langle \Psi_{n_i} | \frac{dH}{d\lambda} \Psi_{n_i} \rangle\ . \tag{2.91}$$

Wir unterstellen einfachheitshalber, daß der auf den Unterraum eingeschränkte Störoperator nicht entartet ist, daß also für $i \neq j$ die Energieänderungen $\frac{d}{d\lambda} E_{n_i}$ und $\frac{d}{d\lambda} E_{n_j}$ verschiedene Werte haben.

Das Skalarprodukt von (2.89) mit Zuständen anderer Energie $E_m \neq E_{n_i}$ legt wie in (2.86) das Skalarprodukt $\langle \Psi_m | \frac{d}{d\lambda} \Psi_{n_i} \rangle$ fest,

$$\langle \Psi_m | \frac{dH}{d\lambda} \Psi_{n_i} \rangle + (E_m - E_{n_i}) \langle \Psi_m | \frac{d}{d\lambda} \Psi_{n_i} \rangle = 0\ . \tag{2.92}$$

Die Skalarprodukte $\langle\Psi_{n_j}|\frac{d}{d\lambda}\Psi_{n_i}\rangle$ der energieentarteten Zustände erhält man aus der Ableitung von (2.89) und ihrem Skalarprodukt mit Ψ_{n_j}

$$(\frac{d^2H}{d\lambda^2} - \frac{d^2E_{n_i}}{d\lambda^2})\Psi_{n_i} + 2(\frac{dH}{d\lambda} - \frac{dE_{n_i}}{d\lambda})\frac{d\Psi_{n_i}}{d\lambda} + (H - E_{n_i})\frac{d^2\Psi_{n_i}}{d\lambda^2} = 0 \ , \tag{2.93}$$

$$\langle\Psi_{n_j}|\frac{1}{2}\frac{d^2H}{d\lambda^2}\Psi_{n_i}\rangle + \langle\Psi_{n_j}|(\frac{dH}{d\lambda} - \frac{dE_{n_i}}{d\lambda})\frac{d\Psi_{n_i}}{d\lambda}\rangle = 0 \ . \tag{2.94}$$

Beim mittleren Term schieben wir eine Zerlegung der Eins ein, berücksichtigen, daß $\frac{dH}{d\lambda}$ keine Übergänge im entarteten Unterraum macht (2.90) sowie (2.91, 2.92)

$$\begin{aligned}\langle\Psi_{n_j}|\frac{dH}{d\lambda}\frac{d\Psi_{n_i}}{d\lambda}\rangle &= \langle\Psi_{n_j}|\frac{dH}{d\lambda}\Psi_{n_j}\rangle\langle\Psi_{n_j}|\frac{d\Psi_{n_i}}{d\lambda}\rangle + \sum_{m:E_m\neq E_n}\langle\Psi_{n_j}|\frac{dH}{d\lambda}\Psi_m\rangle\langle\Psi_m|\frac{d\Psi_{n_i}}{d\lambda}\rangle \\ &= \frac{dE_{n_j}}{d\lambda}\langle\Psi_{n_j}|\frac{d\Psi_{n_i}}{d\lambda}\rangle - \sum_{m:E_m\neq E_n}\frac{\langle\Psi_{n_j}|\frac{dH}{d\lambda}\Psi_m\rangle\langle\Psi_m|\frac{dH}{d\lambda}\Psi_{n_i}\rangle}{E_m - E_n} \ .\end{aligned} \tag{2.95}$$

In (2.94) eingesetzt, ergibt sich für die gesuchten Skalarprodukte

$$(\frac{dE_{n_j}}{d\lambda} - \frac{dE_{n_i}}{d\lambda})\langle\Psi_{n_j}|\frac{d\Psi_{n_i}}{d\lambda}\rangle = -\langle\Psi_{n_j}|\frac{1}{2}\frac{d^2H}{d\lambda^2}\Psi_{n_i}\rangle + \sum_{m:E_m\neq E_n}\frac{\langle\Psi_{n_j}|\frac{dH}{d\lambda}\Psi_m\rangle\langle\Psi_m|\frac{dH}{d\lambda}\Psi_{n_i}\rangle}{E_m - E_n} \tag{2.96}$$

und daher schließlich

$$\frac{d\Psi_{n_i}}{d\lambda} = -\sum_{m:E_m\neq E_n}\Psi_m\frac{\langle\Psi_m|\frac{dH}{d\lambda}\Psi_{n_i}\rangle}{E_m - E_n} - \sum_{j\neq i}\Psi_{n_j}\frac{\langle\Psi_{n_j}|H_2\Psi_{n_i}\rangle}{\langle\Psi_{n_j}|\frac{dH}{d\lambda}\Psi_{n_j}\rangle - \langle\Psi_{n_i}|\frac{dH}{d\lambda}\Psi_{n_i}\rangle} \ , \tag{2.97}$$

wobei $\langle\Psi_{n_j}|H_2\Psi_{n_i}\rangle$ Matrixelemente zweiter Ordnung zusammenfaßt

$$\langle\Psi_{n_j}|H_2\Psi_{n_i}\rangle = \langle\Psi_{n_j}|\frac{1}{2}\frac{d^2H}{d\lambda^2}\Psi_{n_i}\rangle - \sum_{m:E_m\neq E_n}\frac{\langle\Psi_{n_j}|\frac{dH}{d\lambda}\Psi_m\rangle\langle\Psi_m|\frac{dH}{d\lambda}\Psi_{n_i}\rangle}{E_m - E_n} \ . \tag{2.98}$$

Die Beiträge des entarteten Unterraumes zur Änderung des Eigenzustandes haben ähnliche Form wie im nichtentarteten Fall, nur daß im Resonanznenner die Energiedifferenzen durch die Differenzen der Energieänderungen $dE_{n_i}/d\lambda$ ersetzt sind. Im Zähler sind die Übergangsmatrixelemente von $dH/d\lambda$ durch die Übergänge im entarteten Unterraum ersetzt, die $1/2\, d^2H/d\lambda^2$ bewirkt, minus den Übergängen, gewichtet mit den inversen Energieabständen, durch $dH/d\lambda$ vom entarteten Unterraum zu Zuständen anderer Energie und zurück zu den anderen Eigenzuständen des auf den entarteten Unterraum projizierten Operators $dH/d\lambda$.

3 Kontinuierliches Spektrum

3.1 Wellenfunktion

Viele Meßapparate, insbesondere die Orts- oder Impulsmessung, haben ein Kontinuum $\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^n$ möglicher Meßwerte, die eventuell gemeinsam mit diskreten Meßwerten a_i, $i \in I = \{1, 2 \dots d\}$, wir nennen sie im folgenden Spin, gemessen werden können.

In der Eigenbasis der zur Messung gehörigen, miteinander kommutierenden Operatoren wird jeder Zustand Ψ durch seine Wahrscheinlichkeitsamplitude angegeben. Dies ist eine Abbildung Ψ der Menge der gemeinsam meßbaren, reellen Meßwerte $\mathcal{M} \times I$ in die komplexen Zahlen $\mathbb{C}$ oder, äquivalent, eine Abbildung von $\mathcal{M}$ in $\mathbb{C}^d$,

$$\Psi : \begin{cases} \mathcal{M} & \rightarrow & \mathbb{C}^d \\ x & \mapsto & (\psi_1(x), \psi_2(x) \dots \psi_d(x)) \end{cases} . \tag{3.1}$$

Gehört x zur Ortsmessung, so heißen die Funktionen $\psi_i(x)$ Ortswellenfunktionen. [1]

Das Betragsquadrat $|\psi_i(x)|^2$ ist eine Wahrscheinlichkeitsdichte: die Wahrscheinlichkeit, daß der Meßwert x in einem Bereich Δ liegt und die Spinmessung den i-ten Wert ergibt, ist

$$w(i, \Delta, \Psi) = \int_\Delta d^n x \, |\psi_i(x)|^2 . \tag{3.2}$$

Da Wahrscheinlichkeiten dimensionslos sind, haben Wellenfunktionen die Dimension

$$\dim(\psi_i(x)) = \big(\dim(d^n x)\big)^{-1/2} , \tag{3.3}$$

wie die Wurzel aus einer Dichte. Faßt man die x-Meßwerte als Funktionen $x(y)$ von Koordinaten y auf, so ist die zugehörige Wahrscheinlichkeitsamplitude der y-Werte

$$\psi'(y) = \sqrt{\Big|\det \frac{\partial x}{\partial y}\Big|} \, \psi(x(y)) , \tag{3.4}$$

sodaß die Wahrscheinlichkeit, einen Meßwert im Intervall Δ' von y-Werten zu erhalten, mit der Wahrscheinlichkeit $w(i, \Delta, \Psi)$ (3.2) mit $\Delta = x(\Delta')$ übereinstimmt. Dieses Transformationsverhalten mit der Wurzel aus der Jacobideterminante definiert Halbdichten.

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

$$\sum_i \int d^n x \, |\psi_i(x)|^2 = 1 \tag{3.5}$$

[1] Wie Helizitätszustände zeigen, muß es sich streng genommen nicht um Funktionen, sondern nur um Schnitte in komplexen Vektorbündeln über $\mathcal{M}$ handeln, die nur in genügend kleinen Umgebungen jedes Punktes, nicht aber in ganz $\mathcal{M}$, komplexe Funktionen (genauer Halbdichten) sind.

Hieraus liest man das Skalarprodukt ab,

$$\langle \phi | \Psi \rangle = \sum_i \int d^n x \, \phi_i^*(x) \, \psi_i(x) \ . \tag{3.6}$$

Der Hilbertraum besteht aus den quadratintegrablen Funktionen $\Psi : \mathcal{M} \to \mathbb{C}^d$, genauer gesagt, aus den Äquivalenzklassen dieser Funktionen. Dabei sind zwei Funktionen dann äquivalent, wenn sie sich nur in einer Menge vom Maß Null unterscheiden, wenn also alle ihre Skalarprodukte übereinstimmen.

Angewendet auf Wellenfunktionen ergeben die zu den kontinuierlichen Meßwerten gehörigen Operatoren X^k, $k \in \{1, 2, \dots, n\}$, definitionsgemäß die Wahrscheinlichkeitsamplitude multipliziert mit der Funktion x^k

$$X^k : \Psi \mapsto X^k \Psi \quad X^k \Psi : x \mapsto (x^k \psi_1(x), x^k \psi_2(x) \dots x^k \psi_d(x)) \ . \tag{3.7}$$

Daß sich Ψ und $X\Psi$ nicht einfach um einen Streckungsfaktor unterscheiden, mache man sich für $d = 1$ am Funktionsgraphen von $\Psi(x) = e^{-x^2}$ und von $(X\Psi)(x) = x \, e^{-x^2}$ klar.

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

$$f(X) : \Psi \mapsto f(X)\Psi \quad f(X)\Psi : x \mapsto (f(x)\psi_1(x), f(x)\psi_2(x) \dots f(x)\psi_d(x)) \ . \tag{3.8}$$

Die Operatoren X^k sind im Hilbertraum nur auf der dichten Untermenge von Zuständen Ψ definiert, deren zugehörige Wellenfunktionen $\psi_i(x)$ nach Multiplikation mit x^k quadratintegrabel bleiben. Operatoren, die wie $e^{ik \cdot X}$ zu beschränkten Funktionen f ($\max_x |f(x)| < c$) gehören, sind im ganzen Hilbertraum definiert.

3.2 Transformationen von Punkten und Funktionen

Eine Gruppe ist eine Menge G mit einem assoziativen Produkt

$$\begin{array}{lll} G \times G & \to G \\ a \quad\; b & \mapsto a\,b \end{array} \ , \quad a\,(b\,c) = (a\,b)\,c \ , \tag{3.9}$$

und einem Einselement e, dessen Produkt alle Gruppenelemente a unverändert läßt,

$$e\,a = a\,e = a \tag{3.10}$$

und in der jedes Gruppenelement a ein Links- und Rechtsinverses hat. Es wird mit a^{-1} bezeichnet.

$$a^{-1}\,a = a\,a^{-1} = e \tag{3.11}$$

Invertierbare Selbstabbildungen einer Mannigfaltigkeit $\mathcal{M}$, beispielsweise Drehungen des Ortsraums $\mathbb{R}^3$ eines Teilchens, nennt man Transformationen. Sie bilden eine Gruppe, wobei das Produkt im Hintereinanderausführen besteht. Die identische Abbildung, die jeden Punkt auf sich abbildet, ist das Einselement der Transformationsgruppe, $\mathrm{id} = e$.

Als Transformation betrachtet muß man die Drehung von beispielsweise einem Vektor unterscheiden von der Drehung der Lage eines starren Körpers. Seine möglichen Lagen bilden keinen Vektorraum, man kann sie ja weder addieren noch vervielfältigen. Die Transformationen sind verschieden, sie betreffen ja verschiedene Objekte. Andererseits aber handelt es sich um ein und dieselbe Drehung nur von verschiedenen Objekten. Um hier begrifflich Verschiedenes zu unterscheiden und Gleiches gleich zu benennen, reden wir von der Gruppe und von ihren verschiedenen Realisierungen als Transformationsgruppen:

Eine Gruppe G wirkt als Transformationsgruppe auf einer Mannigfaltigkeit $\mathcal{M}$, wenn zu jedem Gruppenelement $g \in G$ eine Transformation M_g von $\mathcal{M}$ gehört,

$$M_g : \begin{cases} \mathcal{M} & \rightarrow & \mathcal{M} \\ x & \mapsto & M_g x \end{cases} , \tag{3.12}$$

wobei irgend zwei hintereinander ausgeführte Transformationen diejenige Transformation ergeben, die zum Gruppenprodukt gehört,

$$M_g \circ M_{g'} = M_{gg'} . \tag{3.13}$$

Dann heißt die Abbildung $g \mapsto M_g$ eine Realisierung der Gruppe G als Transformationsgruppe auf $\mathcal{M}$.

Trivialerweise realisiert die Identität $M_g = \text{id}\ \forall g \in G$ jede Gruppe G.

Ist die Gruppe G durch *lineare* Transformationen D_g eines Vektorraumes $\mathcal{V}$ realisiert, so heißt die Abbildung D von G in den Raum $L(\mathcal{V})$ der linearen Transformationen von $\mathcal{V}$ Darstellung von G und $D_g \in L(\mathcal{V})$ stellt g dar. Ist $\mathcal{V}$ spezieller ein Hilbertraum $\mathcal{H}$ und ist jede der Abbildungen D_g unitär, so handelt es sich um eine unitäre Darstellung von G.

Ist G auf zwei Mannigfaltigkeiten $\mathcal{M}$ und $\mathcal{N}$ durch Transformationen $M_g : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M}$ und $N_g : \mathcal{N} \rightarrow \mathcal{N}$ realisiert, so wirkt $g \in G$ auf natürliche Art auch auf die Menge der Punktepaare (x, y) mit $x \in \mathcal{M}$ und $y \in \mathcal{N}$, also auf das kartesische Produkt $\mathcal{M} \times \mathcal{N}$, und bildet sie auf die Paare der transformierten Punkte ab,

$$M_g \times N_g : \begin{cases} \mathcal{M} \times \mathcal{N} & \rightarrow & \mathcal{M} \times \mathcal{N} \\ (x, y) & \mapsto & (M_g x, N_g y) \end{cases} . \tag{3.14}$$

Die Transformation $M_g \times N_g$ bewirkt die zu g adjungierte (zugehörige) Transformation von Abbildungen f von $\mathcal{M}$ nach $\mathcal{N}$.

Jede Abbildung $f : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{N}$ ist ja definitionsgemäß eine Untermenge von $\mathcal{M} \times \mathcal{N}$, die für jedes $x \in \mathcal{M}$ genau ein Paar $(x, y) = (x, f(x))$ enthält. Da Transformationen invertierbar sind, ist $f \subset M \times \mathcal{N}$ für jedes $g \in G$ auch die Menge aller Paare $\big(M_g^{-1} x, f(M_g^{-1} x)\big)$. Sie wird durch $M_g \times N_g$ auf die Funktion $(\text{Ad}_g f)$ transformiert,

$$M_g \times N_g : \big(M_g^{-1} x, f(M_g^{-1} x)\big) \mapsto \big(x, N_g f(M_g^{-1} x)\big) = \big(x, (\text{Ad}_g f)(x)\big) ,$$

$$\text{Ad}_g : f \mapsto (\text{Ad}_g f) = N_g \circ f \circ M_g^{-1} . \tag{3.15}$$

Beim Formelbild für $\text{Ad}_g\ f$ beachte man, daß f von links mit N_g, der Transformation des Bildraumes, und von rechts mit M_g^{-1}, dem Inversen der Transformation des Urbildraumes, verkettet wird.

Transformiert beispielsweise eine lineare Abbildung D einen Vektorraum $\mathcal{V}$, so transformiert ihre adjungierte Abbildung Operatoren $C \in L(\mathcal{V})$, also Selbstabbildungen von $\mathcal{V} = \mathcal{M} = \mathcal{N}$, durch

$$(\mathrm{Ad}_D\, C) = DCD^{-1}\ . \tag{3.16}$$

Ist dabei $D = e^A$ aus einer Umgebung des Einselementes einer kontinuierlichen Gruppe, so ist die infinitesimale Transformation von Ad_D ihr in A linearer Anteil ad_A (2.32).

Die Menge aller Punkte, die sich durch Anwenden der Transformationen $M_g, g \in G$, aus einen Punkt $x \in \mathcal{M}$ ergibt, $O_x = \{M_g x\,,\ g \in G\}$, heißt G-Orbit oder kürzer Orbit von x. Bei Drehungen von $\mathbb{R}^3$ beispielsweise ist der Orbit von x die Kugelschale, die x enthält. Zwei Orbits sind entweder gleich oder elementefremd, $(O_x \cap O_y = \emptyset) \Leftrightarrow O_x \neq O_y$. Jeder Punkt $x \in \mathcal{M}$ definiert durch die Transformationen, die ihn invariant lassen, seine Stabilitätsgruppe $H = \{h : M_h x = x\} \subset G$. Jeder weitere Punkt des Orbits O_x entsteht durch eine Transformation von x. Dabei gilt $M_g x = M_{g'} x$ genau dann, wenn $g' = gh$ mit $h \in H$ ist. Also gehört zu jedem Punkt des Orbits genau eine Linksnebenklasse gH. und die Abbildung $\Phi : G/H \to O_x\,,\ gH \mapsto M_g x$, ist bijektiv. Man kann daher den Orbit als die Menge der Linksnebenklassen $G/H = \{gH : g \in G\}$ ansehen, auf die $M_{g'}$ durch Linksmultiplikation wirkt, $M_{g'}(gH) = g'gH$.

3.3 Transformation von Wellenfunktionen

Zur Realisierung einer Gruppe G als Transformationsgruppe des Definitionsgebietes $\mathcal{M}$ von Wellenfunktionen $\Psi : \mathcal{M} \to \mathbb{C}^d$, beispielsweise der Translationen oder Drehungen von $\mathbb{R}^3$, und zu d-dimensionalen, unitären Darstellungsmatrizen $R(g)$ der Gruppenelemente g gehören unitäre Transformationen U_g des unendlichdimensionalen Hilbertraumes der Wellenfunktionen

$$(U_g\Psi)_i(x) = \sum_j \sqrt{\rho_g(x)}\, R_i{}^j(g)\, \Psi_j(M_g^{-1}x)\ . \tag{3.17}$$

Hier bezeichnet $\rho_g = |\det \frac{\partial M_g^{-1}x}{\partial x}|$ den Betrag der Determinante der Jacobimatrix der partiellen Ableitungen der Funktionen $M_g^{-1}x$, also den Faktor, um den M_g^{-1} die Größe des Volumenelements $d^n x$ ändert.

Die Transformation U_g ist unitär, denn sie ist invertierbar und läßt Skalarprodukte invariant,

$$\begin{aligned}\langle U_g\Phi|U_g\Psi\rangle &= \int d^n x\, |\det \frac{\partial M_g^{-1}x}{\partial x}| \sum_{ijk} \big(R_i{}^j(g)\,\Phi_j(M_g^{-1}x)\big)^* R_i{}^k(g)\,\Psi_k(M_g^{-1}x) \\ &= \int d^n y \sum_i \Phi_i^*(y)\,\Psi_i(y) = \langle\Phi|\Psi\rangle\ .\end{aligned} \tag{3.18}$$

Es gilt ja $\sum_i \big(R_i{}^j(g)\big)^* R_i{}^k(g) = \delta_j{}^k$, weil nach Voraussetzung die d-dimensionale Darstellung R unitär ist. Zudem kann mit dem Integralsubstitutionssatz über $y = M_g^{-1}x$ statt über x integriert werden.

Die Wurzel der Jacobideterminante $|\det \frac{\partial M_g^{-1}x}{\partial x}|^{\frac{1}{2}}$ tritt in der Transformation (3.17) von Wellenfunktionen auf, weil sie genau genommen nicht Funktionen, sondern Halbdichten sind: ihr Betragsquadrat sind Dichten, nämlich Wahrscheinlichkeitsdichten.

Die Transformation (3.17) realisiert die Gruppe G, denn die Produkte von Jacobimatrizen ergeben die Jacobimatrix der hintereinander ausgeführten Transformationen,

$$\frac{\partial M_{g_1}^{-1}x}{\partial x}_{|_{M_{g_2}^{-1}x}} \frac{\partial M_{g_2}^{-1}x}{\partial x}_{|_x} = \frac{\partial M_{g_1}^{-1}M_{g_2}^{-1}x}{\partial x}_{|_x} = \frac{\partial (M_{g_2}M_{g_1})^{-1}x}{\partial x}_{|_x} . \tag{3.19}$$

In (3.17) muß man die Darstellung R, die Realisierung M und die unitäre Darstellung U unterscheiden, auch wenn sie alle derselben Gruppenmultiplikation von G genügen.

Trivialerweise ist die identische Darstellung $R(g) \equiv 1\ \forall g \in G$ unitär, sodaß (3.4)

$$(U_g\Psi)_i(x) = |\det \frac{\partial M_g^{-1}x}{\partial x}|^{\frac{1}{2}}\, \Psi_i(M_g^{-1}x) \tag{3.20}$$

die Gruppe der differenzierbaren, invertierbaren Selbstabbildungen jeder Mannigfaltigkeit – die Gruppe der Diffeomorphismen oder der Koordinatentransformationen – unitär auf Wellenfunktionen darstellt. Allerdings transformieren in dieser Darstellung die Spinkomponenten nicht ineinander, wie man es bei Drehungen zur Rechtfertigung der Bezeichnung erwarten würde, sondern i numeriert verschiedene Skalarfelder. Aber die Gruppe der Koordinatentransformationen hat eben keine nichttriviale, unitäre, endlichdimensionale Darstellung.

Infinitesimale Transformationen

Drehungen um eine fest gewählte Achse oder Translationen in einer fest gewählten Richtung sind Beispiele einparametriger Gruppen. Für unsere Betrachtung von einparametrigen Gruppen unterstellen wir, daß sie aus Transformationen M_α bestehen und so durch einen reellen Parameter parametrisiert seien, daß $M_{\alpha+\beta} = M_\alpha M_\beta$ gilt. Dann gehört $\alpha = 0$ zur identischen Abbildung $M_0 = \mathrm{id}$ und es gilt $(M_\alpha)^{-1} = M_{-\alpha}$. Variiert α, so durchläuft $M_\alpha x$ für jedes festgehaltene x als Funktion von α eine differenzierbare Kurve, den Orbit durch x, mit Tangentialvektoren [2]

$$\frac{d(M_\alpha x)^m}{d\alpha} = \xi^m(M_\alpha(x)) . \tag{3.21}$$

Sie definieren ein Vektorfeld, das wegen $M_{\alpha+\epsilon}(x) - M_\alpha(x) = (M_\epsilon - M_0)\circ M_\alpha(x)$ von α und x nur über $M_\alpha(x)$ abhängt. Bei x kann es demnach durch Differenzieren für $\alpha = 0$ bestimmt werden,

$$\xi^m(x) = \frac{d(M_\alpha x)^m}{d\alpha}_{|_{\alpha=0}} . \tag{3.22}$$

[2] Das Zeichen ξ ist der griechische Buchstabe xi.

Das Vektorfeld $\xi^m(x)\partial_m$ heißt die zu M_1 gehörige infinitesimale oder erzeugende Transformation. Denn die infinitesimale Transformation definiert durch das Differentialgleichungssystem

$$\frac{dx^m}{d\alpha} = \xi^m(x(\alpha)) \tag{3.23}$$

(für genügend kleines ξ) die Transformation $M_1 =: e^{\xi}$ als Abbildung der Anfangswerte $x(0)$ auf $x(1) = M_1 x(0)$. Vielfache von ξ erzeugen (für genügend kleines α) $M_\alpha = e^{\alpha\xi}$.

Wir schreiben die unitären Transformationen, die die einparametrige Gruppe im Hilbertraum darstellen, als

$$U_\alpha = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha N} \ . \tag{3.24}$$

Sie werden von $-i\alpha N/\hbar = \alpha U_\alpha^{-1}\partial_\alpha U_\alpha$ erzeugt. Der Operator N ist hermitesch, da U unitär ist. Er wird auch ohne die Faktoren $-i\alpha/\hbar$ als erzeugender Operator der Transformation U_α bezeichnet. Differenzieren wir nun die Transformation (3.20) bei $\alpha = 0$ oder, gleichbedeutend, entwickeln wir um $\alpha = 0$: $x'^m = x^m + \alpha\xi^m + \ldots$ und $U_\alpha = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha N} = 1 - \frac{i}{\hbar}\alpha N + \ldots$, so erhalten wir den erzeugenden Operator[3]

$$(N\Psi)_i(x) = -i\hbar\,\xi^m\partial_m\psi_i(x) - \frac{i}{2}\hbar\left(\partial_m\xi^m\right)\psi_i(x) \ . \tag{3.25}$$

Genauer bedacht kann der differenzierend und multiplizierend wirkende Operator N nur auf einer Untermenge der Zustände die zur Transformation gehörige unitäre Abbildung U_α erzeugen. Dazu müssen die Wellenfunktionen nicht nur differenzierbar sein, sondern (3.25) und

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha N}\psi_i(x) = |\det\frac{\partial M_\alpha^{-1}x}{\partial x}|^{\frac{1}{2}}\,\psi_i(M_\alpha^{-1}x) \tag{3.26}$$

besagen, daß die Wellenfunktion an jedem Ort $M_\alpha^{-1}x$ des Orbits durch eine Potenzreihe in den Ableitungen an einem Punkt x des Orbits festgelegt ist. Solche Elemente des Hilbertraumes nenne ich orbitanalytisch (Mathematiker sprechen von analytischen Vektoren des Hilbertraumes). Orbitanalytische Zustände können nicht lokalisiert sein. Wenn sie in einer offenen Teilmenge des Orbits verschwinden, so verschwinden dort die Funktion und alle ihre Ableitungen. Folglich verschindet sie überall im Orbit.

Die Forderung, daß eine Gruppe unitär und differenzierbar im Hilbertraum realisiert sei, zeichnet den Unterraum der orbitanalytischen Zustände aus. Der Hilbertraum ist die Vervollständigung (Menge der Äquivalenzklassen von Cauchy-Folgen) dieses Unterraums.

3.4 Translationen und Impuls

Falls der Definitionsbereich $\mathcal{M}$ der Wellenfunktionen der euklidische Raum $\mathbb{R}^3$ ist, auf dem die euklidische Gruppe der Translationen und Drehungen wirkt (sie sind volumentreu, ihre Jacobideterminante haben den Betrag 1), kann man Verschiebungen um a

[3]Die Ableitung von $|\det\frac{\partial M_\alpha^{-1}x}{\partial x}|^{\frac{1}{2}}$ steuert in (3.25) den Term $-\frac{1}{2}(\partial_{x^m}\xi^m)$ bei, denn die Determinante von $\frac{\partial M_\alpha x}{\partial x}$ hat die Entwicklung (A.13) $\det\frac{\partial x'^m}{\partial x^n} = 1 + \alpha\partial_{x^m}\xi^m + O(\alpha^2)$.

durch

$$(U_a\Psi)_i(x) = \Psi_i(x-a) \tag{3.27}$$

unitär im Hilbertraum der Wellenfunktionen darstellen und Drehungen $D_{\alpha n}$ um die Achse n und den Winkel α durch

$$(U_{\alpha n}\Psi)_i(x) = \sum_j R_i{}^j(\alpha n)\,\Psi_j(D_{\alpha n}^{-1}x)\ . \tag{3.28}$$

Die infinitesimale Verschiebung ξ^k (3.25) ist die Ableitung nach α der Verschiebung um αa bei $\alpha = 0$, $\xi^k = \partial_\alpha(x^k + \alpha a^k) = a^k$. Es ist x-unabhängig und daher divergenzfrei $\partial_{x^k}\xi^k = 0$. Die rechte Seite von (3.25) ist also einfach $-i\hbar\, a^k\partial_k\psi_i(x)$. Demnach ist der Operator N, der die unitäre Transformation U_a erzeugt, linear in a: $N = P_k a^k$. Dabei sind die Operatoren P_k, die die Verschiebungen in Richtung des k-ten Basisvektors erzeugen, definitionsgemäß die zugehörigen Impulse. Wie (3.25) zeigt, differenziert der Impulsoperator P_k die Ortswellenfunktion nach x^k.[4]

$$(P_k\Psi)_i(x) = -i\hbar\partial_k\psi_i(x) \tag{3.29}$$

Auf analytische Wellenfunktionen angewendet erzeugen diese Differentialoperatoren P_k die unitäre Darstellung U_a (3.27) der Verschiebung um a

$$U_a = e^{-\frac{i}{\hbar}P\cdot a} \tag{3.30}$$

Daß die Translation um a durch eine Exponentialreihe in der Ableitung gegeben ist,

$$(e^{-\frac{i}{\hbar}P\cdot a}\Psi)_i(x) = (e^{-a^k\partial_k}\Psi)_i(x) = \Psi_i(x-a)\ , \tag{3.31}$$

gilt nur für die Untermenge der Hilbertraumzustände, deren Ortswellenfunktion nicht nur differenzierbar, sondern analytisch ist, wobei der Konvergenzradius der Potenzreihe, die die Funktion in der Umgebung eines Punktes x darstellt, überall größer ist als a.

Auf Zuständen, die wie $H_n(x)\,e^{-x^2}$ 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

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

die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen

$$[X^k, X^l] = 0\ ,\ [P_k, P_l] = 0\ ,\ [X^k, P_l] = i\hbar\delta_l^k\ . \tag{3.32}$$

Daher kann man keine Zustände prärarieren, bei denen die Ortsunschärfe ΔX^k und die Impulsunschärfe ΔP_k gemeinsam klein sind. Aus der allgemeinen Unschärferelation

[4] Man zeichne übungshalber die Gaußfunktion als Wellenfunktion Ψ sowie $i(P\Psi)$ und $(X\Psi)$.

(2.22) und der Heisenbergschen Vertauschungsrelation folgt nämlich die Heisenbergsche Unschärferelation
$$\Delta X^k \Delta P_l \geq \frac{\hbar}{2}\delta_l^k \ . \tag{3.33}$$
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.

Spinlose Zustände auf einem Kreis mit Umfang l sind Strahlen im Hilbertraum der l-periodischen Ortswellenfunktionen $\psi(x) = \psi(x+l)$, die im Intervall $0 \leq x \leq l$ quadratintegrabel sind. Definiert man $(X\psi)(x) = x\psi(x)$ für $0 \leq x < l$ und $(X\psi)(x+l) = (X\psi)(x)$, so sind die Wellenfunktionen $X\psi$ zwar periodisch, aber normalerweise nicht differenzierbar und $PX\psi$ ist nicht definiert.

Daß $PX\psi_n$ 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 $[X, P] \overset{?}{=} i\hbar$ je nach Rechnung einmal $i\hbar$ und ein andermal 0 ist.
$$i\hbar\,\langle\Psi|\Psi\rangle \overset{?}{=} \langle\Psi|[X,P]\Psi\rangle = \langle\Psi|(XP - PX)\Psi\rangle = \langle\Psi|(Xp - pX)\Psi\rangle = 0$$
Untersucht man dieselben Rechenschritte statt auf dem Kreis auf der reellen Achse, so gibt es dort keinen normierten Eigenzustand zu P oder X.

Ortsmessungen auf dem Kreis messen Winkel und gehören auf natürliche Art zum unitären Operator
$$U : \Psi \mapsto U\Psi\,, \quad U\Psi : x \mapsto e^{i\frac{2\pi}{l}x}\psi(x)\,, \tag{3.34}$$
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 $V(x) = \sum_n c_n e^{in\frac{2\pi}{l}x}$ und der Operator daher als Reihe in U darstellen
$$V = \sum_n c_n U^n \ . \tag{3.35}$$

3.5 Drehungen und Bahndrehimpuls

Jede Drehspiegelung ist eine Selbstabbildung eines euklidischen, reellen Vektorraum, die längentreu Geraden auf Geraden und den Ursprung auf sich abbildet. Sie ist daher linear und erhält Längen und Winkel, also das Skalarprodukt. Weil sie jede Orthonormalbasis wieder auf eine Orthonormalbasis abbildet, heißt sie auch orthogonale Transformation.

In einer Orthonormalbasis gilt für jede Drehspiegelung D
$$D(e_i) = e'_i = e_k\,D^k{}_i\ , \quad e'_i \cdot e'_j = e_i \cdot e_j = \delta_{ij}\ ,$$
$$\delta_{ij} = (e_k\,D^k{}_i)\cdot(e_l\,D^l{}_j) = e_k \cdot e_l\,D^k{}_i\,D^l{}_j = \delta_{kl}\,D^k{}_i\,D^l{}_j = D^k{}_i\,D^k{}_j = D^T{}_i{}^k\,D^k{}_j$$
$$\mathbf{1} = D^T D\ , \quad D^T = D^{-1}\ . \tag{3.36}$$

Die Bedingungen $D^k{}_i\, D^k{}_j = \delta_{ij}$ oder $D^T D = \mathbf{1}$, daß die Spaltenvektoren von D normiert sind und zueinander senkrecht stehen, heißen Orthogonalitätsrelationen.

Mit dem Determinantenproduktsatz und wegen $\det D^T = \det D$ folgt

$$1 = \det \mathbf{1} = \det(D^T D) = (\det D^T)(\det D) = (\det D)^2\ , \tag{3.37}$$

daß die Determinante einer Drehspiegelung 1 oder -1 sein muß,

$$\det D = \pm 1\ . \tag{3.38}$$

Falls $\det D = 1$ ist, heißt die orthogonale Transformation D eine Drehung.

Die Untersuchung der Eigenwertgleichung von orthogonalen Transformationen [7] zeigt die anschaulich offensichtliche Eigenschaft, daß jede Drehung $D_{\alpha n}$ in *drei* Dimensionen durch einen Drehwinkel α und die Richtung n, $n^2 = 1$, der Drehachse charakterisiert wird. Sie läßt bei jedem Vektor k den Anteil $k_\parallel$ in Richtung von n ungeändert und dreht den zu n senkrechten Teil $k_\perp$ in der zu n senkrechten Ebene um den Drehwinkel α,

$$\begin{gathered} k = k_\parallel + k_\perp\ , \quad k_\parallel = n\,(n\cdot k)\ , \quad k_\perp = k - n\,(n\cdot k)\ , \\ D_{\alpha n} k = k_\parallel + (\cos\alpha)\, k_\perp + (\sin\alpha)\, n\times k_\perp\ . \end{gathered} \tag{3.39}$$

Unabhängig von der Drehachse geht jede Drehung gegen die identische Abbildung, wenn der Drehwinkel gegen Null oder 2π geht.

Wegen $\cos(-\alpha) = \cos\alpha$ und $\sin(-\alpha) = -\sin\alpha$ stimmt zudem die Drehung um die Achse n um den Winkel α mit der Drehung um $-n$ um den Winkel $2\pi - \alpha$ überein. Deuten wir n als Richtung und $\alpha/2$ als Entfernung, in der man von einem ausgezeichneten Punkt, etwa dem Nordpol, auf einer dreidimensionalen Kugelfläche $S^3 = \{p \in \mathbb{R}^4 : (p^1)^2 + (p^2)^2 + (p^3)^2 + (p^4)^2 = 1\}$ längs Großkreisen zum Punkt p gelangt,[5] so entspricht jeder Drehung in drei Dimensionen ein antipodales Punktepaar $\pm p$ auf S^3. Das sind die Punkte der Mannigfaltigkeit $S^3/\mathbb{Z}_2$, der die Gruppe SO(3) bijektiv entspricht.

Jede Drehung $D_{\alpha n}$ ist die Exponentialreihe der linearen Abbildung $\delta : k \mapsto \alpha n \times k$,

$$D_{\alpha n} = e^\delta\ . \tag{3.40}$$

Denn $e^\delta k = e^\delta k_\parallel + e^\delta k_\perp$ und $e^\delta k_\parallel$ besteht nur aus dem ersten Term $\delta^0 k_\parallel = k_\parallel$, da $\delta k_\parallel$ verschwindet. Auf $k_\perp$ wiederholt angewendet, ergibt δ

$$\delta k_\perp = \alpha n \times k_\perp\ , \quad \delta^2 k_\perp = \alpha^2 n \times (n \times k_\perp) = -\alpha^2 k_\perp\ , \quad \delta^{2n} k_\perp = (-1)^n \alpha^{2n} k_\perp\ . \tag{3.41}$$

Teilt man die e-Reihe $e^\delta k_\perp$ wie beim Beweis der Eulerformel $e^{i\alpha} = \cos\alpha + i \sin\alpha$ in gerade und ungerade Potenzen von δ und bedenkt man $\delta^{2n+1} = \delta\delta^{2n}$, so erhält man

$$\begin{aligned} e^\delta k_\perp &= \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{(2n)!}(-1)^n \alpha^{2n}\, k_\perp + \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{(2n+1)!}(-1)^n \alpha^{2n+1}\, n \times k_\perp \\ &= (\cos\alpha)\, k_\perp + (\sin\alpha)\, n \times k_\perp\ . \end{aligned} \tag{3.42}$$

[5] Wir bezeichnen die n-dimensionale *Sphäre* oder Kugeloberfläche mit S^n.

Da e^{δ} und $D_{\alpha n}$ auf alle Vektoren k gleich wirken, sind sie gleich.

Es erzeugt also $\delta : x \mapsto \alpha n \times x$ die Drehung $D_{\alpha n}$ von Orten x um die Achse n und den Winkel α, und $\xi^k(x) = \alpha\,\epsilon_{kij}\,n^i\,x^j$ ist das zugehörige Vektorfeld. Es ist divergenzfrei.

Der gemäß (3.25) zugehörige Operator N ist linear in αn, $N = \alpha n \cdot L$, wobei die Operatoren L_k im Hilbertraum der Zustände die Drehung um die k-te Koordinatenachse des Ortes erzeugen. Sie sind definitionsgemäß die Drehimpulsoperatoren. Der Vergleich der Koeffizienten, die αn multiplizieren, ergibt

$$(L_m\Psi)_i(x) = -i\hbar\epsilon_{mkl}x^k\partial_l\psi_i(x)\,, \quad L_m = \epsilon_{mkl}X^kP_l\;,\; \vec{L} = \vec{X}\times\vec{P}\;. \tag{3.43}$$

Genauer gesagt, ist dies die Wirkung der Bahndrehimpulsoperatoren. Zum Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ trägt noch der Spin $\vec{S}$ bei, der in (3.28) die Transformation $R(\alpha n)$ erzeugt, $-i\alpha n \cdot S/\hbar = \partial_\varepsilon R(\varepsilon\alpha n)_{|\varepsilon=0}$.

Mit der Heisenbergalgebra (3.32) folgt, daß die Komponenten des Bahndrehimpulses die Drehimpulsalgebra (2.50) erfüllen,

$$\begin{aligned}[L_i, L_j] &= \epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn}[X^kP_l, X^mP_n] = \epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn}([X^k, X^mP_n]P_l + X^k[P_l, X^mP_n])\\ &= i\hbar\epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn}(X^m\delta^k_nP_l - X^k\delta^m_lP_n) = i\hbar(\epsilon_{ikl}\epsilon_{jmk} - \epsilon_{imk}\epsilon_{jkl})X^mP_l\\ &= i\hbar(\delta_{im}\delta_{lj} - \delta_{ij}\delta_{lm} + \delta_{ij}\delta_{ml} - \delta_{il}\delta_{mj})X^mP_l = i\hbar\epsilon_{ijk}\epsilon_{kmn}X^mP_n\\ &= i\hbar\epsilon_{ijk}L_k\;.\end{aligned} \tag{3.44}$$

Die endliche, unitäre Transformation, die zu einer Drehung um den Winkel α um die Drehachse n gehört, ist

$$(U_{\alpha n}\Psi)_i(x) = (\exp(-\frac{i\alpha}{\hbar}\,n\cdot L)\Psi)_i(x) = \psi_i(D^{-1}_{\alpha n}x)\;. \tag{3.45}$$

Drehungen um $\alpha = 2\pi$ bilden Orte auf sich ab, $D^{-1}_{2\pi n}x = x$. Für Bahndrehimpulse (3.43) gilt daher einschränkend $U_{2\pi n} = \exp(-\frac{2\pi i}{\hbar}\,n\cdot L) = \mathbb{1}$. Für L_3-Eigenzustände heißt dies bei 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.

3.6 Kontinuierliche Basis

Man kann geeignet verallgemeinerte Basiselemente Λ^i_x einführen und Zustände Ψ formal wie in (1.8) als Linearkombination von Basiselementen mit den Ortswellenfunktionen als Entwicklungskoeffizienten schreiben,

$$\Psi = \sum_i \int d^nx\,\Lambda^i_x\,\psi_i(x)\;. \tag{3.46}$$

Das Skalarprodukt (3.6) mit einem ebenso zerlegten Vektor Φ legt die Skalarprodukte der Basiselemente fest,

$$\begin{aligned}&\sum_{i,j}\int d^nx\,d^nx'\,\phi^*_i(x)\,\langle\Lambda^i_x|\Lambda^j_{x'}\rangle\,\psi_j(x') = \sum_i\int d^nx\,\phi^*_i(x)\,\psi_i(x) \quad \forall\Phi,\Psi\\ &\Leftrightarrow \quad \langle\Lambda^i_x|\Lambda^j_{x'}\rangle = \delta^n(x-x')\delta_i{}^j\;.\end{aligned} \tag{3.47}$$

Man liest hieraus ab, daß Λ^i_x keine endliche Länge hat und kein Vektor im Hilbertraum ist, sondern daß Λ^i_x eine Distribution ist. Erst das Integral (3.46) mit den quadratintegrablen Wellenfunktionen $\psi_i(x)$ ergibt einen Vektor im Hilbertraum.

Dann kann man allerdings gleich nur mit der Wellenfunktion $\Psi : x \mapsto \psi(x)$ arbeiten und die Basiselemente Λ^i_x vermeiden.

Verallgemeinerte Basiselemente, deren Skalarprodukte wie in (3.47) durch δ-Funktionen gegeben sind, nennt man kontinuumsnormiert.[6]

Die Ortswellenfunktionen $\psi_i(x)$ sind wegen (3.47) die Skalarprodukte von Ψ mit der kontinuumsnormierten Ortsbasis

$$\psi_i(x) = \langle \Lambda^i_x | \Psi \rangle \ . \tag{3.48}$$

Insbesondere sind die Ortswellenfunktionen der Basiselemente $\Lambda^j_{x'}$ Deltafunktionen $\delta^n(x - x')\delta^j_i$. Die Basiselemente sind verallgemeinerte Eigenvektoren des Ortsoperators

$$X^k \Lambda^j_{x'} = x'^k \Lambda^j_{x'} \ . \tag{3.49}$$

Setzen wir in (3.46) ein, so ergibt sich in Bracket-Schreibweise

$$|\Psi\rangle = \sum_i \int \mathrm{d}^n x \, |\Lambda^i_x\rangle \, \langle \Lambda^i_x | \Psi \rangle \ . \tag{3.50}$$

Es läßt sich also analog zu (1.23) mit den Basiselementen Λ^i_x die Eins kontinuierlich zerlegen.

$$\mathbb{1} = \sum_i \int \mathrm{d}^n x \, |\Lambda^i_x\rangle \, \langle \Lambda^i_x | \tag{3.51}$$

Die verallgemeinerten Eigenzustände Γ^j_p des Impulsoperators

$$P_k \Gamma^j_p = p_k \Gamma^j_p \tag{3.52}$$

zu den Eigenwerten p_k, $p \in \mathbb{R}^n$, bilden wie die Ortszustände Λ^i_k eine kontinuierliche Basis. Ihre Ortswellenfunktionen $\big(\Gamma^j_p\big)_i(x) = \langle \Lambda^i_x | \Gamma^j_p \rangle$ sind Lösungen der Eigenwertgleichung

$$-\mathrm{i}\hbar \partial_{x^k} \big(\Gamma^j_p\big)_i(x) = p_k \big(\Gamma^j_p\big)_i(x) \tag{3.53}$$

und daher, nach geeigneter Wahl von Normierungsfaktoren durch

$$\langle \Lambda^i_x | \Gamma^j_p \rangle = \big(\Gamma^j_p\big)_i(x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n}} \delta^j_i \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p \cdot x} \tag{3.54}$$

gegeben. Wie man mit

$$\int \frac{\mathrm{d}^n x}{(2\pi)^n} \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}x \cdot (y - y')} = \delta^n(y - y') \tag{3.55}$$

[6] Die mathematische Untersuchung von selbstadjungierten Operatoren mit kontinuierlichem Spektrum vermeidet solche kontinuumsnormierte Zustände, sondern arbeitet mit Scharen von Projektionsoperatoren, $E(\lambda)$, die auf die Unterräume projizieren, die zu Spektralwerten kleiner als λ gehören und sich mit der Kontinuumsbasis als $E(\lambda) = \int^\lambda \mathrm{d}\mu \, |\Lambda_\mu\rangle \, \langle \Lambda_\mu|$ schreiben würden.

sieht, sind die Basiselemente Γ_p^j kontinuumsnormiert

$$\langle \Gamma_p^i | \Gamma_{p'}^j \rangle = \delta^n(p - p')\delta_i^j \tag{3.56}$$

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

$$\mathbb{1} = \sum_i \int d^n p \, |\Gamma_p^i\rangle \langle \Gamma_p^i| \tag{3.57}$$

Analog zur Ortswellenfunktion definiert man die Impulswellenfunktion[7] eines Zustandes Ψ als Skalarprodukt mit der kontinuierlichen Basis von Impulseigenzuständen

$$\tilde{\psi}_j(p) = \langle \Gamma_p^j | \Psi \rangle = \sum_i \int d^n x \, \langle \Gamma_p^j | \Lambda_x^i \rangle \langle \Lambda_x^i | \Psi \rangle \ . \tag{3.58}$$

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

$$\tilde{\psi}_i(p) = \int d^n x \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n}} e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \psi_i(x) \ , \quad \psi_i(x) = \int d^n p \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n}} e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \tilde{\psi}_i(p) \ . \tag{3.59}$$

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

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

$$\begin{aligned} \langle \Gamma_p^j | X^k \Psi \rangle &= \sum_i \int d^n x \, \langle \Gamma_p^j | \Lambda_x^i \rangle \langle \Lambda_x^i | X^k \Psi \rangle \\ &= \int \frac{d^n x}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n}} e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot x} x^k \psi_j(x) = i\hbar\partial_{p_k}\widetilde{\psi}_j(p) \ , \end{aligned}$$

$$(P_k\Psi)\tilde{}_i(p) = p_k\widetilde{\psi}_i(p) \ , \quad (X^k\Psi)\tilde{}_i(p) = i\hbar\partial_{p_k}\widetilde{\psi}_i(p) \ . \tag{3.60}$$

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

$$w(i, \Delta_p, \Psi) = \int_{\Delta_p} d^n p \, |\tilde{\psi}_i(p)|^2 \ . \tag{3.61}$$

Der Bahndrehimpuls $L = X \times P$ dreht die Argumente der Impulswellenfunktion $\tilde{\psi}_i(p)$ genauso wie die Ortsargumente der Ortswellenfunktion (3.45).

$$(L_m\Psi)\tilde{}_i(p) = -i\hbar\epsilon_{mkl}\, p_k \frac{\partial}{\partial p_l}\tilde{\psi}_i(p) \tag{3.62}$$

$$(U_{\alpha n}\Psi)\tilde{}_i(p) = (\exp(-\frac{i\alpha}{\hbar} n \cdot L)\Psi)\tilde{}_i(p) = \tilde{\psi}_i(D_{\alpha n}^{-1} p) \ . \tag{3.63}$$

[7]Zur Unterscheidung von Ortswellenfunktionen markieren wir Impulswellenfunktionen durch „~“.

Transformation der Basiszustände

Eine unitäre Transformation U_g wirkt auf einen Zustand Ψ in der Schreibweise (3.46) auf die Basiselemente Λ^i_x, denn U_g ist linear

$$U_g\Psi = \sum_i \int d^n x \left(U_g\Lambda^i_x\right) \psi_i(x) \ . \tag{3.64}$$

Dies stimmt mit dem Zustand mit der transformierten Wellenfunktion (3.17)

$$\sum_i \int d^n y\, \Lambda^i_y \sum_j |\det \frac{\partial M_g^{-1} y}{\partial y}|^{\frac{1}{2}}\, R_i{}^j(g)\, \Psi_j(M_g^{-1} y) \tag{3.65}$$

überein, wenn die Basiselemente kontragredient zu den Wellenfunktionen transformieren

$$U_g\Lambda^j_x = \sum_i |\det \frac{\partial M_g x}{\partial x}|^{\frac{1}{2}} \Lambda^i_{M_g x}\, R_i{}^j(g) \ . \tag{3.66}$$

Dies zeigt sich mit dem Integralsubstitutionssatz, wenn man über $x = M_g^{-1} y$ integriert und $\frac{\partial M_g x}{\partial x}_{|_{M_g^{-1} y}} \frac{\partial M_g^{-1} y}{\partial y}_{|_y} = 1$ berücksichtigt.

3.7 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

$$\Psi : (i, \vec{x}, j, \vec{y}) \mapsto \psi_{ij}(\vec{x}, \vec{y}) \tag{3.67}$$

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

$$w(i, \vec{x}, d^3x, j, \vec{y}, d^3y, \Psi) \approx |\psi_{ij}(\vec{x}, \vec{y})|^2 d^3x\, d^3y \tag{3.68}$$

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

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \sum_{ij} \int d^3x\, d^3y\, \phi^*_{ij}(\vec{x}, \vec{y}) \psi_{ij}(\vec{x}, \vec{y}) \ . \tag{3.69}$$

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 $\pi : (1,\dots,n) \mapsto (\pi(1),\dots,\pi(n))$.

$$(\psi_{\text{Boson}})_{i_1,\dots,i_n}(x_1,\dots,x_n) = (\psi_{\text{Boson}})_{i_{\pi(1)},\dots,i_{\pi(n)}}(x_{\pi(1)},\dots,x_{\pi(n)}) \tag{3.70}$$

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

$$(\psi_{\text{Fermion}})_{i_1,\dots,i_n}(x_1,\dots,x_n) = \operatorname{sign}(\pi)\,(\psi_{\text{Fermion}})_{i_{\pi(1)},\dots,i_{\pi(n)}}(x_{\pi(1)},\dots,x_{\pi(n)}) \tag{3.71}$$

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

$$\psi_{ij}(\vec{x},\vec{y}) = \epsilon_{ij}\chi(\vec{x})\chi(\vec{y}), \quad \epsilon_{ij} = -\epsilon_{ji},\ \epsilon_{\uparrow\downarrow} = 1, \quad i,j \in \{\uparrow,\downarrow\}\,. \tag{3.72}$$

Slater-Determinanten sind total antisymmetrische n-Teilchenzustände. Sie entstehen aus einem Produkt (5.1) von orthonormierten Einteilchenzuständen χ_i, das antisymmetrisiert wird.

$$\begin{aligned}\Psi_n &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_\pi \operatorname{sign}(\pi)\chi_{\pi(1)}\otimes\chi_{\pi(2)}\otimes\dots\otimes\chi_{\pi(n)}\\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\epsilon_{i_1 i_2\dots i_n}\chi_{i_1}\otimes\chi_{i_2}\otimes\dots\otimes\chi_{i_n}\end{aligned} \tag{3.73}$$

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 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 p_1 und p_2 kann man nur bis auf Teilchenpermutation aus den Eigenwerten der symmetrischen Operatoren $P_1 + P_2$ und ${P_1}^2 + {P_2}^2$ rekonstruieren.

4 Zeitentwicklung, Grundzustandsenergie

4.1 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. Er durchläuft also mit der Zeit eine Bahn $t \mapsto \Psi(t)$ im Hilbertraum.

Verwenden wir normierte Vektoren, um den Zustand zu repräsentieren, so muß für alle Zeiten

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1 \tag{4.1}$$

gelten. Zudem darf eine Phasenänderung von $\Psi(0)$ 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

$$\langle \partial_t \Psi(t) | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \partial_t \Psi(t) \rangle = 0 \ . \tag{4.2}$$

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 Zeit meßbar.

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

$$i\hbar \partial_t \Psi = H\Psi \ , \ H = H^\dagger \ . \tag{4.3}$$

Denn wenn $\partial_t \Psi = O\Psi$ für irgendeinen linearen Operator O gilt, so ist er nach (4.2) antihermitesch. Die Schrödingergleichung drückt diesen Sachverhalt nach Abspalten von i und einem maßsystemabhängigen Faktor, dem Wirkungsquantum $\hbar$, aus. Dann hat der Hamiltonoperator die Dimension einer Energie, so wie die Hamiltonfunktion in der Hamiltonschen Mechanik. Und so wie in klassischer Physik die Hamiltonfunktion die Bahnen erzeugt, die im Laufe der Zeit durchlaufen werden, so erzeugt der Hamiltonoperator H in der Quantenmechanik die Bahnen, die die Zustände im Hilbertraum mit der Zeit durchlaufen.

Dabei kann man (und tut es) in ein und demselben Hilbertraum die Bahnen, die vom Hamiltonoperator freier Teilchen erzeugt werden, mit den Bahnen vergleichen, die ein

Hamiltonoperator mit Wechselwirkung erzeugt. Für solch einen Vergleich ist erforderlich, daß die zu vergleichenden Bahnen in demselben Raum verlaufen, nicht in einem Hilbertraum $\mathcal{H}_{\text{frei}}$ und einem anderen Hilbertraum $\mathcal{H}_{\text{wechselwirkend}}$. Nicht den Zuständen und dem Hilbertraum, sondern den Hamiltonoperatoren und den zugehörigen Bahnen, die im Laufe der Zeit durchlaufen werden, kommen die Eigenschaften „frei" und „wechselwirkend" zu.

Es ist mit den Grundstrukturen der Quantenmechanik durchaus verträglich, daß bei physikalischen Systemen der Zustand zur Zeit t nichtlinear vom Anfangszustand $\Psi(0)$ abhängt und durch eine einparametrige Schar invertierbarer Abbildungen $\Phi_t : \Psi(0) \mapsto \Psi(t)$ gegeben ist, die Strahlen des Hilbertraumes auf Strahlen abbildet

$$\Phi_t : \lambda \cdot \Psi \mapsto f_t(\lambda, \Psi) \cdot \Phi_t(\Psi) \ , \quad \Psi \neq 0 \ , \ \lambda \neq 0 \ , \tag{4.4}$$

wobei der komplexe Faktor $f_t(\lambda, \Psi) \in \mathbb{C}$ für nichtverschwindendes λ nicht Null wird. Die zugehörigen, allgemeineren Zeitentwicklungsgleichungen solcher nichtlinearer Quantenmechanik heißen „nichtlineare Schrödingergleichung". Beispielsweise wird die Zeitentwicklung eines geladenen Teilchens, das in leitenden Flächen Spiegelladungen influenziert, zutreffend von einer nichtlinearen Schrödingergleichung beschrieben, wenn man die Spiegelladung durch die Wellenfunktion des Teilchens ausdrückt.

Allerdings verletzt eine solche nichtlineare Zeitentwicklung den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik, daß die Entropie eines abgeschlossenen Systems im Laufe der Zeit nicht abnimmt (Seite 104). Nichtlineare Schrödingergleichungen beschreiben daher nur Systeme, die nicht abgeschlossen sind.

Wir beschränken unsere Darstellung der Quantenmechanik einfachheitshalber auf lineare Zeitentwicklung mit einem hermiteschen Hamiltonoperator.

In einem Gemisch $\rho = \sum_j p_j \left|\Psi_j\right\rangle \left\langle\Psi_j\right|$ 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.

$$\rho(t) = \sum_j p_j \left|\Psi_j(t)\right\rangle \left\langle\Psi_j(t)\right| \tag{4.5}$$

Differenziert man nach der Zeit, und beachtet man, daß Bra-Vektoren antilinear sind (1.13) und demnach

$$i\hbar\partial_t \left\langle\Psi(t)\right| = \left\langle -i\hbar\partial_t\Psi(t)\right| = \left\langle -H\Psi(t)\right| \overset{(1.18)}{=} -\left\langle\Psi(t)\right| H \tag{4.6}$$

erfüllen, so erhält man aus der Schrödingergleichung (4.3) die Zeitentwicklung der Dichtematrix, die von-Neumann-Gleichung

$$i\hbar\partial_t\rho = H\rho - \rho H = [H, \rho] \ . \tag{4.7}$$

Die Zeit t ist der Parameter von Bahnen $t \mapsto \Psi(t)$ im Hilbertraum. Sie kommt nicht den Zuständen zu, sondern der Bahn. Durch Messen eines Zustandes kann man nicht sagen, wie spät es ist, auch wenn man davon sprechen kann, daß während des Durchlaufens der Bahn von $\Psi(0)$ bis zu $\Psi(t)$ die Zeit t 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 Ableitung $i\hbar\partial_t$ auf der linken Seite der Schrödingergleichung ist *kein* Operator im Hilbertraum, sondern differenziert Bahnen im Hilbertraum. Auch wenn die Ortswellenfunktionen, die ein Teilchen im Laufe der Zeit durchläuft, durch eine Funktion $\psi(t, \vec{x})$ der Zeit und des Ortes angegeben wird, so bestehen zwischen ihren Argumenten wesentliche Unterschiede: zu jeder Zeit t ist $|\psi(t, \vec{x})|^2 \, d^3x$ die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen an einem Ort $\vec{x}$ im Volumen der Größe d^3x zu finden. Da Wahrscheinlichkeiten dimensionslos sind und d^3x die Dimension Länge hoch 3 hat, hat $\psi(t, \vec{x})$ die Dimension Länge hoch $-\frac{3}{2}$. Zu jeder Zeit ist die Funktion $\Psi(t) : \vec{x} \mapsto \psi(t, \vec{x})$ eine quadratintegrable Funktion von $\mathbb{R}^3$. Aber die Funktion $(t, \vec{x}) \mapsto \psi(t, \vec{x})$ ist keine quadratintegrable Funktion von $\mathbb{R}^4$ und über t wird im Skalarprodukt nicht integriert. Das gilt auch in der relativistischen Quantenmechanik.

Mehrteilchenzustände haben Wellenfunktionen mit mehreren Ortsvariablen (pro Teilchen einen Koordinatensatz). Die Bahn im Hilbertraum, die solche Zustände im Laufe der Zeit durchlaufen, wird dabei durch eine und nur eine Zeit parametrisiert.

Die Zeit t parametrisiert die Bahn $t \mapsto \Psi(t)$ im Hilbertraum 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 immer positiv.

Aus der allgemeinen Unschärferelation (2.22) und der Schrödingergleichung folgt eine Zeit-Energie-Unschärferelation, wenn man die Zeitunschärfe Δt als diejenige Zeit definiert, die in einem Zustand vergeht, bis sich der Erwartungswert $\langle A \rangle$ um die Unschärfe von A geändert hat.

$$\Delta t = \frac{\Delta A}{\left| \frac{d}{dt} \langle A \rangle \right|} \tag{4.8}$$

Es gilt nämlich wegen (2.22) und (4.3)

$$\Delta A \Delta H \geq \frac{1}{2} | \langle [A, H] \rangle | = \frac{\hbar}{2} | \frac{d}{dt} \langle A \rangle | \tag{4.9}$$

und mit dieser Definition von Δt folgt, unabhängig davon, mit welchem Apparat A man die Zeit mißt,

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{4.10}$$

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

$$i\hbar\partial_t \Psi = H\Psi = E\Psi \tag{4.11}$$

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,

$$[H, A] = 0 \ , \tag{4.12}$$

so sind die Wahrscheinlichkeiten $w(i, A, \Psi(t))$ (1.1) der Meßwerte zeitunabhängig. Denn der zum Meßwert gehörige, normierte Eigenzustand Λ_i hängt nicht vom Bahnparameter t ab und kann als Eigenzustand zu H gewählt werden (2.27), $H\Lambda_i = E_i\Lambda_i$. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\langle\Lambda_i|\Psi(t)\rangle$ ändert sich daher nur um eine Phase

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t \langle\Lambda_i|\Psi(t)\rangle = \langle\Lambda_i|H\Psi(t)\rangle = \langle H\Lambda_i|\Psi(t)\rangle = E_i \langle\Lambda_i|\Psi(t)\rangle \ , \\ \langle\Lambda_i|\Psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_i t} \langle\Lambda_i|\Psi(0)\rangle \ . \end{aligned} \tag{4.13}$$

Ist insbesondere $\Psi(0)$ Eigenzustand zu A zum Meßwert a, so bleibt er Eigenzustand und die Quantenzahl 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 einzelnen Stoßpartner erhalten.

Wenn der Hamiltonoperator zeitunabhängig ist und wenn man sein Spektrum $\{E_1, E_2, \ldots, E_i, \ldots\}$ und seine Eigenzustände $\Lambda_1, \Lambda_2, \ldots \Lambda_i, \ldots$ kennt, so ist das Problem, die Zeitentwicklung eines allgemeinen Zustands zu bestimmen, darauf zurückgeführt, die Komponenten des Anfangszustands in der normierten Eigenbasis des Hamiltonoperators zu bestimmen und den Zustand zur späteren Zeit mit diesen Komponenten zusammenzusetzen

$$\Psi(t) = \sum_i \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_i t}\Lambda_i\psi_i \ , \quad \psi_i = \langle\Lambda_i|\Psi(0)\rangle \ . \tag{4.14}$$

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

Die Eigenwertgleichung des Hamiltonoperators

$$(H - E_i)\Lambda_i = 0 \tag{4.15}$$

heißt zeitunabhängige Schrödingergleichung. Trotz weitverbreiteter, anderer Meinung erlaubt sie nicht, auszurechnen, in welchem Zustand sich das quantenmechanische System befindet, denn quantenmechanische Systeme müssen nicht Energieeigenzustände sein. 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 (3.46) geschrieben werden

$$\Psi = \int dx\, \Lambda_x\, \psi(x) \ . \tag{4.16}$$

Der nichtrelativistische 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 $(P\Psi)(x) = -i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx}$ (3.29) und das Potential multipliziert die Ortswellenfunktion $(V\Psi)(x) = V(x)\psi(x)$ (3.8). Also lautet die Eigenwertgleichung $(H - E)\Psi = 0$ auf Ortswellenfunktionen

$$\big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) - E\big)\psi(x) = 0 \ . \tag{4.17}$$

Die Lösungen müssen normierbar sein, wenn ihnen Vektoren im Hilbertraum der quadratintegrablen Wellenfunktionen entsprechen sollen. Zusätzlich sind aber auch alle Lösungen interessant, die für $x \to \pm\infty$ nicht anwachsen. Denn aus solchen verallgemeinerten Lösungen lassen sich normierte Wellenpakete Ψ zusammensetzen, die der Eigenwertgleichung mit jeder vorgegebenen Genauigkeit $\epsilon > 0$ nahe kommen, $\|(H - E)\Psi\|^2 < \epsilon\|\Psi\|^2$. Zum Beispiel sind für verschwindendes Potential die verallgemeinerten Impulseigenzustände $\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}$ 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 (4.17) für vereinfachte Potentiale, wie den Topf oder die Schwelle.

4.2 Schrödingerbild, Heisenbergbild

In der Quantenmechanik läßt sich nicht unterscheiden, ob sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung von Meßwerten 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 unterstellt zeitlich unveränderte Meßapparate.

Sei als Funktion der Zeit t eine Schar U_t von unitären Operatoren

$$U_t^\dagger = U_t^{-1} \tag{4.18}$$

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

$$\Psi'(t) = U_t\Psi(t) \,, \quad \Lambda_i'(t) = U_t\Lambda_i \,, \quad A'(t) = U_t A U_t^{-1} \,, \tag{4.19}$$

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

$$\langle\Lambda_i'(t)|\Psi'(t)\rangle = \langle U_t\Lambda_i|U_t\Psi(t)\rangle = \Big\langle\Lambda_i\Big|U_t^\dagger U_t\Psi(t)\Big\rangle = \langle\Lambda_i|\Psi(t)\rangle \ .$$

$$A\Lambda_i = a_i\Lambda_i \Leftrightarrow U_t A U_t^{-1}\ U_t\Lambda_i = a_i U_t\Lambda_i \ .$$

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

$$\partial_t U_t^{-1} = -U_t^{-1}(\partial_t U_t)U_t^{-1} \ . \tag{4.20}$$

Daher und wegen $U_t^\dagger = U_t^{-1}$ ist $U_t^{-1}\partial_t U_t$ antihermitesch

$$(U_t^\dagger \partial_t U_t)^\dagger = (\partial_t U_t^{-1}) U_t = -U_t^{-1}\partial_t U_t. \tag{4.21}$$

Mit der Bezeichnung

$$U_t^{-1} i\hbar \partial_t U_t = -\hat{H}_t \ , \ \hat{H}_t = \hat{H}_t^\dagger \tag{4.22}$$

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

$$i\hbar\partial_t \Psi' = H_t' \Psi' \text{ mit } H_t' = U_t (H - \hat{H}_t) U_t^{-1} \ . \tag{4.23}$$

Operatoren, die zu Meßapparaten gehören, erfüllen die Gleichung

$$i\hbar\partial_t A'(t) = -[\tilde{H}, A'(t)] \text{ mit } \tilde{H} = U_t \hat{H}_t U_t^{-1} \ . \tag{4.24}$$

Wählt man insbesondere $\hat{H}_t = H$, bestimmt also U_t als Lösung von $i\hbar\partial_t U_t = -HU_t$ 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

$$i\hbar\partial_t \Psi_H = 0 \, , \quad i\hbar\partial_t \rho_H = 0 \, , \quad i\hbar\partial_t A_H = -[H, A_H] \ . \tag{4.25}$$

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

Mathematisch äquivalent wie das Heisenbergbild und das Schrödingerbild der Quantenmechanik sind in der allgemein relativistischen Mechanik das Ptolemäische Weltbild, in dem die Erde täglich von den Sternen umlaufen wird, und das Kopernikanische Weltbild, in dem die Erde jährlich die Sonne umläuft und sich täglich dreht. Beide Weltbilder gehen durch eine invertierbare Koordinatentransformation auseinander hervor. Aber über Jahrtausende hat das Ptolemäische Weltbild astronomisches Verstehen verhindert. Im Kopernikanische System (1543) hingegen wurden die Planetenbahnen einfach beschrieben, Kepler (1609), und mit Newtonscher Mechanik (1666, 1687) erklärt.

Für ebenso unfruchtbar wie das Ptolemäische Weltbild halte ich das Heisenbergbild, in dem nicht etwa Teilchen aneinander streuen, sondern zeitabhängige Observable dies vorgaukeln. Das Heisenberg-Bild suggeriert mit Feldgleichungen wie $U_t\,\Phi(0)\,\Psi(0)\,U_t^{-1} = U_t\,\Phi(0)\,U_t^{-1}\,U_t\,\Psi(0)\,U_t^{-1} = \Phi(t)\,\Psi(t)$, daß die Zeitentwicklung von Produktzuständen das Produkt der zeitentwickelten Faktoren ist, $(\Phi \times \Psi)(t) = \Phi(t) \times \Psi(t)$. Das ist aber gerade Kennzeichen der freien Zeitentwicklung der Faktoren: jeder entwickelt sich unabhängig vom anderen. Bei Wechselwirkung ist die Zeitentwicklung von Zweiteilchenzuständen nicht das Produkt der Einteilchenzeitentwicklung, $U_{2,t} \neq U_{1,t} \times U_{1,t}$.

4.3 Bemerkungen zum Wasserstoffatom

Die Stärke der elektromagnetischen Wechselwirkungen wird durch die Feinstrukturkonstante

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137} \tag{4.26}$$

bestimmt. Sie ist eine von Maßeinheiten unabhängige Zahl: Die Größe $e^2/(4\pi\varepsilon_0)$ ist ja die mit $-r$ multiplizierte potentielle Energie im Wasserstoffatom und hat demnach die Dimension „Energie mal Länge“ ebenso wie $\hbar c$, denn die Wirkung $\hbar$ hat die Dimension „Energie mal Zeit“ oder „Impuls mal Länge“.

Daher hat

$$\lambda = \frac{\hbar}{m\,c} \approx 3{,}86\,10^{-13}\ \mathrm{m} \tag{4.27}$$

die Maßeinheit einer Länge. Sie ist die um den Faktor 2π reduzierte Comptonwellenlänge des Elektrons $(m = m_{\mathrm{Elektron}})$.

Die Zahl, die in der Energieskala des Wasserstoffatoms, in der Rydbergenergie

$$\mathrm{Ry} = \frac{1}{2}\,\alpha^2\, mc^2 \approx 13{,}6\ \mathrm{eV}\ , \tag{4.28}$$

die Ruhenergie $mc^2 \approx 511$ keV des Elektrons multipliziert, muß α^2 enthalten. Denn der Hamiltonoperator enthält kein c und die Masse m nur im Verhältnis $m/\hbar^2$.

Aus gleichen Gründen ist die Längenskala des Wasserstoffatoms der Bohrsche Radius

$$a = \frac{\hbar}{\alpha\, m\, c} \approx 0{,}529\,10^{-10}\ \mathrm{m}\ . \tag{4.29}$$

Das Wasserstoffatom hat ein kontinuierliches, positives Energiespektrum der Schwerpunktsbewegung. Sie bewirkt bei der Wechselwirkung des Atoms mit Licht nur eine Dopplerverschiebung des Lichtes.

Die Energien der Bindungszustände $\Lambda_{n,l,m}(\vec{x}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ der Relativbewegung sind diskret

$$E_{n,l,m} = -\frac{\mathrm{Ry}}{n^2}\ ,\ n = 1,2,\dots\ ,\ l = 0,1,\dots,n-1\ ,\ m = -l,-l+1,\dots,l\,. \tag{4.30}$$

Diese Zustände sind Produkte von Kugelflächenfunktionen Y_{lm} mit Radialwellenfunktionen R_{nl} des Abstandes r, die nicht von m abhängen. Durch r geteilt sind diese Radialwellenfunktionen Eigenfunktionen eines eindimensionalen Hamiltonoperators mit einem effektivem Potential, das aus dem Coulombpotential und der Zentrifugalbarriere $\vec{L}^2/(2mr^2)$ besteht. Bis auf ein Polynom (Laguerre-Polynom mal r^l) fällt R_{nl} exponentiell ab, $\propto \exp\bigl(-r/(n\,a)\bigr)$. Das Betragsquadrat der Wellenfunktion des Grundzustandes nimmt also pro halbem Bohrschen Radius a um einen Faktor $1/e$ ab. Angeregte Atome mit Hauptquantenzahl n haben, was den e-Faktor betrifft, eine n-mal größere Längenskala: Ihre linearen Abmessungen sind n-mal so groß.

Berücksichtigt man den Spin $1/2$ des Elektrons, so verdoppelt sich die Zahl der Zustände. Bezieht man auch den Spin $1/2$ des Protons ein, so verdoppelt sich diese Zahl nochmal. Wegen des Pauliverbots ist der Spin des Elektrons entscheidend für das Periodensystem der Elemente. In der Dirac-Gleichung koppelt dieser Spin an den Bahndrehimpuls und bewirkt dadurch die Feinstruktur. Der gleich große Spin des Protons bewirkt die Hyperfeinstruktur der Energien, die um das Massenverhältnis $m_{\mathrm{Elektron}}/m_{\mathrm{Proton}} \approx 1/2000$ kleiner als die Feinstruktur ist.

Über den diskreten Energien der Bindungszustände schließt sich das Kontinuum der positiven Energien der Relativbewegung des ionisierten Elektron-Proton-Paares an.

4.4 Grundzustandsenergie

Energien, die Eigenwerte des Hamiltonoperators, der die Zeitentwicklung erzeugt, sind streng genommen nicht meßbar, sondern nur die Differenzen von Energien. Insbesondere kann man die Grundzustandsenergie nicht aus der Zeitentwicklung ablesen.

Es lassen sich nämlich für reelles α Bahnen $\Psi(t)$ im Hilbertraum nicht durch Messungen von den Bahnen $\Psi'(t) = e^{i\alpha t/\hbar}\Psi(t)$ unterscheiden, denn Ψ' und Ψ ergeben zu allen Zeiten für alle Meßapparate dieselbe Verteilung von Meßwerten. Gilt aber die Schrödingergleichung (4.3) für die Bahn $\Psi(t)$, so erfüllt auch $\Psi'(t)$ eine Schrödingergleichung, allerdings mit $H' = H - \alpha$. Also kann nicht durch Beobachtung der Zeitentwicklung zwischen H und $H - \alpha$ unterschieden werden.

Im Heisenbergbild erzeugen H und $H - \alpha$ selbstverständlich dieselbe Zeitentwicklung aller Meßapparate A, denn Zahlen α vertauschen mit jedem Operator A.

Zwar nicht aus der Zeitentwicklung, wohl aber aus anderen Gründen, kann durchaus die Energie absolut festgelegt werden. In der Kosmologie wirkt Energiedichte gravitativ. Den Befunden nach wirkt schon im Vakuum eine größere Energiedichte als im Mittel der Materie zukommt. Leider haben wir keine erfolgreiche Quantentheorie der Gravitation.

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

In relativistischen Theorien mit einer flachen Raumzeit liegt die Grundzustandsenergie jedoch fest. Der Hamiltonoperator $H = cP^0$ erzeugt die freie Zeitentwicklung und ist eine Komponente des Viererimpulses P^m. Mit den Operatoren $M^{mn} = -M^{nm}$, die Lorentztransformationen erzeugen, erfüllt der Viererimpuls die Kommutatorrelationen

$$[M^{mn}, P^l] = -i(\eta^{ml}P^n - \eta^{nl}P^m) \ , \quad m, n, l \in \{0, 1, 2, 3\} \ . \tag{4.31}$$

Sie erlauben nicht, zu P^m Zahlen hinzuzufügen, die auf der linken Seite nichts ändern, wohl aber auf der rechten. Das Vakuum ist invariant unter Lorentztransformationen und Translationen. Folglich haben sein Impuls $\vec{p}$ und seine Energie E die Werte des einzigen Vierervektors, den Lorentztransformationen invariant lassen, $P_{\text{Vakuum}} = (E, \vec{p}) = 0$.

Ebenso muß für freie Teilchen der Masse m der Impuls $\vec{p}$ mit der Energie E durch $E = \sqrt{m^2c^4 + \vec{p}^{\,2}c^2}$ zusammenhängen.

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

Da die Grundzustandsenergie nicht aus der Zeitentwicklung quantenmechanischer Systeme abgelesen werden kann, sollte man sie so festlegen, daß die Berechnungen möglichst einfach und insbesondere daß sie endlich sind. Jeder Hohlraum läßt Photonen mit unendlich vielen Frequenzen ω_i zu. Ordnet man jeder Frequenz die Grundzustandsenergie $\hbar\omega_i/2$ zu, statt sie als Null zu wählen, so hat schon der Grundzustand ohne Photonen unendlich viel Energie $\sum_i \hbar\omega_i/2 = \infty$.

4.5 Kanonische Quantisierung, Normalordnung

Schon in der klassischen Physik liegt die Grundzustandsenergie nicht fest. Die Hamiltonfunktion des harmonischen Oszillators

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \tag{4.32}$$

verfügt durch Wahl des Potentials über die 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 H einfach, man hätte aber genauso gut das Potential $V(x) = 1/2\, m\omega^2 x^2 - \hbar\omega/2$ verwenden können.

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 zu lesen, die die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen (3.32) erfüllen. Als Operator gelesen hat (4.32) Eigenwerte $(n + 1/2)\hbar\omega$.

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

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

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{l} + \frac{i}{\hbar} l p\right), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{l} - \frac{i}{\hbar} l p\right) \tag{4.33}$$

können wir die Hamiltonfunktion des harmonischen Oszillators als Betragsquadrat schreiben.

$$H = \hbar\omega a^\dagger a \tag{4.34}$$

Quantisieren wir die Hamiltonfunktion in dieser Schreibweise, werden a und $a^\dagger$ Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren (2.40) und der zu (4.34) gehörige Hamiltonoperator hat Eigenwerte $n\hbar\omega$ (Kapitel 2.5).

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 $a\Omega = 0$ (2.47). Das heißt für die Ortswellenfunktion

$$\left(\frac{x}{l} + l\partial_x\right)\Omega(x) = 0 \ . \tag{4.35}$$

Die Grundzustandswellenfunktion des harmonischen Oszillators ist eine Gaußfunktion

$$\Omega(x) = (\pi^{-\frac{1}{4}} l^{-\frac{1}{2}})\, e^{-\dfrac{x^2}{2l^2}} \ . \tag{4.36}$$

Als Vorfaktor muß hier $l^{-\frac{1}{2}}$ auftreten, denn die Wellenfunktion einer kontinuierlichen Ortsvariablen hat die Dimension „Eins durch Wurzel Länge“ (3.3).

Wie die Hamiltonfunktion $H = \hbar\omega((1-\lambda)a^\dagger a + \lambda a a^\dagger)$ zeigt, hängt das Ergebnis kanonischer Quantisierung und insbesondere die Grundzustandsenergie von der Schreibweise der klassischen Hamiltonfunktion ab. Kanonische Quantisierung bildet Schreibweisen von Phasenraumfunktionen, nicht die Funktionen selbst, auf zugehörige Operatoren ab.

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

$$:c_1 H_1 + c_2 H_2: = c_1 :H_1: + c_2 :H_2: \, , \quad :1: = 1 \, , \tag{4.37}$$

und ist rekursiv dadurch erklärt, daß Erzeuger $a^\dagger$ links und Vernichter a rechts stehen,

$$:aH: = :Ha: = :H: a \, , \ :a^\dagger H: = :Ha^\dagger: = a^\dagger :H: \ . \tag{4.38}$$

Das Argument der Normalordnung sind Zeichenketten in kommutierenden Variablen a und $a^\dagger$, also *kommutierende*, klassische Variable. Insbesondere kann für das Argument der Normalordnung keine Operatoridentität wie $aa^\dagger - a^\dagger a = 1$ gelten, denn die Normalordnung von $aa^\dagger - a^\dagger a$ verschwindet, $:aa^\dagger - a^\dagger a: = a^\dagger a - a^\dagger a = 0 \neq 1$.

Das Ergebnis der Normalordnung eines Monoms 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

$$[a_i, a_j] = 0 \, , \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \, , \quad [a_i, a_j^\dagger] = \delta^j{}_i \ . \tag{4.39}$$

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

$$:H_1 H_2: \neq :H_1::H_2: \, , \tag{4.40}$$

denn Operatoren vertauschen normalerweise nicht.

Normalordnung von (4.32) führt zu verschwindender Grundzustandsenergie. Aber Normalordnung ist eine willkürliche Vorschrift zur Quantisierung. Klassische Hamiltonsche Systeme lassen sich durch kanonische Transformationen verschieden, aber äquivalent, beschreiben. Die Quantisierung in diesen verschiedenen Beschreibungen 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. Anderenfalls könnte man einem klassischen System, also dem quantisierten System nach Vernachlässigung der Quanteneigenschaften, das zugrunde liegende Quantensystem ansehen.

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.

4.6 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 die Form

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \ , \ E_1, E_2 \in \mathbb{R} \ . \tag{4.41}$$

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

$$i\hbar \partial_t \psi_i(t) = E_i \psi_i(t) \ , \quad i = 1, 2 \ , \tag{4.42}$$

mit der Lösung

$$\psi_1(t) = \psi_1(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_1 t} \ , \quad \psi_2(t) = \psi_2(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t} \ . \tag{4.43}$$

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

$$w(t) = |\phi_1^* \psi_1(t) + \phi_2^* \psi_2(t)|^2 \ . \tag{4.44}$$

Hierbei sind ϕ_1, ϕ_2 die Komponenten des ersten Eigenvektors des Meßapparates. Einfaches Rechnen $(|A + B|^2 = |A|^2 + |B|^2 + 2\Re A^* B)$ zeigt, daß $w(t)$ die Form

$$w(t) = a + b \cos(\omega t + \alpha) \ , \quad a \geq b \geq 0 \ , \ \omega, \alpha \in \mathbb{R} \tag{4.45}$$

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

$$\omega = \frac{E_1 - E_2}{\hbar} \ . \tag{4.46}$$

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-Oszillation der Wahrscheinlichkeit eines Meßwertes im Zweizustandssystem zeigt also, daß der vermessene Zustand eine Superposition, nicht ein Gemisch, verschiedener Energiezustände 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 an Neutrinos beobachtet. In der Quantenoptik ist das Phänomen eingedeutscht und heißt „quantum beat" (englisch beat bedeutet in der Musik Schwebung, also Schwingung der Lautstärke mit der Differenzfrequenz zweier Töne).

Wird nicht ein reiner Zustand sondern ein Gemisch ρ mit Eigenwerten ρ_i und Eigenzuständen Υ_i vermessen,[1] behält die Rabi-Frequenz ihren Wert. Die Parameter a, b und α

[1]Das Zeichen Υ ist der griechische Buchstabe Ypsilon.

sind $a = \rho_1 a_1 + \rho_2 a_2$ und (wenn man $\langle \Upsilon_1 | \Upsilon_2 \rangle = 0$ verwendet) $b e^{i\alpha} = b_1 e^{i\alpha_1}(\rho_1 - \rho_2)$, wobei a_i, b_i und α_i zu $\Psi = \Upsilon_i$ gehören. Die Amplitude b der Rabi-Oszillation ist also proportional zur Differenz der Eigenwerte $(\rho_1 - \rho_2)$ und nimmt mit abnehmender Polarisation ab. Insbesondere zeigt ein Gemisch von Energieeigenzuständen, anders als eine Superposition, keine Rabi-Oszillation.

4.7 Energiebänder

Wir untersuchen in eindimensionaler, spinloser Quantenmechanik das Spektrum (4.17) eines Hamiltonoperators mit periodischem Potential [12, Kapitel XIII.16] mit Periodizitätslänge l,

$$V(x + l) = V(x)\ , \quad \forall x\ . \tag{4.47}$$

Die Differentialgleichung (4.17) mit periodischer Funktion $V(x)$ heißt Hillsche Differentialgleichung. Sie kommt in der Mechanik bei Schwingungen mit periodisch zeitabhängiger Frequenz wie zum Beispiel bei der Bahn des Mondes vor.

Weil das Potential periodisch ist, vertauscht der Hamiltonoperator mit der Verschiebung U_l (3.27) um die Periodizitätslänge l,

$$\begin{aligned}(HU_l\Psi)(x) &= (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x))(U_l\Psi)(x) = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x))\Psi(x-l)\\ &= (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x-l))\Psi(x-l) = (U_l H\Psi)(x)\ , \quad [H, U_l] = 0\ .\end{aligned} \tag{4.48}$$

Demnach können der Hamiltonoperator und die unitäre Transformation U_l gemeinsam diagonalisiert werden (2.27). Hieraus folgt mit den nachstehenden Überlegungen, daß es Brillouin-Zonen und Energiebänder gibt mit Dispersionsrelationen, die reflektionssymmetrisch und im Inneren der Energiebänder monoton sind.

Die Verschiebung ist eine unitäre Transformation (3.27) mit komplexen Eigenwerten vom Betrag 1 (2.10). Diese Eigenwerte schreiben wir als e^{-ikl} mit reellem k. Dann lautet die Eigenwertgleichung $U_{-l}\Psi_k = e^{ikl}\Psi_k$

$$\Psi_k(x + l) = e^{ikl}\Psi_k(x)\ . \tag{4.49}$$

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 $V \equiv 0$ ist trivialerweise periodisch. Dennoch sind die Wellenpakete, die freien Teilchen entsprechen, nicht periodisch, sie sind aus periodischen Funktionen zusammengesetzt.

Der Eigenwert e^{ikl} legt $k\,l$ nur bis auf Vielfache von 2π fest. Funktionen des Eigenwertes sind daher $2\pi/l$-periodische Funktionen von k. Daher kann man k auf Werte aus der Brillouin-Zone $-\pi/l \leq k \leq \pi/l$ einschränken.

Die Eigenwertgleichung (4.17) ist eine reelle, lineare, homogene Differentialgleichung zweiter Ordnung für die Wellenfunktion $\Psi(x)$. Daher hängen 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,

$$u(x) = \begin{pmatrix} \Psi(x) \\ \Psi'(x) \end{pmatrix} , \tag{4.50}$$

so gilt mit einer Matrix A

$$u(l) = A\, u(0) \ . \tag{4.51}$$

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 $u(0)$ der reellen Differentialgleichung $H\Psi = E\Psi$ gehört eine reelle Lösung $u(x)$

$$A = A^* = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} , \quad a, b, c, d \in \mathbb{R} \ . \tag{4.52}$$

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

Aus der Eigenwertgleichung (4.17) folgt unmittelbar, daß der quantenmechanische Strom, die Wronski-Determinante, x-unabhängig ist,

$$\begin{gathered} \frac{2im}{\hbar}\, j = \Psi^* \overleftrightarrow{\partial}_x \Psi = \Psi^*(\partial_x \Psi) - (\partial_x \Psi^*)\Psi = -u^\dagger(x) I u(x) \ , \quad \text{mit} \quad I = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \\ \partial_x \big(u^\dagger(x) I u(x)\big) = 0 \ . \end{gathered} \tag{4.53}$$

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

$$(Au)^\dagger I A u = u^\dagger I u \quad \forall u \tag{4.54}$$

und daher

$$A^\dagger I A = I \ . \tag{4.55}$$

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

$$ad - bc = 1 \ . \tag{4.56}$$

Die Matrix A ist aus der Gruppe der speziellen linearen Transformationen von $\mathbb{R}^2$

$$A \in \mathrm{SL}(2, \mathbb{R}) \ . \tag{4.57}$$

Die Eigenwerte von A

$$\lambda_{1,2} = \frac{a+d}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a+d}{2}\right)^2 - 1} \tag{4.58}$$

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

$$|\operatorname{tr} A| \geq 2 \Rightarrow \lambda_1 = \lambda_1^* = \frac{1}{\lambda_2} \tag{4.59}$$

Lösungen $u(x)$, die zu Eigenwerten mit $|\lambda| > 1$ gehören, wachsen für $x \to \infty$ wegen $u(x + nl) = \lambda^n u(x)$ exponentiell an. Die zum anderen Eigenwert $\lambda_2 = \lambda^{-1}$ gehörige Lösung wächst wegen $u_2(x - nl) = \lambda_2{}^{-n} u_2(x)$ in Gegenrichtung für $x \to -\infty$. 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

$$|\operatorname{tr} A| < 2 \Rightarrow \lambda_1 = \lambda_2^* , \quad |\lambda_1| = 1 \ . \tag{4.60}$$

Die Periodizitätsbedingung (4.49) besagt, daß die Eigenfunktion $\Psi(x)$ zu Eigenvektoren der Matrix A mit Eigenwerten e^{ikl} gehört

$$\left(A - \mathrm{e}^{ikl}\right)\begin{pmatrix}\Psi(0)\\ \Psi'(0)\end{pmatrix} = 0 \ . \tag{4.61}$$

Dies schränkt die Energie E auf Bänder ein, für die $|\operatorname{tr} A(E)| \leq 2$ gilt, für die also die Eigenwerte von A auf dem Einheitskreis in der komplexen Ebene liegen. In diesen Bändern hängen k und E durch

$$\cos(k\,l) = \frac{1}{2}\operatorname{tr} A \tag{4.62}$$

zusammen, denn nach (4.58) ist $\frac{1}{2}\operatorname{tr} A$ der Realteil der Eigenwerte $\lambda_{1,2} = \mathrm{e}^{\pm i\,k\,l}$.

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

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & 2 - a \end{pmatrix} + \delta E \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \ . \tag{4.63}$$

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 (und durch $\det A = 1$ eingeschränkt, $(2 - a)\alpha + a\delta - b\gamma - c\beta = 0$). Hat $|\operatorname{tr} A| - 2$ einen Nulldurchgang und ist $\frac{d}{dE}\operatorname{tr} A = \alpha + \delta \neq 0$, dann variieren die Eigenwerte in einer Umgebung der Bandkante in niedrigster Ordnung in $(\delta E)^{\frac{1}{2}}$ mit

$$\lambda_{1,2} \approx \operatorname{sign}(\operatorname{tr} A) \pm \sqrt{\delta E(\alpha + \delta)\operatorname{sign}(\operatorname{tr} A)} \ . \tag{4.64}$$

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

$$E(k) = E(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2M} + \ldots \quad \text{mit} \ \ M = \frac{\hbar^2}{2l^2}\left|\frac{d}{dE}\operatorname{tr} A\right| \ . \tag{4.65}$$

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 $|\operatorname{tr} A| - 2$ einen Nulldurchgang und ist $\alpha + \delta \neq 0$, so verschwindet dort die Ableitung $\frac{dE}{dk}$ und die Krümmung $\frac{d^2E}{dk^2}$ ist negativ

$$\frac{dE}{dk}_{|k=\pm\frac{\pi}{l}} = 0\,, \quad \frac{d^2E}{dk^2}_{|k=\pm\frac{\pi}{l}} = -2l^2 |\frac{d}{dE}\operatorname{tr} A|^{-1}\ . \tag{4.66}$$

Innerhalb jedes Bandes ist k eine monotone Funktion der Energie E. Dies sieht man, wenn man die Eigenfunktion von (4.17) und (4.49) als Produkt von e^{ikx} und einer periodischen Funktion $u_k(x + l) = u_k(x)$ schreibt,

$$\Psi_k(x) = \sqrt{\frac{l}{2\pi}}\, e^{ikx}\, u_k(x)\ . \tag{4.67}$$

Die Schrödinger-Eigenwertgleichung lautet dann

$$H(k)\, u_k = \big(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\big)\, u_k\ , \quad H(k) = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\hbar k}{m}\big(-i\hbar\frac{d}{dx}\big) + V(x)\ . \tag{4.68}$$

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

$$\langle u|v\rangle = \int_0^l dx\, u^*(x)\, v(x) \tag{4.69}$$

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 (4.58) 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 (2.84) für normierte u_k und mit

$$P u_k(x) = -i\hbar\frac{d}{dx} u_k(x) \tag{4.70}$$

$$1 - \frac{\hbar^2 k}{m}\frac{dk}{dE} = \langle u_k|\frac{dH(k)}{dk}\, u_k\rangle\ \frac{dk}{dE} = \langle u_k|P\, u_k\rangle\ \frac{\hbar}{m}\frac{dk}{dE}\ . \tag{4.71}$$

Diese Gleichung schließt Nullstellen von $\frac{dk}{dE}$ aus, denn das Matrixelement $\langle u_k|P\, u_k\rangle$ ist endlich. Es ist $u_k(x)$ differenzierbar, wenn das Potential V nichtsingulär 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

$$v_{\text{Gruppe}} = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial k} = \frac{1}{m}(\hbar k + \langle u_k|P\, u_k\rangle) \tag{4.72}$$

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

$$\langle u_k | P u_k \rangle = \hbar k \left(\frac{m}{M} - 1\right) + O(k^2) , \tag{4.73}$$

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

$$\langle u_{\frac{\pi}{l}} | P u_{\frac{\pi}{l}} \rangle = -\langle u_{-\frac{\pi}{l}} | P u_{-\frac{\pi}{l}} \rangle = -\hbar \frac{\pi}{l} . \tag{4.74}$$

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

$$u_k(x) = \sum_n c_n e^{in\frac{2\pi}{l}x} \tag{4.75}$$

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

$$\begin{aligned} \langle \Psi_k | \Psi_{k'} \rangle &= \frac{l}{2\pi} \int dx \left(e^{ikx} \sum_n c_n e^{in\frac{2\pi}{l}x}\right)^* \left(e^{ik'x} \sum_m c'_m e^{im\frac{2\pi}{l}x}\right) \\ &= l \sum_{m,n} c_n^* \, c'_m \, \delta\!\left(k' - k + (m-n)\frac{2\pi}{l}\right) \\ &= \left(l \sum_n c_n^* c'_n\right) \delta(k'-k) = \langle u_k | u'_k \rangle \; \delta(k'-k) . \end{aligned} \tag{4.76}$$

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

$$\langle \Psi_k | \Psi_{k'} \rangle = \delta(k'-k) . \tag{4.77}$$

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 (4.68) mit verschiedenen Eigenwerten $E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ orthogonal zueinander sind.

Hat an der Bandkante $|\operatorname{tr} A| - 2$ einen Nulldurchgang, so gibt es zwischen den Bändern Lücken. Diese Lücke verschwindet, wenn $|\operatorname{tr} A| = 2$ 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 $e^{ikl} \neq \pm 1$ der Verschiebung (4.49), so gehören dazu abzählbar viele Energieeigenzustände mit nichtentarteten Energien. Diese Eigenzustände gehören zu den verschiedenen Bändern.

4.8 Der kugelsymmetrische, harmonische Oszillator

Der Hamiltonoperator des kugelsymmetrischen, harmonischen Oszillators

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \vec{x}^2 - \frac{3}{2}\hbar\omega \tag{4.78}$$

ist die Summe von drei Hamiltonoperatoren für eindimensionale, harmonische Bewegung, die miteinander vertauschen,

$$\begin{aligned} H_x &= \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}\, m\,\omega^2\, x^2 - \frac{1}{2}\hbar\omega = \hbar\omega\, a_x^\dagger a_x \ , \\ H_y &= \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}\, m\,\omega^2\, y^2 - \frac{1}{2}\hbar\omega = \hbar\omega\, a_y^\dagger a_y \ , \\ H_z &= \frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2}\, m\,\omega^2\, z^2 - \frac{1}{2}\hbar\omega = \hbar\omega\, a_z^\dagger a_z \ , \\ H = H_x + H_y + H_z \ , &\quad [H_x, H_y] = [H_x, H_z] = [H_y, H_z] = 0 \ . \end{aligned} \tag{4.79}$$

Denn die Erzeuger $a_i^\dagger$ und Vernichter a_j, $i, j \in \{x, y, z\}$,

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\frac{x^i}{l} + i\frac{l}{\hbar}p_i\Big) \ , \quad a_i^\dagger = (a_i)^\dagger \ , \quad l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \ , \tag{4.80}$$

genügen wegen der Heisenbergschen Vertauschungsrelationen (3.32) den Gleichungen

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \ , \quad [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \ , \quad [a_i, a_j] = 0 \ . \tag{4.81}$$

Weil H_x, H_y und H_z miteinander vertauschen, gibt es eine gemeinsame Eigenbasis Λ_{n_x,n_y,n_z} der drei Hamiltonoperatoren. Ihre Eigenwerte sind Vielfache der Anregungsenergie $\hbar\omega$ (2.11) und addieren sich zur Gesamtenergie

$$\begin{aligned} H_x\Lambda_{n_x,n_y,n_z} &= \hbar\omega\, n_x\, \Lambda_{n_x,n_y,n_z} \ , \\ H_y\Lambda_{n_x,n_y,n_z} &= \hbar\omega\, n_y\, \Lambda_{n_x,n_y,n_z} \ , \\ H_z\Lambda_{n_x,n_y,n_z} &= \hbar\omega\, n_z\, \Lambda_{n_x,n_y,n_z} \ , \\ H\Lambda_{n_x,n_y,n_z} &= \hbar\omega\, n\, \Lambda_{n_x,n_y,n_z} \ , \qquad n = n_x + n_y + n_z \ . \end{aligned} \tag{4.82}$$

Die Besetzungszahlen n_x, n_y, n_z und folglich n sind nichtnegativ und ganzzahlig.

Die Energie des Grundzustandes $\Omega = \Lambda_{0,0,0}$ verschwindet und seine Ortswellenfunktion ist durch (4.35)

$$\begin{aligned} a_x\Omega = 0 \ , &\quad \Big(\frac{x}{l} + l\frac{\partial}{\partial x}\Big)\Omega(x, y, z) = 0 \ , \\ a_y\Omega = 0 \ , &\quad \Big(\frac{y}{l} + l\frac{\partial}{\partial y}\Big)\Omega(x, y, z) = 0 \ , \\ a_z\Omega = 0 \ , &\quad \Big(\frac{z}{l} + l\frac{\partial}{\partial z}\Big)\Omega(x, y, z) = 0 \ , \end{aligned} \tag{4.83}$$

sowie die Normierungsbedingung festgelegt (4.36)

$$\Omega(\vec{x}) = \pi^{-\frac{3}{4}}\, l^{-\frac{3}{2}}\, \exp -\frac{\vec{x}^2}{2l^2} \ . \tag{4.84}$$

Durch wiederholtes Anwenden von Erzeugern erhält man die Zustände

$$\Lambda_{n_x,n_y,n_z} = \frac{1}{\sqrt{n_x!n_y!n_z!}}(a_x^\dagger)^{n_x}(a_y^\dagger)^{n_y}(a_z^\dagger)^{n_z}\Omega \tag{4.85}$$

mit Energie $\hbar\omega\,(n_x + n_y + n_z)$.

Da Linearkombinationen von Zuständen gleicher Energie ebenfalls Zustände dieser Energie sind, hat jeder Zustand der Form $P_n(a^\dagger_x, a^\dagger_y, a^\dagger_z)\Omega$ die Energie $\hbar\omega\, n$, falls P_n ein homogenes Polynom vom Grad n ist.

Es gibt $k+1$ Zerlegungen einer Besetzungszahl k in zwei Besetzungszahlen, da der erste Summand in den verschiedenen Fällen die Werte $0, 1, \ldots k$ haben kann. Wenn in der Summe $n = n_x + n_y + n_z$ der dritte Summand n_z in den verschiedenen Fällen die Werte n, $n-1$ oder 0 hat, sind die ersten beiden eine Zerlegung von $k = n - n_z$. Daraus ergibt sich die Gesamtzahl der Zerlegungen von n in drei Summanden und der Entartungsgrad des n-ten angeregten Niveaus als

$$\sum_{k=0}^{n}(k+1) = \sum_{k=1}^{n+1} k = \frac{(n+1)(n+2)}{2}\ . \tag{4.86}$$

Insbesondere ist der Grundzustand nicht entartet. Das erste angeregte Niveau ist dreifach und das zweite angeregte Niveau sechsfach entartet.

Da der Hamiltonoperator aus der drehinvarianten kinetischen Energie und einem drehinvarianten Potential besteht, ist er drehinvariant und vertauscht mit den Drehimpulsoperatoren L_i, $i \in \{x, y, z\}$,

$$[H, L_i] = 0\ . \tag{4.87}$$

Daher ist $L_i\Lambda$ Energieeigenzustand zum Eigenwert $n\,\hbar\omega$, wenn Λ Energieeigenzustand zu diesen Eigenwert ist: die Unterräume fester Energie werden von Drehungen auf sich abgebildet.

Da die Ortswellenfunktion des Grundzustandes Ω nur über $\vec{x}^2$ von $\vec{x}$ abhängt, ist sie invariant unter Drehungen und wird von den Drehimpulsoperatoren L_i vernichtet,

$$L_i\Omega = 0\ . \tag{4.88}$$

Unter Drehungen transformieren der Ort und der Impuls wie Vektoren, das heißt,

$$[L_i, X^j] = i\hbar\,\epsilon_{ijk}X^k\ ,\quad [L_i, P_j] = i\hbar\,\epsilon_{ijk}P_k\ . \tag{4.89}$$

Demnach transformieren auch die Erzeuger wie Vektoren, denn sie sind Linearkombinationen von Vektoren. Insbesondere gilt

$$[L_z, a^\dagger_x + i\,a^\dagger_y] = \hbar\,(a^\dagger_x + i\,a^\dagger_y)\ ,\quad [L_x + i\,L_y, a^\dagger_x + i\,a^\dagger_y] = 0\ . \tag{4.90}$$

Daher ist der m-fach angeregte Zustand

$$(a^\dagger_x + i\,a^\dagger_y)^m\Omega \tag{4.91}$$

ein L_z-Eigenzustand zum Eigenwert $\hbar\,m$,

$$L_z(a^\dagger_x + i\,a^\dagger_y)^m\Omega = [L_z, (a^\dagger_x + i\,a^\dagger_y)^m]\Omega = \hbar\,m\,(a^\dagger_x + i\,a^\dagger_y)^m\Omega\ . \tag{4.92}$$

Da der Aufsteiger $L_+ = L_x + i\,L_y$ diesen Zustand vernichtet,

$$L_+(a_x^\dagger + i\,a_y^\dagger)^m\Omega = [L_+, (a_x^\dagger + i\,a_y^\dagger)^m]\Omega = 0, \tag{4.93}$$

ist diese m-Quantenzahl die größte in dem Drehimpulsmultiplett, die man durch Anwenden der Drehimpulsoperatoren auf diesen Zustand erhält, und stimmt mit der l-Quantenzahl überein, (nicht zu verwechseln mit der Längenskala $\sqrt{\hbar/(m\omega)}$)

$$\vec{L}^2(a_x^\dagger + i\,a_y^\dagger)^l\Omega = \hbar^2\, l(l+1)\,(a_x^\dagger + i\,a_y^\dagger)^l\Omega\ . \tag{4.94}$$

Die übrigen Basiszustände des Drehimpulsmultipletts erhält man daraus durch Absteigen,

$$\begin{gathered}\chi_{lm} = (L_-)^{l-m}(a_x^\dagger + i\,a_y^\dagger)^l\Omega\ ,\quad L_z\chi_{lm} = \hbar\, m\,\chi_{lm}\ ,\quad \vec{L}^2\chi_{lm} = \hbar^2\, l(l+1)\,\chi_{lm}\ ,\\ m \in \{l, l-1, l-2\ldots -l\}\ .\end{gathered} \tag{4.95}$$

Da $a_i^\dagger a_i^\dagger$ mit allen Drehimpulsoperatoren vertauscht, denn Längenquadrate von Vektoren sind drehinvariant,

$$[L_i, a_j^\dagger a_j^\dagger] = 0\ , \tag{4.96}$$

sind auch die Zustände $(a_i^\dagger a_i^\dagger)^k\chi_{lm}$ Eigenzustände von L_z und $\vec{L}^2$ mit Eigenwerten $\hbar\, m$ und $\hbar^2\, l(l+1)$.

Die Zustände $(a_i^\dagger a_i^\dagger)^k\chi_{lm}$ entstehen aus dem Grundzustand durch Anwenden eines homogenen Polynoms vom Grad $l + 2k$ in den Erzeugungsoperatoren. Daher gehören sie zum n-ten Anregungsniveau mit $n = l + 2k$. Bei festgehaltenem n gibt es daher für l die möglichen Werte n, $n-2$ und so weiter bis $l = 0$ oder $l = 1$, je nach dem ob n gerade oder ungerade ist. Folglich enthält der Unterraum der n-fach angeregten Zustände jeweils mindestens ein Drehimpulsmultiplett mit

$$l = \begin{cases} 0, 2, 4\ldots n & \text{falls } n \text{ gerade ist,}\\ 1, 3, 5\ldots n & \text{falls } n \text{ ungerade ist.}\end{cases} \tag{4.97}$$

Dies sind schon alle Zustände auf dem n-ten Energieniveau, denn seine Entartung (4.86) stimmt mit der summierten Dimension dieser $2l + 1$-dimensionalen Drehimpulsmultipletts überein.[2]

Welche l-Werte in energieentarteten Unterräumen drehinvarianter Hamiltonoperatoren auftreten, hängt, wie der Vergleich mit dem Wasserstoffatom zeigt, vom Potential ab.

4.9 Der starre Körper

Bei der Bewegung eines starren Körpers bleiben alle Abstände seiner Bestandteile unverändert. Bei seiner Bewegung handelt es sich daher um die zeitliche Änderung des

[2] Ist $n = 2q$ gerade, so auch $l = 2p$, und die Summe der Dimensionen beträgt $\sum_{p=0}^{q}(2\,(2p)+1) = 2q(q+1)+q+1 = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$; ist $n = 2q'+1$ ungerade, so auch $l = 2p'+1$, und die Summe lautet $\sum_{p'=0}^{q'}(2\,(2p'+1)+1) = 2q'\,(q'+1)+3\,(q'+1) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$.

Schwerpunktes $\vec{r}$ und seiner körperfesten Achsen, die jederzeit ein dreidimensionales Orthogonalsystem $\vec{e}_i$, $\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij}$ definieren. Bezogen auf ein festgewähltes Orthogonalsystem $\vec{f}_k$, $\vec{e}_j = \vec{f}_k e^k{}_j$ sind die Komponenten $e^k{}_j$ dieser Basisvektoren Matrixelemente $R^k{}_j$ von Matrizen R, die wegen $\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij}$ orthogonal sind, $R^T R = \mathbf{1}$. Zu jeder Lage des starren Körpers gehört genau eine Drehmatrix $R \in SO(3)$ und ein Ort $\vec{r}$.

In der Quantenmechanik ist folglich der Zustand Ψ eines spinlosen, starren Körpers durch eine Wahrscheinlichkeitsamplitude für den Ort des Schwerpunkts und die Lage der Achsen gegeben,

$$\Psi : \begin{cases} \mathbb{R}^3 \times SO(3) & \to \quad \mathbb{C} \\ \quad (x, R) & \mapsto \quad \Psi(x, R) \end{cases} . \tag{4.98}$$

Wir betrachten einfachheitshalber im Folgenden nur starre Körper mit freier Bewegung des Schwerpunktes und nur Produktzustände, in der die Ortsmessung nichts über die Lage der Achsen aussagt. Dann hängt der uns interessierende Teil der Wellenfunktion nur von R ab. Da die Menge der Drehungen die Mannigfaltigkeit $S^3/\mathbb{Z}_2$ ist [6, Anhang D], sind die Wellenfunktionen eines starren Körpers die Wellenfunktionen eines Teilchens, das sich auf der Oberfläche S^3 der Einheitskugel in vier Dimensionen aufhalten und bewegen kann. Dabei hat die Wellenfunktion in antipodalen Punkten gleiche Werte, denn sie ist nur eine Funktion von $S^3/\mathbb{Z}_2$, also der Menge der antipodalen Punktpaare.

Dreht man den starren Körper in eine andere Lage, so verändert sich die Matrix R durch diese Drehung D in die neue Lage $D\,R$, die durch das Matrixprodukt von D und R gegeben ist. Bezieht man die unveränderte Lage auf andere gedrehte Basisvektoren $\vec{f}'_k = D'\vec{f}_k$, so wird die Lage bezogen auf die anderen Basisvektoren durch die Matrix $R\,D'^{-1}$ angegeben, denn auf die Basisvektoren $\vec{f}'_k$ muß man zunächst die inverse Drehung D'^{-1} anwenden, um zu $\vec{f}_k$ zu gelangen, und dann die Drehung R, die die Lage charakterisiert. Die Abbildungen

$$L_D : R \mapsto D\,R \tag{4.99}$$

nennt man Linkstranslation der Gruppe SO(3) oder auch aktive Drehung, die Abbildung

$$R_{D'} : R \mapsto R\,D'^{-1} \tag{4.100}$$

Rechtstranslation oder passive Drehung. Hintereinander ausgeführte Links- und Rechtstranslationen genügen derselben Gruppenmultiplikation wie die Drehungen, das heißt

$$L_{D_1} L_{D_2} = L_{D_1 \circ D_2} \ , \quad R_{D_1} R_{D_2} = R_{D_1 \circ D_2} \ . \tag{4.101}$$

Zudem vertauschen Links- mit Rechtstranslationen.

$$L_D R_{D'} = R_{D'} L_D \tag{4.102}$$

Körperfeste Drehungen und raumfeste Drehungen hängen folgendermaßen zusammen: Bezeichne $\vec{e}$ die Richtung einer Körperachse in der Ausgangslage $R = 1$. In der Ausgangslage stimmen raumfeste und körperfeste Richtungen überein. Verändert man die Lage des Körpers durch eine Drehung R, so wird die körperfeste Richtung mitgedreht und geht in $R\vec{e}$ über: $R\vec{e}$ ist die körperfeste $\vec{e}$-Achse. Bezeichnen wir mit $R_{\alpha\vec{e}}$ die Drehung um die $\vec{e}$-Achse um den Winkel α, so ist $R\,R_{\alpha\vec{e}}\,R^{-1}$ die Drehung um die körperfeste e-Achse um denselben Winkel, denn $R\,R_{\alpha\vec{e}}\,R^{-1}$ läßt $R\vec{e}$ invariant und hat dieselben Eigenwerte, also denselben Drehwinkel wie $R_{\alpha\vec{e}}$. Eine Drehung um eine körperfeste Richtung $\vec{e}$ um den Winkel α ändert die Lage R in $R\,R_{\alpha\vec{e}}\,R^{-1}\,R = RR_{\alpha\vec{e}}$, wobei $R_{\alpha\vec{e}}$ die entsprechende raumfeste Drehung bezeichnet. Jede körperfeste Drehung bewirkt die Rechtstranslation der Lage um die inverse raumfeste Drehung.

Auf der Menge der Lagen des starren Körpers, das ist die Drehgruppe SO(3), wirkt durch aktive und passive Drehungen die Gruppe SO(3) × SO(3) mit den Abbildungen

$$T_{D,D'} : \left\{ \begin{array}{ccc} \mathrm{SO}(3) & \to & \mathrm{SO}(3) \\ R & \mapsto & D\,R\,D'^{-1} \end{array} \right. . \tag{4.103}$$

Auf quantenmechanische Zustände wirken diese Transformationen durch die zugehörige unitäre Transformation (3.20)

$$U_{D,D'}\Psi = \Psi' = \Psi \circ L_{D^{-1}} \circ R_{D'^{-1}} \ , \quad \Psi'(R) = \Psi(D^{-1}\,R\,D') \ . \tag{4.104}$$

Die Transformation ist unitär und benötigt keine Determinanten-Faktoren der Jacobi-Matrix, wenn das Skalarprodukt der Wellenfunktionen mit einem invarianten Integrationsmaß $\mu(R)\,d^3R$ auf SO(3) definiert wird, für das

$$\mu(R)d^3R = \mu(D\,R)d^3(D\,R) = \mu(R\,D')d^3(R\,D') \tag{4.105}$$

gilt. Auf kompakten Gruppen wie der SO(3) existiert solch ein links- und rechtsinvariantes Maß.

Der Hamiltonoperator eines starren Körpers ist

$$H = \frac{L_x^2}{2I_x} + \frac{L_y^2}{2I_y} + \frac{L_z^2}{2I_z} \ . \tag{4.106}$$

Dabei sind I_x, I_y, I_z die Hauptträgheitsmomente und $-L_x, -L_y, -L_z$ die Drehimpulsoperatoren, die Drehungen um die körperfesten Hauptträgheitsachsen erzeugen. Folglich sind L_x, L_y, L_z die Operatoren, die die Rechtstranslation erzeugen und, weil Rechtstranslationen dieselbe Gruppenverknüpfung haben wie Linkstranslationen, der Drehimpulsalgebra (2.50) genügen,

$$(\exp\bigl(-\frac{i}{\hbar}\,\alpha\,\vec{n}\cdot\vec{L}\bigr)\,\Psi)(R) = \Psi(R\,R_{\alpha\vec{n}}) \ . \tag{4.107}$$

Im Spezialfall, auf den wir uns im Weiteren beschränken, seien zwei Hauptträgheitsmomente des starren Körpers gleich, $I_x = I_y = I$. Dann ist der Hamiltonoperator von der Form

$$H = \frac{1}{2I}(L_x^2 + L_y^2) + \frac{1}{2I_z}L_z^2 = \frac{1}{2I}\vec{L}^2 + (\frac{1}{2I_z} - \frac{1}{2I})L_z^2 \tag{4.108}$$

und seine Energien

$$E_{l,m} = \frac{\hbar^2}{2I}\,l\,(l+1) + \hbar^2(\frac{1}{2I_z} - \frac{1}{2I})m^2 \tag{4.109}$$

ergeben sich aus den Drehimpulsquantenzahlen l, m der Eigenfunktionen zu $\vec{L}^2$ und L_z, die im Raum der Wellenfunktionen von SO(3) in $\mathbb{C}$ auftreten.

Solche Eigenfunktionen lassen sich einfach angeben, ohne viel von ihnen wissen zu müssen. In jedem Drehimpulsmultiplett mit Gesamtdrehimpuls l sind die Matrixelemente

$$D^{l\,n}{}_m(R) = \langle \Lambda_{l,n} | U(R) \Lambda_{l,m} \rangle \ , \quad m, n \in \{l, l-1 \cdots -l\} \ , \tag{4.110}$$

einer unitären Darstellung $U(R)$ der Drehgruppe die Funktionswerte von komplexwertigen Funktionen von SO(3) ,

$$D^{l\,n}{}_m : \begin{cases} \mathrm{SO}(3) & \rightarrow \quad \mathbb{C} \\ R & \mapsto \quad \langle \Lambda_{l,n} | U(R) \Lambda_{l,m} \rangle \end{cases} . \tag{4.111}$$

Insbesondere gilt für Drehungen um die z-Achse, da die $\Lambda_{l,m}$ Eigenfunktionen von L_z zum Eigenwert $\hbar m$ sind,

$$D^{l\,n}{}_m(R_{\alpha\vec{e}_z}) = \left\langle \Lambda_{l,n} \middle| e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z} \Lambda_{l,m} \right\rangle = e^{-im\alpha} \delta^n{}_m \ . \tag{4.112}$$

Weil $U(R)$ eine Darstellung ist, $U(R_2)\,U(R_1) = U(R_2\,R_1)$, sind die Matrizen D^l eine Darstellung

$$D^{l\,n}{}_m(R_2\,R_1) = \sum_k D^{l\,n}{}_k(R_2)\, D^{l\,k}{}_m(R_1) \ . \tag{4.113}$$

Daher besagt (4.107) für die Funktionen $\Psi = D^{l\,n}{}_m$,

$$\begin{aligned} \big(\exp\big(-\frac{i}{\hbar}\,\alpha\, L_z\big)\, D^{l\,n}{}_m\big)(R) &= D^{l\,n}{}_m(R\,R_{\alpha\vec{e}_z}) \\ &= \sum_k D^{l\,n}{}_k(R)\, D^{l\,k}{}_m(R_{\alpha\vec{e}_z}) = D^{l\,n}{}_m(R)\, e^{-im\alpha} \ , \end{aligned} \tag{4.114}$$

daß diese Funktionen Eigenfunktionen von L_z zum Eigenwert $\hbar m$ sind. Dabei ist m ganzzahlig, denn die Drehung um 2π führt jede Lage in sich über, $R_{2\pi\vec{e}_z} = 1$.

Unter beliebigen Rechtstranslationen gehen Linearkombinationen $\sum_m D^{l\,n}{}_m \Psi_m$ für festes l und festes n in andere solche Linearkombination über

$$\sum_m D^{l\,n}{}_m(R\,R_{\alpha\vec{e}})\Psi_m = \sum_{km} D^{l\,n}{}_k(R)\, D^{l\,k}{}_m(R_{\alpha\vec{e}})\Psi_m \ . \tag{4.115}$$

Es ist also der $(2l+1)$-dimensionale Vektorraum dieser Funktionen invariant unter Rechtstranslationen. Da er eine Basis von L_z-Eigenfunktionen mit Eigenwerten $m = l, l-1, \cdots -l$ hat, sind die Funktionen Eigenfunktionen von $\vec{L}^2$ zum Eigenwert $\hbar^2\, l\,(l+1)$.

Man prüft ebenso, daß die Funktionen $D^{l\,n}{}_m$ Eigenfunktionen des Operators L'_z sind, der Linkstranslationen erzeugt, und zwar zum Eigenwert $-\hbar n$. Für verschiedene l oder verschiedene n oder verschiedene m sind diese Funktionen daher aufeinander senkrecht.

Der Satz von Peter und Weyl besagt, daß sie vollständig sind. Sie spannen den ganzen Hilbertraum der quadratintegrablen Funktionen von SO(3) auf. Demnach haben wir mit den $D^{l\,n}{}_m$ schon alle Eigenfunktionen von L_z und $\vec{L}^2$ und damit des Hamiltonoperators gefunden. Ihre Energien $E_{l,m}$ (4.109) hängen nicht von n und nicht vom Vorzeichen von m ab. Also sind sie $(2l+1)$-fach entartet, falls $m = 0$ ist, für $m \neq 0$ doppelt so oft.

5 Zusammengesetzte Systeme

5.1 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

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \ , \tag{5.1}$$

dessen Elemente Summen von Vielfachen von Paaren $u \otimes v$ von Elementen $u \in \mathcal{H}_1$ und $v \in \mathcal{H}_2$ der einzelnen Hilberträume sind. Diese Paare sind Produkte, das heißt, für alle u und u' aus $\mathcal{H}_1$ und für alle v und v' aus $\mathcal{H}_2$ und für alle komplexen Zahlen c gelten die Distributivgesetze

$$(cu + u') \otimes v = c(u \otimes v) + (u' \otimes v) \quad , \quad u \otimes (cv + v') = c(u \otimes v) + (u \otimes v') \ . \tag{5.2}$$

Das Skalarprodukt von Produktzuständen ist durch das Produkt der einzelnen Skalarprodukte definiert

$$\langle u' \otimes v' | u \otimes v \rangle_{\otimes} = \langle u' | u \rangle_1 \, \langle v' | v \rangle_2 \ , \tag{5.3}$$

wobei wir deutlichkeitshalber die Skalarprodukte durch die Bezeichnungen der Hilberträume ergänzt haben. Da das Skalarprodukt sesquilinear ist, ist es auch für alle Linearkombinationen von Produktzuständen, also für den ganzen Produkthilbertraum $\mathcal{H}$, definiert.

Die Produkte $\chi_i \otimes \phi_\alpha$ der Vektoren einer Orthonormalbasis χ_i von $\mathcal{H}_1$ mit den Vektoren ϕ_α einer Orthonormalbasis von $\mathcal{H}_2$ bilden eine orthonormale Produktbasis von $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Bezüglich solch einer Basis haben Zustände ψ die Entwicklung

$$\psi = \sum_{i\,\alpha} \chi_i \otimes \phi_\alpha \, \psi_{i\alpha} \ , \quad \psi_{i\alpha} = \langle \chi_i \otimes \phi_\alpha | \psi \rangle \ . \tag{5.4}$$

Die Komponenten $\psi_{i\alpha}$ definieren Abbildungen $N : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1$ und $N^\dagger : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$,

$$N(\sum_\alpha \phi_\alpha v_\alpha) = \sum_i \chi_i (\sum_\alpha \psi_{i\,\alpha} v_\alpha) \ , \quad N^\dagger(\sum_i \chi_i u_i) = \sum_\alpha \phi_\alpha (\sum_i \psi^*_{i\,\alpha} u_i) \ , \tag{5.5}$$

die nicht von der Basis χ_i von $\mathcal{H}_1$ und nicht von der Basis ϕ_α von $\mathcal{H}_2$ abhängen.

Die Abbildung $N^\dagger N : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_2$ ist hermitesch. Ihre Eigenvektoren v_n zu verschiedenen Eigenwerten λ_n^2, $N^\dagger N v_n = \lambda_n^2 v_n$, stehen aufeinander senkrecht und können bei entarteten Eigenwerten senkrecht zueinander gewählt werden. Wählen wir die v_n normiert, so bilden sie eine Orthonormalbasis von $\mathcal{H}_2$.

Für $m = n$ besagt $\langle N\nu_m | N\nu_n\rangle = \langle \nu_m | N^\dagger N \nu_n\rangle = \lambda_n^2 \delta_{mn}$ (keine Summe über n), daß die Eigenwerte λ_n^2 von $N^\dagger N$ nicht negativ sind und daß $N\nu_n = \lambda_n u_n$ für $\lambda_n > 0$ normierte Vektoren $u_n \in \mathcal{H}_1$ definiert. Für $m \neq n$ besagt dieselbe Gleichung, daß die u_m aufeinander senkrecht stehen. Falls sie nicht $\mathcal{H}_1$, sondern nur einen Unterraum aufspannen, denken wir uns die u_n zu einer Orthonormalbasis ergänzt.

Demnach definiert jeder normierte Zustand ψ eine Orthonormalbasis $u_1, u_2 \dots$ von $\mathcal{H}_1$ und eine Orthonormalbasis $\nu_1, \nu_2 \dots$ von $\mathcal{H}_2$, in der ψ die Komponenten $\psi_{nm} = \lambda_n \delta_{nm}$ hat (keine Summe über n). Denn zu ψ gehört die lineare Abbildung N, die jeden Basisvektor ν_n auf das λ_n-fache des Basisvektors u_n abbildet,

$$\psi = \sum_n \lambda_n \, u_n \otimes \nu_n \ , \quad 0 \leq \lambda_n \ , \quad \sum_n \lambda_n^2 = 1 \ , \quad \langle u_m | u_n \rangle = \langle \nu_m | \nu_n \rangle = \delta_{mn} \ . \quad (5.6)$$

Diese Darstellung eines normierten Vektors $\psi \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ist seine Schmidtzerlegung. Die Orthonormalbasen $u_1, u_2 \dots$ und $\nu_1, \nu_2 \dots$ dieser Zerlegung sind eindeutig bis auf unitäre Transformationen U_n und $V_n = U_n^*$ der Unterräume von $\mathcal{H}_1$ und $\mathcal{H}_2$ die zum gleichen Eigenwert $\lambda_n \neq 0$ von $N^\dagger N$ und $NN^\dagger$ gehören. Die Orthonormalbasis des Nullraumes von N und diejenige des Nullraumes von $N^\dagger$ sind eindeutig bis auf unitäre Transformationen U_0 und V_0, zwischen denen keine Beziehung bestehen muß.

Können die Komponenten $\psi_{i\alpha}$ als Produkt $a_i b_\alpha$ geschrieben werden, so hat die Matrix $\psi_{i\alpha}$ den Rang Eins und $\psi = (\sum_i \chi_i a_i) \otimes (\sum_\alpha \phi_\alpha b_\alpha)$ ist ein Produktzustand.

Zustände, deren Schmidtzerlegung aus mehreren Termen bestehen, nennt man verschränkte Zustände. Die Funktion

$$V(\psi) = -\sum_n \lambda_n^2 \ln \lambda_n^2 \quad (5.7)$$

ist ein Maß der Verschränkung, das nur bei Produktzuständen verschwindet und sonst positiv ist. Wie dieses Maß für Verschränkung auf Gemische so zu verallgemeinern ist, daß es zur Klärung weiterer Fragen brauchbar ist, ist Gegenstand der Forschung.

Alle Mehrteilchenzustände identischer Bosonen oder Fermionen, die wie zum Beispiel Slater-Determinanten (3.73) aus verschiedenen Einteilchenzuständen zusammengesetzt sind, sind verschränkt.

Sei der Operator A ein Meßapparat, der das erste Teilsystem vermißt, der also $\mathcal{H}_1$ auf $\mathcal{H}_1$ abbildet, und sei B ein Meßapparat des zweiten Teilsystems, dann wirkt ihr direktes Produkt $A \otimes B$ auf Produktzustände durch

$$(A \otimes B)\,(u \otimes \nu) = (Au) \otimes (B\nu) \quad (5.8)$$

und ist allgemeiner durch Linearität erklärt,

$$\big(A \otimes B\big)\Big(\sum_{i\,\alpha} \chi_i \otimes \phi_\alpha \, \psi_{i\alpha}\Big) = \sum_{i\,\alpha} (A\chi_i) \otimes (B\phi_\alpha)\, \psi_{i\alpha} \ . \quad (5.9)$$

Die Eigenzustände von $A \otimes B$ sind die Produkte der Eigenzustände Λ_i von A mit den Eigenzuständen χ_j von B. Der Eigenwert des Produktes ist das Produkt der Eigenwerte.

$$(A \otimes B)\,(\Lambda_i \otimes \chi_j) = (A\Lambda_i) \otimes (B\chi_j) = a_i\, b_j\, (\Lambda_i \otimes \chi_j) \quad (5.10)$$

Mißt man bei einem Produktzustand $\psi \otimes \phi$ in einer gemeinsamen Messung am ersten Teilchen mit A und am zweiten Teilchen mit B, so faktorisiert die Wahrscheinlichkeit $w(i, j, A \otimes B, \psi \otimes \phi)$ dafür, daß die Messung mit A den i-ten Meßwert feststellt und die Messung mit B den j-ten Meßwert. Denn die Wahrscheinlichkeitsamplitude faktorisiert,

$$w(i, j, A \otimes B, \psi \otimes \phi) = |\langle \Lambda_i | \psi \rangle \langle \chi_j | \phi \rangle|^2 = w(i, A, \psi)\, w(j, B, \phi)\ . \tag{5.11}$$

Dann kann man aus dem Ergebnis der Messung A nichts über die Messung B schließen, denn die bedingte Wahrscheinlichkeit

$$w_i(j) = \frac{w(i, j)}{\sum_k w(i, k)} \tag{5.12}$$

mit B den j-ten Meßwert festzustellen unter der Bedingung, daß die Messung mit A den i-ten Meßwert ergeben hat, hängt bei Produktmessungen an Produktzuständen nicht von dieser Bedingung ab,

$$w(i, j) = u(i)\, v(j) \ \Rightarrow \sum_k w(i, k) = u(i)\ ,\ w_i(j) = v(j)\ . \tag{5.13}$$

5.2 Addition von Drehimpulsen

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

$$\Lambda_{\uparrow\uparrow}\ ,\ \Lambda_{\uparrow\downarrow}\ ,\ \Lambda_{\downarrow\uparrow}\ ,\ \Lambda_{\downarrow\downarrow}\ . \tag{5.14}$$

Die Basis ist so gewählt, daß die Spinoperatoren für das erste und zweite Teilchen $\vec{S}_1 = (S_{1\,1}, S_{1\,2}, S_{1\,3})$ und $\vec{S}_2$ durch Multiplikation mit den Paulimatrizen $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ wirken,

$$\vec{S}_1 \Lambda_{ij} = \frac{\hbar}{2} \Lambda_{kj} \vec{\sigma}_{ki}\ ,\quad \vec{S}_2 \Lambda_{ij} = \frac{\hbar}{2} \Lambda_{ik} \vec{\sigma}_{kj}\ . \tag{5.15}$$

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

$$[S_{1\,a}, S_{2\,b}] = 0 \quad a, b \in \{1, 2, 3\} \tag{5.16}$$

Daher sind die Summen $S_a = S_{1\,a} + S_{2\,a}$ Komponenten von Drehimpulsoperatoren, die die Drehimpulsalgebra (2.50) erfüllen.

$$[S_a, S_b] = i\hbar \epsilon_{abc} S_c \tag{5.17}$$

Das Spektrum von $S_3 = S_{1\,3} + S_{2\,3}$ läßt sich unmittelbar ablesen

$$S_3 \Lambda_{\uparrow\uparrow} = \hbar \Lambda_{\uparrow\uparrow}\ ,\quad S_3 \Lambda_{\downarrow\uparrow} = 0\, \hbar \Lambda_{\downarrow\uparrow}\ ,\quad S_3 \Lambda_{\uparrow\downarrow} = 0\, \hbar \Lambda_{\uparrow\downarrow}\ ,\quad S_3 \Lambda_{\downarrow\downarrow} = -\hbar \Lambda_{\downarrow\downarrow}\ . \tag{5.18}$$

Demnach gehört $\Lambda_{\uparrow\uparrow}$ zu einem Drehimpulsmultiplett mit Gesamtspin $s = 1$, denn den Gesamtspin s kann man am höchsten S_3-Eigenwert ablesen (2.62). 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 $\sqrt{(1+1)(1-1+1)} = \sqrt{2}$ (2.51c) durch Anwenden des Leiteroperators S_- auf $\Lambda_{\uparrow\uparrow}$

$$S_-\Lambda_{\uparrow\uparrow} = (S_{1\,-} + S_{2\,-})\Lambda_{\uparrow\uparrow} = \sqrt{(\frac{1}{2}+\frac{1}{2})(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1)}(\Lambda_{\downarrow\uparrow}+\Lambda_{\uparrow\downarrow}) \tag{5.19}$$

$$\Lambda_{s=1,s_3=1} = \Lambda_{\uparrow\uparrow}\,, \quad \Lambda_{s=1,s_3=0} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Lambda_{\downarrow\uparrow}+\Lambda_{\uparrow\downarrow})\,, \quad \Lambda_{s=1,s_3=-1} = \Lambda_{\downarrow\downarrow}\ . \tag{5.20}$$

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

$$\Lambda_{s=0,s_3=0} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Lambda_{\downarrow\uparrow}-\Lambda_{\uparrow\downarrow})\ . \tag{5.21}$$

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.

5.3 Unabhängig zusammengesetzte Gemische

Gemische ρ von zusammengesetzten Systemen sind unabhängig zusammengesetzt, falls alle Wahrscheinlichkeiten $w((i,\alpha), A\otimes B, \rho)$ für Ergebnisse gemeinsamer Messungen mit $A \otimes B$ faktorisieren,

$$w((i,\alpha), A\otimes B, \rho) = w_1(i, A, \hat\rho)\, w_2(\alpha, B, \tilde\rho)\ . \tag{5.22}$$

Hierbei ist $w((i,\alpha), A\otimes B, \rho)$ die Wahrscheinlichkeit, daß A den i-ten Meßwert a_i feststellt und B dabei den α-ten Meßwert b_α anzeigt. $w_1(i, A, \hat\rho) = \sum_\alpha w((i,\alpha), A\otimes B, \rho)$ ist die Wahrscheinlichkeit, daß A den i-ten Meßwert anzeigt, egal was B ergibt. Umgekehrt ist $w_2(\alpha, B, \tilde\rho) = \sum_i w((i,\alpha), A\otimes B, \rho)$ die Wahrscheinlichkeit, daß B den α-ten Meßwert b_α anzeigt, egal was A feststellt.

Bei faktorisierenden Wahrscheinlichkeiten läßt sich aus dem Ergebnis von A nichts über den Ausgang der Messung B schließen (5.13). Anderenfalls, wenn ein Gemisch nicht unabhängig zusammengesetzt ist, nennen wir die Teilsysteme verschränkt.

Daß Systeme unabhängig zusammengesetzt sind, bedeutet mathematisch folgendes: Die Wahrscheinlichkeiten sind durch Hauptdiagonalelemente $\langle\Lambda|\rho\Lambda\rangle$ (1.42) gegeben. Daher muß (5.22) insbesondere für jeden Eigenzustand Λ eines Operators $A\otimes B$ gelten, also für jeden Produktzustand $u \otimes v$,

$$\sum_{ij\alpha\beta} u_i^* v_\alpha^* \, \rho_{i,\alpha\ j,\beta} \, u_j v_\beta = \big(\sum_{ij} u_i^* \hat{\rho}_{ij} u_j\big)\big(\sum_{\alpha\beta} v_\alpha^* \tilde{\rho}_{\alpha\beta} v_\beta\big) \ . \tag{5.23}$$

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

$$\rho_{\text{unabhängig}} = \hat{\rho} \otimes \tilde{\rho} \ , \quad \rho_{i,\alpha\ j,\beta} = \hat{\rho}_{ij} \, \tilde{\rho}_{\alpha\beta} \ . \tag{5.24}$$

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

Sind die Systeme nicht unabhängig zusammengesetzt, so sind Meßergebnisse am ersten und zweiten Teilsystem verschränkt. Im Extremfall kann man, wie bei einem Zweiteilchen-Gesamtspin-0-Zustand, aus dem Ergebnis einer Messung am ersten Teilsystem erschließen, was sich bei einer geeigneten Messung am zweiten Teilsystem ergibt.

Zu den überraschenden Eigenschaften verschränkter 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,

$$\begin{aligned} w_1(i, A, \psi) &= \sum_\alpha |\langle \chi_i \otimes \phi_\alpha | \psi \rangle|^2 \qquad (5.25) \\ &= \sum_{\alpha\, m,n} \lambda_m \lambda_n \, \langle \chi_i \otimes \phi_\alpha | u_m \otimes v_m \rangle \, \langle u_n \otimes v_n | \chi_i \otimes \phi_\alpha \rangle = \langle \chi_i | \hat{\rho} \chi_i \rangle \ , \end{aligned}$$

wobei χ_i die zu A gehörigen Eigenzustände seien und $\hat{\rho}$ die Dichtematrix

$$\hat{\rho} = \sum_{mn} \big(\sum_\alpha \langle v_n | \phi_\alpha \rangle \, \langle \phi_\alpha | v_m \rangle\big) \lambda_m \lambda_n \, |u_m\rangle \, \langle u_n| = \sum_m \lambda_m^2 \, |u_m\rangle \, \langle u_m| \ . \tag{5.26}$$

Diese Dichtematrix gehört nur dann zu einem reinen Zustand u des ersten Teilsystems, wenn alle Amplituden λ_m bis auf eine, zum Beispiel $\lambda_1 = 1$, verschwinden. Dann ist $\psi = u_1 \otimes v_1$ ein Produktzustand.

5.4 Quantenkopierer

Wenn man Zustände vervielfältigen könnte, dann könnte man Zustände, die zur Nachrichtenübertragung genutzt werden, abhören und auslesen und dem bestimmungsgemäßen Empfänger eine Kopie weiterleiten, an der sich das Abhören nicht feststellen ließe.

Ein einfaches Argument zeigt aber, daß man Zustände nicht vervielfältigen kann, daß man also nicht mit unitärer Zeitentwicklung aus einem Produktzustand $\psi \otimes \Phi \otimes \chi$ für alle ψ einen vervielfältigten Zustand

$$U(\psi \otimes \Phi \otimes \chi) = \psi \otimes \psi \otimes \chi' \tag{5.27}$$

herstellen kann. Hierbei stehe Φ und χ für die anfänglichen, normierten Zustände von Kopie und Kopiermaschine und χ' für irgendeinen, normierten Endzustand des Kopierers, der von ψ abhängen kann.

Wenn nämlich die Zeitentwicklung unitär ist, so erhält sie Skalarprodukte. Es gilt aber für verschiedene zu kopierende Zustände ψ und ψ'

$$\langle\psi|\psi'\rangle = \langle\psi \otimes \Phi \otimes \chi|\psi' \otimes \Phi \otimes \chi\rangle \neq \langle\psi \otimes \psi \otimes \chi'|\psi' \otimes \psi' \otimes \chi''\rangle = \langle\psi|\psi'\rangle^2 \langle\chi'|\chi''\rangle \ , \tag{5.28}$$

denn der Betrag von $\langle\psi|\psi'\rangle\,\langle\chi'|\chi''\rangle$ ist kleiner als Eins.

5.5 Bellsche Ungleichung

Die revolutionäre Erkenntnis der Quantenphysik ist, daß es auch bei ideal präparierten Teilchen immer Messungen gibt, für deren Ergebnisse man nur ihre Wahrscheinlichkeit angeben kann. Wir widerlegen hier die Unterstellung, die Unfähigkeit, die Einzelergebnisse aller Messungen vorherzusagen, beruhe nur auf unvollständiger Kenntnis der Ursachen. Dazu betrachten wir Polarisationsmessungen an Spin-$1/2$-Teilchen mal in der einen, mal in der anderen Richtung, also Messungen, die nicht gemeinsam, sondern nur alternativ erfolgen können.

Wenn man in Richtung $\vec{b}$, $\vec{b}^2 = 1$, den Spin eines einzelnen Spin-$1/2$-Teilchens mißt, das mit Spin in Richtung $\vec{a}$, $\vec{a}^2 = 1$, präpariert worden ist, dann tritt nach der Grundgleichung (1.1) und wegen (2.71) der Meßwert $\hbar/2$ mit Wahrscheinlichkeit

$$w(\vec{b}) = |\langle\uparrow_{\vec{b}}|\uparrow_{\vec{a}}\rangle|^2 = \left|\cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta'}{2} + \sin\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta'}{2}e^{i(\varphi-\varphi')}\right|^2 \tag{5.29}$$

auf. Dabei sind θ und φ die Kugelkoordinaten von $\vec{a} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$ und θ' und φ' die Kugelkoordinaten von $\vec{b} = (\sin\theta'\cos\varphi', \sin\theta'\sin\varphi', \cos\theta')$. Wegen

$$\begin{aligned}
&\cos^2\frac{\theta}{2}\cos^2\frac{\theta'}{2} + \sin^2\frac{\theta}{2}\sin^2\frac{\theta'}{2} + 2\cos(\varphi-\varphi')\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta'}{2}\cos\frac{\theta'}{2}\\
&= \frac{1}{4}\Big((1+\cos\theta)(1+\cos\theta') + (1-\cos\theta)(1-\cos\theta') + 2\cos(\varphi-\varphi')\sin\theta\sin\theta'\Big)\\
&= \frac{1}{2}\big(1 + \cos\theta\cos\theta' + \cos(\varphi-\varphi')\sin\theta\sin\theta'\big)
\end{aligned} \tag{5.30}$$

ist dies $(1+\cos\beta)/2$, wobei β den Winkel bezeichnet, den $\vec{a}$ mit $\vec{b}$ einschließt. Denn das Skalarprodukt $\vec{a}\cdot\vec{b} = \cos\beta$ beträgt

$$\begin{aligned}
\vec{a}\cdot\vec{b} &= \sin\theta\sin\theta'(\cos\varphi\cos\varphi' + \sin\varphi\sin\varphi') + \cos\theta\cos\theta'\\
&= \sin\theta\sin\theta'\cos(\varphi-\varphi') + \cos\theta\cos\theta' \ .
\end{aligned} \tag{5.31}$$

Also steht bei einem Spin-1/2-Teilchen, das mit Spin in Richtung $\vec{a}$ präpariert worden ist, der Spin bei Messung in Richtung $\vec{b}$ mit Wahrscheinlichkeit

$$w(\vec{b}) = \frac{1}{2}(1 + \vec{a}\cdot\vec{b}) = \frac{1}{2}(1 + \cos\beta) \tag{5.32}$$

nach oben. Mit der Restwahrscheinlichkeit $1 - w(\vec{b})$ steht der Spin in Gegenrichtung $-\vec{b}$

$$w(-\vec{b}) = 1 - w(\vec{b}) \ . \tag{5.33}$$

Zerfällt unter Bewahrung des Drehimpulses ein Teilchen ohne Spin isotrop, das heißt mit drehinvarianter Ortswellenfunktion, in jeweils ein Paar von Teilchen mit Spin $1/2$, so entsteht der Spin-0-Zustand (5.21)

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|\Lambda_{\uparrow\downarrow} - \Lambda_{\downarrow\uparrow}\rangle \ . \tag{5.34}$$

Die Wahrscheinlichkeit $w(\vec{a},\vec{b})$, daß bei diesem Teilchenpaar beim ersten Teilchen der Spin in Richtung $\vec{a}$ nach oben und beim zweiten Teilchen der Spin in Richtung $\vec{b}$ nach oben gemessen wird, beträgt

$$\begin{aligned}
w(\vec{a},\vec{b}) = \frac{1}{2}|\left\langle \Lambda_{\uparrow\vec{a}} \otimes \Lambda_{\uparrow\vec{b}}\middle|\Lambda_{\uparrow\downarrow} - \Lambda_{\downarrow\uparrow}\right\rangle|^2 &= \frac{1}{2}\left|\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta'}{2}e^{-i\varphi'} - \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta'}{2}e^{-i\varphi}\right|^2 \\
= \frac{1}{2}\Big(\cos^2\frac{\theta}{2}\sin^2\frac{\theta'}{2} + \sin^2\frac{\theta}{2}\cos^2\frac{\theta'}{2} &- 2\cos(\varphi-\varphi')\cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta'}{2}\sin\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta'}{2}\Big) \\
= \frac{1}{8}\Big((1+\cos\theta)(1-\cos\theta') + (1-\cos\theta)&(1+\cos\theta') - 2\cos(\varphi-\varphi')\sin\theta\sin\theta'\Big) \\
&= \frac{1}{4}\big(1 - \cos\theta\cos\theta' - \cos(\varphi-\varphi')\sin\theta\sin\theta'\big) \ .
\end{aligned} \tag{5.35}$$

Also steht bei diesem Gesamtspin-0-Zustand mit Wahrscheinlichkeit

$$w(\vec{a},\vec{b}) = \frac{1}{4}(1 - \vec{a}\cdot\vec{b}) = \frac{1}{4}\big(1 - \cos\beta\big) \tag{5.36}$$

der Spin des ersten Teilchens in Richtung $\vec{a}$ nach oben und der Spin des zweiten Teilchens in Richtung $\vec{b}$ nach oben.

Durch Zusammenfassen der beiden möglichen Fälle, daß am zweiten Teilchen der Spin in einer Richtung $\vec{b}$ nach oben oder unten steht, erhalten wir hieraus die Wahrscheinlichkeit

$$w_1(\vec{a}) = w(\vec{a},\vec{b}) + w(\vec{a},-\vec{b}) = \frac{1}{2} \tag{5.37}$$

dafür, daß beim ersten Teilchen der Spin in Richtung $\vec{a}$ nach oben steht. Sie ist genauso groß wie die Wahrscheinlichkeit dafür, daß er nach unten steht, und sie ist unabhängig von $\vec{a}$ und $\vec{b}$. Ebenso steht beim zweiten Teilchen der Spin in jeder Richtung mit gleicher Wahrscheinlichkeit $w_2(\vec{b}) = w_2(-\vec{b}) = 1/2$ nach oben oder unten.

Beschränkt man sich auf die Fälle, in denen der Spin des ersten Teilchens in Richtung $\vec{a}$ nach unten steht, so ergibt sich mit der bedingten Wahrscheinlichkeit

$$\frac{w(-\vec{a},\vec{b})}{w_1(-\vec{a})} = \frac{1}{2}\big(1 + \vec{a}\cdot\vec{b}\big) \tag{5.38}$$

der Wert $+\hbar/2$ bei Messung des Spins des zweiten Teilchens in Richtung $\vec{b}$. Dies ist dieselbe Wahrscheinlichkeit, wie sie bei (5.32) auftritt. In den Fällen, in denen die Messung des Spins in Richtung $\vec{a}$ am ersten Teilchen den Wert $-\hbar/2$ ergibt, ist also das zweite Teilchen wie bei (5.32) präpariert, also mit Spin in Richtung $\vec{a}$ nach oben.

Für diesen Sachverhalt gibt es die Sprechweise, daß die Messung des Spins des einen Teilchens augenblicklich das andere Teilchen des Paares, egal wie weit es entfernt sein mag, in den Zustand mit entgegengesetztem Spin versetze. Der Zustand des Paares „kollabiere“ oder werde reduziert, und das Ergebnis der Messung am ersten Teilchen werde auf das zweite Teilchen übertragen oder, beeindruckender, quantenteleportiert. Die Zustandsreduktion erfolge augenblicklich und daher mit Überlichtgeschwindigkeit.

Wer von diesen Behauptungen ungerührt bleibt, stellt einfach fest, daß die Messung an einem Teilchen nichts am anderen Teilchen bewirkt. Dort steht der Spin mit gleicher Wahrscheinlichkeit nach oben oder unten, egal in welche Richtung man mißt. Durch keine Messung kann man an einem Teilchen auch nur feststellen, ob am anderen Teilchen überhaupt gemessen wurde, geschweige denn, in welche Richtung und mit welchem Ergebnis.

Daß der Spin am zweiten Teilchen in allen Fällen in Richtung $\vec{a}$ nach oben steht, in denen er beim ersten Teilchen in dieser Richtung nach unten steht, kann man erst bestätigen, wenn man beim zweiten Teilchen weiß, in welchen Fällen der Spin des ersten Teilchens in Richtung $\vec{a}$ nach unten stand. Diese Information ist höchstens mit Lichtgeschwindigkeit zu bekommen.

Die offensichtliche Ursache für die Zusammenhänge der beiden Spinmessungen ist die gemeinsame Präparation beider Teilchen als Teilchenpaar. Sie gelingt nur, wenn beide Teilchen an demselben Ort sind. Da sich die Teilchen nicht schneller als Licht bewegen, wirkt sich die Präparation in späteren Messungen nicht schneller als Licht aus.

Wenn man wiederholt eine Münze wirft und jeweils an einen Empfänger einen Brief mit dem Bild der Oberseite und an einen zweiten einen Brief mit dem Bild der Unterseite schickt, dann erhält jeder Empfänger mit gleicher Wahrscheinlichkeit Bilder der Kopf- oder Zahlseite. Jeder Empfänger weiß augenblicklich, wenn er seinen Brief öffnet, welches Bild der andere erhalten hat. Bei Kenntnis des Ergebnisses kollabiert die Wahrscheinlichkeit zur bedingten Wahrscheinlichkeit, in diesem Beispiel zur Gewißheit.

Ebenso ersetzt Zustandsreduktion bei Auftreten eines Meßwertes den vorherigen Zustand durch den bedingten Zustand, der zur bedingten Wahrscheinlichkeit derjenigen Ereignisse gehört, in denen dieser Meßwert auftritt.

Vor Öffnen des Briefes ist der Empfänger unsicher, welches Bild er enthält, aber der Inhalt ist eigentlich nicht unsicher, sondern nur unbekannt. Der Inhalt des Briefes liegt fest, ob man ihn nun öffnet oder nicht. Bei der Wahrscheinlichkeitsverteilung (5.36) hingegen ist ausgeschlossen, daß die Ergebnisse der Spinmessungen in allen Richtungen in jedem Einzelfall vor der Messung feststehen und daß man das Ergebnis nur deshalb nicht vorher weiß, weil die jeweiligen Ursachen im einzelnen unbekannt sind.

Diese Unterstellung, daß die Meßergebnisse vorher festliegen, wir aber die Ursachen nicht genügend gut kennen, scheint unwiderlegbar, aber sie führt zu einer Ungleichung, deren Gültigkeit man messen kann. Die Meßergebnisse verletzen jedoch die Ungleichung und widerlegen damit die Unterstellung.

Die Ungleichung ergibt sich aus folgender Betrachtung. Wenn eine Spinmessung eine vorhandene Eigenschaft eines Teilchens abliest, dann hängt ihr Ergebnis bei Messungen an Paaren nicht davon ab, was wir am anderen Teilchen zu messen wählen. Zudem steht in einer Meßreihe fest, ob bei der i-ten Messung, $i = 1, 2, \dots, N$, der Spin des ersten Elektrons in Richtung $\vec{a}$ nach oben steht. Falls ja, werten wir das Ergebnis $a_{1\,i} = 1$, wenn nicht als $a_{1\,i} = -1$. Mit $b_{1\,i}$ bezeichnen wir das Ergebnis, das sich im Versuch Nummer i ergäbe, wenn wir den Spin des ersten Elektrons in Richtung $\vec{b}$ mäßen. Entsprechend bezeichnen wir mit $c_{2\,i}$ und $d_{2\,i}$ das Ergebnis im Versuch mit Nummer i, wenn wir den Spin des zweiten Elektrons in Richtung $\vec{c}$ oder $\vec{d}$ messen.

Weil die Ergebnisse $c_{2\,i}$ und $d_{2\,i}$ entweder entgegengesetzt oder gleich sind, verschwindet $a_{1\,i}(c_{2\,i} + d_{2\,i})$ genau dann, wenn $b_{1\,i}(c_{2\,i} - d_{2\,i})$ den Wert ± 2 hat und umgekehrt. Daher ist ihre Summe in keinem Fall größer als zwei [5]

$$a_{1\,i}c_{2\,i} + a_{1\,i}d_{2\,i} + b_{1\,i}c_{2\,i} - b_{1\,i}d_{2\,i} \leq 2 \ . \tag{5.39}$$

Der Mittelwert $\langle a_1 c_2 \rangle$ der Produkte $a_{1\,i}c_{2\,i}$ der Meßergebnisse in N Versuchen ist die Summe der einzelnen Produkte, geteilt durch N,

$$\langle a_1 c_2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} a_{1\,i} c_{2\,i} \ . \tag{5.40}$$

Entsprechend erhalten wir die Mittelwerte der Meßergebnisse $\langle a_1 d_2 \rangle$, $\langle b_1 c_2 \rangle$ und $\langle b_1 d_2 \rangle$. Summieren wir die Ungleichungen (5.39), und teilen wir durch N, so erhalten wir eine Bellsche Ungleichung [2] für Mittelwerte von Produkten der Meßwerte

$$\langle a_1 c_2 \rangle + \langle a_1 d_2 \rangle + \langle b_1 c_2 \rangle - \langle b_1 d_2 \rangle \leq 2 \ . \tag{5.41}$$

Den Mittelwert von $a_{1\,i}c_{2\,i}$ können wir auch ausrechnen, indem wir für jeden möglichen Wert, den dieses Produkt haben kann, nämlich $+1$ oder -1, die Häufigkeit N_+ und N_- zählen, mit der er auftritt. Dann ist $\sum_{i=1}^{N} a_{1\,i} c_{2\,i} = N_+ - N_-$ und

$$\langle a_1 c_2 \rangle = \frac{N_+ - N_-}{N} \ . \tag{5.42}$$

Es ist aber, wenn N genügend groß ist, die relative Häufigkeit N_+/N die Wahrscheinlichkeit dafür, daß $a_{1\,i}c_{2\,i}$ den Wert $+1$ hat und N_-/N die Wahrscheinlichkeit für den Wert -1. Die Wahrscheinlichkeit, mit der $a_{1\,i}c_{2\,i}$ den Wert $+1$ hat, ist $w(\vec{a}, \vec{c}) + w(-\vec{a}, -\vec{c}) = \frac{1}{2}(1 - \vec{a} \cdot \vec{c})$, mit Wahrscheinlichkeit $w(\vec{a}, -\vec{c}) + w(-\vec{a}, \vec{c}) = \frac{1}{2}(1 + \vec{a} \cdot \vec{c})$ hat das Produkt den Wert -1. Demnach gehört zur quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsverteilung (5.36) der Mittelwert

$$\langle a_1 c_2 \rangle = -\vec{a} \cdot \vec{c} \ . \tag{5.43}$$

Als Funktion der Richtungen $\vec{a}$ und $\vec{b}$ wird die Summe

$$\langle a_1 c_2\rangle + \langle a_1 d_2\rangle + \langle b_1 c_2\rangle - \langle b_1 d_2\rangle = -\vec{a}\cdot\vec{c} - \vec{a}\cdot\vec{d} - \vec{b}\cdot\vec{c} + \vec{b}\cdot\vec{d} \tag{5.44}$$

maximal, falls $\vec{a}$ in Gegenrichtung von $\vec{c}+\vec{d}$ zeigt und $\vec{b}$ in Gegenrichtung von $\vec{c}-\vec{d}$. Dann hat die Summe den Wert von $|\vec{c}+\vec{d}| + |\vec{c}-\vec{d}|$. Sie wird maximal, falls die Einheitsvektoren $\vec{c}$ und $\vec{d}$ wie in Abbildung 5.1 aufeinander senkrecht stehen, und verletzt mit ihrem Wert $2\sqrt{2}$ die Bellsche Ungleichung (5.41).

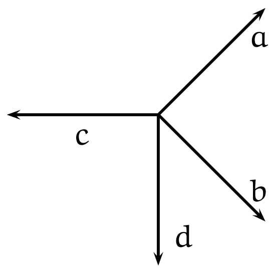


Abbildung 5.1: Richtungen der Spinmessungen

Zur Herleitung der Bellschen Ungleichung haben wir nur angenommen, daß in den Richtungen $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ und $\vec{d}$ für jede Messung Nummer i die Ergebnisse $a_{1\,i}, b_{1\,i}, c_{2\,i}$ und $d_{2\,i}$ feststehen und nicht davon abhängen, in welcher Richtung am anderen Elektron gemessen wird.

Tatsächlich kann man aber in jedem einzelnen Versuch an jedem Elektron nur in jeweils einer Richtung $\vec{a}$ oder $\vec{b}$ und $\vec{c}$ oder $\vec{d}$ messen. Man muß $a_{1\,i}$ und $b_{1\,j}$ oder $c_{2\,i}$ und $d_{2\,j}$ in verschiedenen Versuchen $i \neq j$ ermitteln.

Experimentell überprüft man mit Polarisationsfiltern die Bellschen Ungleichungen an Photonpaaren, statt an Elektronen. Denn Elektronenspins reagieren zu empfindlich auf Störungen durch andere, geladene Teilchen. Bei den Photonen entscheidet jeweils ein Zufallsgenerator, in welcher Richtung es gemessen wird [1]. Die Richtung wird erst so spät gewählt, daß sie auch mit lichtschnellen Signalen zum Zeitpunkt der Messung beim anderen Photon noch nicht bekannt sein kann.

Daß die gemessenen Polarisationswerte nicht den Bellschen Ungleichungen genügen, ist weltbilderschütternd. Messungen lesen nicht etwa vorhandene Eigenschaften ab, dann lägen die Ergebnisse aller Messungen fest und unterlägen den Bellschen Ungleichungen, sondern Messungen stellen die Ergebnisse erst fest, die vorher nicht feststanden.

Die Verletzung der Bellschen Ungleichung verbaut die gedankliche Ausflucht, jeder Meßwert stünde in jedem Einzelfall fest, nur die Ursache jedes Meßwertes sei unbekannt.

5.6 Mehrfache Messung und Zustandsreduktion

Durchläuft ein Teilchen einen Meßapparat, so bewirkt es eine Anzeige und ist anschließend, je nach angezeigtem Meßwert, in einem anderen Zustand. Durchdenkt man die Zeitentwicklung im Apparat, so muß man berücksichtigen, daß sich während der Messung die Anzeige ändert, daß es sich also bei den Zuständen, die sich während der Messung ändern, nicht nur um eine Abfolge von Teilchenzuständen, sondern um Paarzustände des Teilchens und des Apparates handelt, bei dem sich die Anzeige ändert.

Daher fassen wir das zu vermessende Teilchen mit dem Apparat A zu einem größeren System zusammen, das wir mit Apparaten B vermessen. Vor der Messung sei das Teilchen im Zustand ψ und die Anzeige des Apparats A im Zustand ϕ. Zusammen bilden sie den Paarzustand $\psi \otimes \phi$, in dem alle Eigenschaften des Teilchens unabhängig vom Apparat und alle Eigenschaften der Anzeige des Apparates unabhängig vom Teilchen sind.

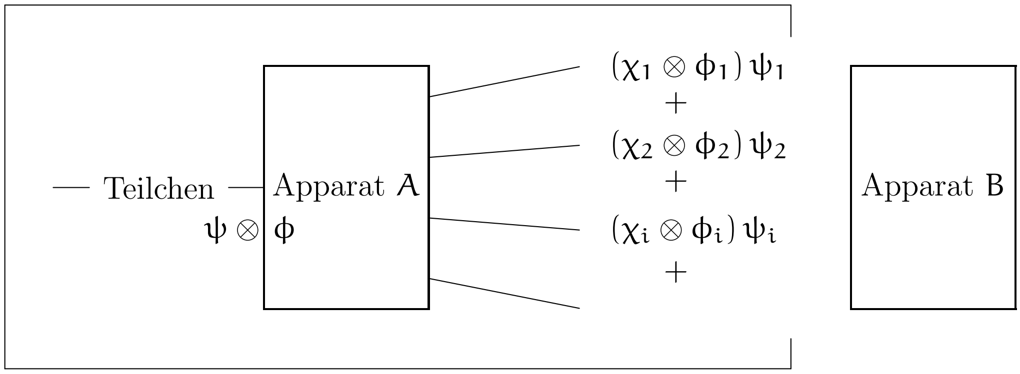


Abbildung 5.2: Mehrfache Messung

Durch unitäre Zeitentwicklung im Apparat entsteht hieraus am Ausgang ein Zustand $U(\psi \otimes \phi)$.

Ist anfänglich das Teilchen im Eigenzustand Λ_i des Meßapparates A, so zeigt im Zustand $U(\Lambda_i \otimes \phi)$ der Zeiger von A mit Sicherheit den i-ten Wert. Der Zeiger ist also im Eigenzustand ϕ_i des Apparates $\hat{A}$, der die Anzeige von A abliest. Das heißt (keine Summe über i)

$$U(\Lambda_i \otimes \phi) = \chi_i \otimes \phi_i \ . \tag{5.45}$$

Verschiedene Zustände ϕ_i und ϕ_j des Zeigers sind zueinander senkrecht, da sie sicher abgelesen werden können (1.5),

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta^i{}_j \ . \tag{5.46}$$

Der sich mit ϕ_i ergebende Teilchenzustand χ_i ist normiert, da U unitär ist und ϕ_i, Λ_i und ϕ normiert sind. Damit der Apparat A ein Meßapparat ist, ist nicht erforderlich, daß die χ_i zueinander senkrecht sind. Insbesondere braucht es sich nicht um eine nichtstörende (quantum non demolishion) Messung handeln, die aus jedem anfänglichen Eigenzustand Λ_i den Eigenzustand $\chi_i = \Lambda_i$ zur erneuten Messung präpariert.

Viele Meßapparate präparieren nicht Eigenzustände zur erneuten Messung. Beispielsweise zählen Photoschichten und Photomultiplier Photonen, die die Detektorfläche innerhalb einer Nachweisdauer durchströmen, indem sie sie vernichten.

Zerlegen wir einen allgemeineren Teilchenzustand $\psi = \sum_j \Lambda_j \, \psi_j$ in der Basis der Λ_j mit komplexen Komponenten $\psi_j = \langle \Lambda_j \,|\, \psi \rangle$, so erhalten wir aus (5.45), weil U linear ist,

$$U(\psi \otimes \phi) = U\big(\sum_j \Lambda_j \otimes \phi \, \psi_j\big) = \sum_j (\chi_j \otimes \phi_j)\, \psi_j \ . \tag{5.47}$$

Die Zeitentwicklung im Meßapparat verschränkt das Teilchen mit der Anzeige.

Falls die Zustände χ_i zueinander orthogonal sind, kann man durch Messen des Teilchens den Ablesewert von $\hat{A}$ sicher bestimmen. Dann sind die Teilchenzustände χ_i und die Zeigerzustände ϕ_i bis auf Wahl der Phasen eine Basis der Schmidtzerlegung (5.6) von $U(\psi \otimes \phi)$.

Wenn man im Zustand $U(\psi \otimes \phi)$, der den Apparat A durchlaufen hat, das Teilchen mit einem Apparat C mißt und dabei mit $\hat{A}$ die Anzeige abliest, so gehören zu diesem kombinierten Meßapparat $B = C \otimes \hat{A}$ Eigenzustände $\Gamma_k \otimes \phi_i$. Nach Grundgleichung (1.1) ergibt sich der k-te Meßwert von C und die Anzeige i des Meßapparates A mit der Wahrscheinlichkeit

$$W(k,i) = |\langle \Gamma_k \otimes \phi_i | U(\psi \otimes \phi)\rangle|^2 = |\langle \Gamma_k \otimes \phi_i | \sum_j \chi_j \otimes \phi_j \, \psi_j\rangle|^2 = |\langle \Gamma_k | \chi_i\rangle \, \psi_i|^2 \; . \quad (5.48)$$

Insbesondere zeigt die Anzeige von A mit der Wahrscheinlichkeit $|\psi_i|^2 = \sum_{k'} W(k',i)$ den i-ten Wert an.

Demnach ist für jede Messung C am Teilchen die *bedingte* Wahrscheinlichkeit $w_i(k)$, den k-ten Meßwert unter der Bedingung zu erhalten, daß A den i-ten Meßwert anzeigt,

$$w_i(k) = \frac{W(k,i)}{\sum_{k'} W(k',i)} = |\langle \Gamma_k | \chi_i\rangle|^2 = w(k, C, \chi_i) \; , \quad (5.49)$$

als hätte der Apparat den *bedingten* Zustand χ_i präpariert.

Der Übergang von ψ zu χ_i ist nicht eine unstetige *Zeit*entwicklung, die in Meßapparaten den Zustand reduziert oder kollabiert. Vielmehr ändert sich die Wahrscheinlichkeit W für Paarereignisse stetig mit der Zeit. Die bedingte Wahrscheinlichkeit w_i für den k-ten Wert in der zweiten Messung, falls die erste Messung den i-ten Wert ergibt, ist eine von W verschiedene Funktion w_i, die sich auch klassisch nicht durch stetige Zeitentwicklung aus W ergibt. Wer den Übergang zu bedingten Wahrscheinlichkeiten und bedingten Zuständen bei Kenntnis des ersten Meßergebnisses Kollaps der Wellenfunktion nennt, sollte auch vom Kollaps des Lottospielers reden, dessen bedingte Gewinnwahrscheinlichkeit sich unstetig mit jeder gezogenen Kugel ändert.

Der bedingte oder reduzierte Zustand χ_i ist einfach derjenige Zustand, der die bedingte Wahrscheinlichkeitsverteilung w_i ergibt. Da χ_i unabhängig von ψ ist, kann man durch keine Messung C an den Teilchen, die in der Messung A den nichtentarteten, i-ten Meßwert ergeben haben, den ursprünglichen Zustand ψ erschließen, aus dem χ_i präpariert worden ist.

Werden alle Ausgänge des Apparates A nach der Messung zu einem neuen Teilchenstrahl zusammengefaßt, egal was $\hat{A}$ abliest, so ist für jede anschließende Messung C am Teilchen die Wahrscheinlichkeit, den k-ten Meßwert zu erhalten, durch

$$\sum_i W(k,i) = \sum_i |\langle \Gamma_k | \chi_i\rangle \, \psi_i|^2 = \langle \Gamma_k \mid \rho \, \Gamma_k\rangle = w(k, C, \rho) \quad (5.50)$$

mit

$$\rho = \sum_i |\psi_i|^2 \, |\chi_i\rangle \, \langle \chi_i| \quad (5.51)$$

gegeben, als hätte der Meßapparat A aus einem reinen Teilchenzustand ψ das Gemisch ρ erzeugt. Die dazugehörige Entropie entsteht nicht durch die unitäre Zeitentwicklung, sondern durch unvollständige Messung und Verwerfen der Kenntnisse, die man über die Anzeige des Apparates A haben kann.

Für die Dekohärenz der Teilstrahlen $(\chi_i \otimes \phi_i)\, \psi_i$ ist nicht entscheidend, ob der Meßapparat mit $\hat{A}$ abgelesen wird, sondern daß die Zustände χ_i mit Zuständen ϕ_i verschränkt sind, die ein Ablesen ermöglichen.

6 Grundlagen der Thermodynamik

6.1 Entropie

Die Entropie einer Wahrscheinlichkeitsverteilung bestimmt bei wiederholten Messungen die Unkenntnis der genauen Reihenfolge der verschiedenen auftretenden Ergebnisse.

Sei $n = \sum n_i$ die Gesamtzahl der Versuche und $n_i > 0$ die Häufigkeit des i-ten Ergebnisses, $i = 1, \dots, N$, dann strebt n_i/n mit zunehmender Gesamtzahl n gegen die Wahrscheinlichkeit $p_i \neq 0$. Für diese Häufigkeiten gibt es

$$\frac{n!}{n_1!n_2!\dots n_N!} \tag{6.1}$$

verschiedene Reihenfolgen der Ergebnisse. Der Kehrwert dieser Anzahl ist die Sicherheit, mit der wir die einzelne Reihenfolge voraussagen können. Er strebt gemäß der Stirlingschen Formel

$$n! = \sqrt{2\pi n}\, n^n \,\mathrm{e}^{-n}\, f(n) \ , \quad \lim_{n\to\infty} f(n) = 1 \ , \tag{6.2}$$

für zunehmendes n bis auf einen Faktor, der gegen Eins geht, gegen

$$\sqrt{2\pi n}^{N-1} (\frac{n_1}{n})^{(n_1+\frac{1}{2})} \dots (\frac{n_N}{n})^{(n_N+\frac{1}{2})} \to \sqrt{2\pi}^{N-1} \sqrt{p_1 \dots p_N}\, \mathrm{e}^{-nS + (N-1)/2 \,\ln n} \ . \tag{6.3}$$

Der im Exponenten bei n auftretende Koeffizient S ist die Entropie der Wahrscheinlichkeitsverteilung $p : i \mapsto p_i$,(ein Funktional der Abbildung p)

$$S[p] = -\sum_i p_i \ln p_i \ . \tag{6.4}$$

Die Entropie ist nichtnegativ, da die Wahrscheinlichkeiten p_i zwischen Null und Eins variieren. Falls einige p_i verschwinden, sei $p_i \ln p_i$ stetig durch Null ergänzt.

Bei einem Gemisch ρ sind fehlende Polarisation oder Größen wie $1 - (\mathrm{tr}\,\rho^2)$ mögliche Maße dafür, wie sehr ρ von einem reinen Zustand abweicht. Aber ein günstigeres Maß für die Unkenntnis über den präparierten Zustand ist die Entropie des Gemisches.

Wir definieren die Entropie des Gemisches als Entropie der Wahrscheinlichkeitsverteilung, die durch die Eigenwerte ρ_i der Dichtematrix ρ gegeben ist – das ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung von Meßwerten solcher Apparate A mit nichtentarteten Meßwerten, deren Eigenzustände auch Eigenzustände der Dichtematrix ρ sind,[1] $w(i, A, \rho) = \langle \Upsilon_i \,|\, \rho \Upsilon_i \rangle = \rho_i$,

$$S[\rho] = -\sum_i \rho_i \ln \rho_i = -\,\mathrm{tr}\,\rho \ln \rho \ , \quad \rho \Upsilon_i = \rho_i \Upsilon_i \ . \tag{6.5}$$

[1]Das Zeichen Υ ist der griechische Buchstabe Ypsilon.

Die Entropie eines reinen Zustands verschwindet. Sie addiert sich beim unabhängigen Zusammensetzen zweier Systeme, ändert sich nicht während der Schrödingerschen Zeitentwicklung und nimmt beim Mischen und bei zufälligen Störungen zu. Mißt man das Gemisch ρ mit einem Apparat B, dessen Meßwerte nicht entartet sind und der nicht mit ρ vertauscht, so ist die Entropie ihrer Wahrscheinlichkeitsverteilung größer als die Entropie des Gemisches selbst. Diese Eigenschaften zeigen wir mit den folgenden Betrachtungen.

Ist ein Gemisch unabhängig aus zwei Teilen zusammengesetzt

$$\rho = \hat{\rho} \otimes \tilde{\rho} \ , \tag{6.6}$$

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

$$\rho_{ij} = \hat{\rho}_i \tilde{\rho}_j \ , \quad \sum_i \hat{\rho}_i = 1 \ , \quad \sum_j \tilde{\rho}_j = 1 \ . \tag{6.7}$$

Daher addiert sich die Entropie unabhängig zusammengesetzter Systeme,

$$\begin{aligned} S[\hat{\rho} \otimes \tilde{\rho}] &= -\sum_{ij} \hat{\rho}_i \tilde{\rho}_j \ln(\hat{\rho}_i \tilde{\rho}_j) = -\sum_{ij} (\hat{\rho}_i \tilde{\rho}_j \ln \hat{\rho}_i + \hat{\rho}_i \tilde{\rho}_j \ln \tilde{\rho}_j) \\ &= -(\sum_j \tilde{\rho}_j) \sum_i \hat{\rho}_i \ln \hat{\rho}_i - (\sum_i \hat{\rho}_i) \sum_j \tilde{\rho}_j \ln \tilde{\rho}_j = S[\hat{\rho}] + S[\tilde{\rho}] \ . \end{aligned} \tag{6.8}$$

Die Dichtematrix ändert sich im Laufe der Zeit (4.7), allerdings ändern sich nicht die Eigenwerte ρ_i durch die Schrödingersche Zeitentwicklung. Überträgt man in (2.84) angemessen die Notation, so folgt nämlich aus (2.84), (4.7) und der Eigenwertgleichung $\rho \Upsilon_i = \rho_i \Upsilon_i$, daß $\partial_t \rho_i(t) = 0$ ist, denn in Eigenzuständen eines hermiteschen Operators ρ verschwindet der Erwartungswert jedes Kommutators $[H, \rho]$.

$$i\hbar \partial_t \rho_i(t) = i\hbar \langle \Upsilon_i | \partial_t \rho(t) \Upsilon_i \rangle = \langle \Upsilon_i | (H\rho - \rho H) \Upsilon_i \rangle = \langle \Upsilon_i | (H\rho_i - \rho_i H) \Upsilon_i \rangle = 0 \tag{6.9}$$

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 $\tilde{\rho}$, $\hat{\rho} \neq \tilde{\rho}$, gemischt

$$\rho(\lambda) = \lambda \hat{\rho} + (1 - \lambda) \tilde{\rho} \quad \text{mit} \quad 0 < \lambda < 1 \ , \tag{6.10}$$

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

$$S[\rho(\lambda)] > \lambda S[\hat{\rho}] + (1 - \lambda) S[\tilde{\rho}] \ . \tag{6.11}$$

Bevor wir diese Behauptung zeigen, zwei Vorbemerkungen:

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

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 $\rho(\lambda')$,

$$\begin{aligned} \langle\Lambda|(\lambda\hat\rho + (1-\lambda)\tilde\rho)\Lambda\rangle = 0 \quad &\Rightarrow \quad \langle\Lambda|\hat\rho\Lambda\rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle\Lambda|\tilde\rho\Lambda\rangle = 0 \\ &\Rightarrow \quad \hat\rho\Lambda = 0 \quad \text{und} \quad \tilde\rho\Lambda = 0\ . \end{aligned} \tag{6.12}$$

Die erste Folgerung gilt, weil λ und $(1-\lambda)$ größer Null und Hauptdiagonalelemente von Dichtematrizen nichtnegativ (1.47) sind. Die zweite Folgerung ist richtig, weil Hauptdiagonalelemente $\langle\Lambda|\rho\Lambda\rangle$ einer Dichtematrix ρ nur verschwinden, wenn $\rho\Lambda = 0$ ist (1.48).

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

$$\operatorname{tr}\rho\ln\rho' < \operatorname{tr}\rho\ln\rho\ . \tag{6.13}$$

Werten wir nämlich die Spur in der Eigenbasis Υ_i von ρ aus, können wir uns auf die Eigenvektoren Υ_i mit nichtverschwindenden Eigenwerten beschränken. Schieben wir eine Zerlegung der Eins mit den Eigenzuständen Υ'_j von ρ' ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}\rho(\ln\rho' - \ln\rho) &= \sum_{ij} \left\langle\Upsilon_i\middle|\rho\Upsilon'_j\right\rangle \left\langle\Upsilon'_j\middle|(\ln\rho' - \ln\rho)\Upsilon_i\right\rangle \\ &= \sum_{ij} |\left\langle\Upsilon_i\middle|\Upsilon'_j\right\rangle|^2 \rho_i(\ln\rho'_j - \ln\rho_i) \\ &= \sum_{ij} |\left\langle\Upsilon_i\middle|\Upsilon'_j\right\rangle|^2 \rho_i \ln\frac{\rho'_j}{\rho_i}\ . \end{aligned} \tag{6.14}$$

Es gilt für positive x die Abschätzung

$$\ln x \leq (x-1)\ , \tag{6.15}$$

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

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}\rho\,(\ln\rho' - \ln\rho) &< \sum_{ij} |\left\langle\Upsilon_i\middle|\Upsilon'_j\right\rangle|^2\,\rho_i\,(\frac{\rho'_j}{\rho_i} - 1) = \sum_{ij} |\left\langle\Upsilon_i\middle|\Upsilon'_j\right\rangle|^2\,(\rho'_j - \rho_i) = \\ &= \sum_{ij} \left\langle\Upsilon'_j\middle|\rho'\Upsilon_i\right\rangle \left\langle\Upsilon_i\middle|\Upsilon'_j\right\rangle - \sum_{ij} \left\langle\Upsilon'_j\middle|\rho\Upsilon_i\right\rangle \left\langle\Upsilon_i\middle|\Upsilon'_j\right\rangle = \operatorname{tr}\rho' - \operatorname{tr}\rho = 0\ . \end{aligned} \tag{6.16}$$

Wenn $\hat\rho \neq \tilde\rho$ und $0 < \lambda < 1$ ist, so ist auch $\hat\rho \neq \rho(\lambda) \neq \tilde\rho$. 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

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}\hat\rho\ln(\lambda\hat\rho + (1-\lambda)\tilde\rho) &< \operatorname{tr}\hat\rho\ln\hat\rho\ , \\ \operatorname{tr}\tilde\rho\ln(\lambda\hat\rho + (1-\lambda)\tilde\rho) &< \operatorname{tr}\tilde\rho\ln\tilde\rho\ . \end{aligned} \tag{6.17}$$

Multiplizieren wir die erste Ungleichung mit λ, $0 < \lambda < 1$, und die zweite mit $(1-\lambda)$ und addieren wir, so erhalten wir

$$\mathrm{tr}(\lambda\hat{\rho} + (1-\lambda)\tilde{\rho}) \ln(\lambda\hat{\rho} + (1-\lambda)\tilde{\rho}) < \lambda \ \mathrm{tr}\, \hat{\rho} \ln \hat{\rho} + (1-\lambda) \ \mathrm{tr}\, \tilde{\rho} \ln \tilde{\rho} \ . \tag{6.18}$$

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

$$S[\rho(\lambda)] > \lambda S[\hat{\rho}] + (1-\lambda) S[\tilde{\rho}] \ . \tag{6.19}$$

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

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 (1.52).

$$\rho(\lambda) = \frac{\lambda_2 - \lambda}{\lambda_2 - \lambda_1} \rho(\lambda_1) + \frac{\lambda - \lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \rho(\lambda_2) \tag{6.20}$$

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

$$S[\rho(\lambda)] > \frac{\lambda_2 - \lambda}{\lambda_2 - \lambda_1} S[\rho(\lambda_1)] + \frac{\lambda - \lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} S[\rho(\lambda_2)] \tag{6.21}$$

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.

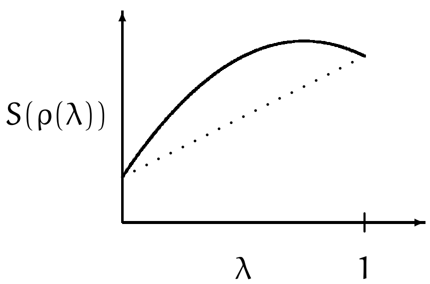


Abbildung 6.1: Entropie als konkave Funktion des Mischungsparameters

Mißt man das Gemisch ρ mit einem Apparat B, dessen Meßwerte nicht entartet sind und der nicht mit ρ vertauscht, so ist die Entropie der Wahrscheinlichkeitsverteilung dieser Werte größer als die Entropie des Gemisches selbst. Denn bezeichne Λ_i die Eigenzustände von B, so tritt der i-te Meßwert mit Wahrscheinlichkeit p_i auf,

$$p_i = \langle \Lambda_i | \rho \Lambda_i \rangle = \sum_n \rho_n P_{in} \ , \quad P_{in} = |\langle \Lambda_i | \Upsilon_n \rangle|^2 \ . \tag{6.22}$$

Das ist die Wahrscheinlichkeit P_{in}, daß der i-te Meßwert auftritt, falls Υ_n vermessen wird, mal der Wahrscheinlichkeit ρ_n, daß Υ_n im Gemisch $\rho = \sum_n \rho_n |\Upsilon_n\rangle \langle \Upsilon_n|$ vorliegt.

Die dabei auftretenden Koeffizienten P_{in} sind Matrixelemente einer doppelt stochastischen Matrix P, deren Zeilen und deren Spalten Wahrscheinlichkeitsverteilungen sind, das heißt, ihre Matrixelemente sind nicht negativ und sind für jedes n eine Wahrscheinlichkeitsverteilung über den Werten von i und für jedes i eine Wahrscheinlichkeitsverteilung über den Werten von n,

$$P_{in} \geq 0 \;, \quad \sum_i P_{in} = 1 \;, \quad \sum_n P_{in} = 1 \;. \tag{6.23}$$

Die Entropie der Wahrscheinlichkeitsverteilung der nichtentarteten Meßwerte von B, die sich beim Vermessen des Gemisches ρ ergibt, ist $S(B,\rho) = -\sum_i p_i \ln p_i$. Um zu zeigen, daß sie größer ist als die Entropie, wenn wir dasselbe Gemisch mit einem Apparat vermessen, dessen nichtentartete Eigenzustände die Eigenzustände von ρ sind, $S(A,\rho) = -\sum_n \rho_n \ln \rho_n$, untersuchen wir die Differenz, verwenden $p_i = \sum_n \rho_n P_{in}$,

$$S(B,\rho) - S(A,\rho) = -\sum_i p_i \ln p_i + \sum_n \rho_n \ln \rho_n = \sum_n \rho_n (-(\sum_i P_{in} \ln p_i) + \ln \rho_n)$$

schieben im zweiten Term $\sum_i P_{in} = 1$ ein,

$$= \sum_{in} \rho_n P_{in} (-\ln p_i + \ln \rho_n) = \sum_{in} \rho_n P_{in} \ln(\rho_n / p_i) \;,$$

und schätzen den Logarithmus nach unten durch $\ln x \geq 1 - 1/x$ ab (6.15),

$$\begin{aligned} &\geq \sum_{in} P_{in}(\rho_n - p_i) = \sum_n (\rho_n \sum_i P_{in}) - \sum_i (p_i \sum_n P_{in}) \\ &= \sum_n \rho_n - \sum_i p_i = 1 - 1 = 0 \;. \end{aligned} \tag{6.24}$$

Also ist, wie behauptet, die Entropie des Gemisches eine untere Schranke für die Entropie der Wahrscheinlichkeitsverteilung jeder nichtentarteten Messung, die am Gemisch vorgenommen wird.

6.2 Gleichgewicht

Wenn in Abbildung (1.1) das zu vermessende System vor der Messung wieder und wieder gestört worden ist, hängen die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Meßwerte $w(i, A, \rho(t))$ nicht mehr davon ab, wann gemessen wird. Nach der von-Neumann-Gleichung (4.7) vertauscht in solch einer Situation die Dichtematrix ρ mit dem Hamiltonoperator

$$i\hbar \partial_t \rho(t) = [H, \rho] = 0 \tag{6.25}$$

und beide haben gemeinsame Eigenzustände Λ_i

$$H\Lambda_i = E_i \Lambda_i \;, \quad \rho \Lambda_i = \rho_i \Lambda_i \;. \tag{6.26}$$

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 $\langle E\rangle$ hat – solch eine Umgebung nennt man ein Wärmebad – 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 $\sum_i \rho_i E_i = \langle E\rangle$ unterworfen sind. Wir berücksichtigen die Nebenbedingungen mit Lagrangeschen Multiplikatoren α und β und maximieren die Entropie einer Dichtematrix, deren Eigenzustände Energieeigenzustände[2] sind,

$$S = -\sum_j \rho_j \ln \rho_j + \alpha\,(1 - \sum_j \rho_j) + \beta\,(\langle E\rangle - \sum_j \rho_j E_j)\ . \tag{6.27}$$

Ableiten nach α und β ergibt die Nebenbedingungen und Ableiten nach ρ_i ($\partial_{\rho_i}\rho_j = \delta^i{}_j$) führt auf

$$0 = -(\ln \rho_i + 1) - \alpha - \beta E_i\ . \tag{6.28}$$

Demnach ist ρ_i durch die Boltzmannverteilung gegeben,

$$\rho_i(\beta) = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z(\beta)}\ . \tag{6.29}$$

Den Normierungsfaktor $Z(\beta)$ bestimmt man aus der Nebenbedingung $\sum_i \rho_i = 1$. Er ist die Zustandssumme,

$$Z(\beta) = \sum_i e^{-\beta E_i} = \sum_{E_n} g(E_n)\, e^{-\beta E_n}\ . \tag{6.30}$$

Dabei wird im ersten Ausdruck über alle Zustände summiert. Im zweiten Ausdruck wird über unterschiedliche Energien E_n summiert; die mehrfachen Beiträge von Zuständen gleicher Energie werden mit dem Entartungsgrad $g(E_n)$ zusammengefaßt.

Der Parameter β hat die Dimension einer inversen Energie. Sein Inverses nennt man die Temperatur T der Boltzmannverteilung,

$$\beta = \frac{1}{T}\,. \tag{6.31}$$

Denn setzt man ein abgeschlossenes System aus zwei Boltzmannverteilten Gemischen mit $\beta_1 \neq \beta_2$ zusammen, so hat es noch nicht maximale Entropie und ist noch nicht im thermischen Gleichgewicht. Hat sich dieses Gleichgewicht mit maximaler Entropie

[2] Anderenfalls wäre die Entropie des Gemisches kleiner als die Entropie der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Energiezustände und demnach nicht maximal. Denn die Entropie des Gemisches ist eine untere Schranke für die Entropie der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Meßwerte jeder anderen Messung am Gemisch.

nach einiger Zeit eingestellt, so liegt eine Boltzmannverteilung mit einer gemeinsamen Energieskala $T = 1/\beta$ vor.

Man kann die Temperatur aus der Nebenbedingung $\sum_i \rho_i E_i = \langle E \rangle$ als Funktion des Energieerwartungswertes $\langle E \rangle$ implizit bestimmen,

$$\langle E \rangle = \sum_i \rho_i E_i = \frac{1}{Z} \sum_i e^{-\beta E_i} E_i = -\frac{1}{Z} \partial_\beta \sum_i e^{-\beta E_i} = -\partial_\beta \ln Z(\beta) \ . \tag{6.32}$$

Im thermischen Gleichgewicht gibt die Ableitung des Logarithmus der Zustandssumme $Z(\beta)$ den Energieerwartungswert. Durch nochmaliges Ableiten nach der Temperatur, $\partial_T = -1/T^2\, \partial_\beta$, erhält man eine spezifische Wärme,

$$\frac{\partial}{\partial T} \langle E(T) \rangle = \beta^2 (\partial_\beta)^2 \ln Z(\beta) \ . \tag{6.33}$$

Die Funktion $Z(\beta)$ ist die Laplacetransformierte der Dichte $g(E)$ der Energieeigenzustände.

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

$$S = -\sum_i \rho_i \ln \rho_i = -\sum_i \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} (-\beta E_i - \ln Z) = \beta \langle E \rangle + \ln Z \tag{6.34}$$

Mit der freien Energie $F = \langle E \rangle - TS$ gilt daher

$$Z = e^{-\beta F} \ , \tag{6.35}$$

und die Boltzmannverteilung schreibt sich als

$$\rho_i = e^{-\beta (E_i - F)} \ . \tag{6.36}$$

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“ täuscht Verständnis nur vor.

Wenn kein Wärmebad den mittleren Energieinhalt des Systems ρ einstellt, fehlt in Gleichung (6.27) 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. Dann hat die Entropie den Wert

$$S = \ln N \ . \tag{6.37}$$

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 ist das Energiespektrum des harmonischen Oszillators

$$E_n = n\mathcal{E} \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{6.38}$$

Die zugehörige Zustandssumme ist eine geometrische Reihe,

$$Z_{\mathrm{Boson}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\mathcal{E}n} = \frac{1}{1-e^{-\beta\mathcal{E}}} \ . \tag{6.39}$$

Beim Zweizustandssystem hat E_n dieselbe Form, aber n durchläuft nur die Werte 0 und 1. Die Zustandssumme ist dann so einfach, wie sie nicht einfacher sein kann,

$$Z_{\mathrm{Fermion}} = 1 + e^{-\beta\mathcal{E}} \ . \tag{6.40}$$

Betrachten wir $\mathcal{E}$ als die Energie eines Teilchens, dann sind die Energien eines harmonischen Oszillators diejenigen von identischen Bosonen, deren Energien sich addieren und von denen $n = 0, 1, \ldots$ in demselben Zustand sein können. Das Zweizustandssystem gehört zu einem Fermion, das keinmal oder einmal, aber wegen des Pauli-Verbots nicht öfter, denselben Zustand besetzen darf.

Den Energieerwartungswert bestimmt man mit (6.32),

$$\langle E\rangle_{\mathrm{Boson}} = \frac{\mathcal{E}}{e^{\beta\mathcal{E}}-1} \ , \quad \langle E\rangle_{\mathrm{Fermion}} = \frac{\mathcal{E}}{e^{\beta\mathcal{E}}+1} \ . \tag{6.41}$$

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.

$$E_{i,\alpha} = E_1(i) + E_2(\alpha) \tag{6.42}$$

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

$$Z = \sum_{i,\alpha} e^{-\beta(E_1(i)+E_2(\alpha))} = \sum_i e^{-\beta E_1(i)} \sum_\alpha e^{-\beta E_2(\alpha)} = Z_1 Z_2 \ , \tag{6.43}$$

und die Energieerwartungswerte addieren sich.

$$\langle E\rangle = \langle E_1\rangle + \langle E_2\rangle \tag{6.44}$$

In einigen Systemen, zum Beispiel beim Wasserstoffatom oder beim freien Teilchen, divergiert die Zustandssumme. Solch ein System, das heißt die Menge seiner Zustände, muß man durch Randbedingungen auf einen Kasten beschränken: man kann kein unendlich ausgedehntes System mit einem Wärmebad ins thermische Gleichgewicht bringen.

7 Zerfall eines instabilen Teilchens

7.1 Lorentzresonanz

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

$$H\Lambda_{E,p} = E\Lambda_{E,p} \quad \langle\Lambda_{E,p}|\Lambda_{E',p'}\rangle = \delta(E-E')\delta(p-p') \ . \tag{7.1}$$

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

$$\Psi(t) = \int \mathrm{d}E\mathrm{d}p\, \Lambda_{E,p}\, \psi(E,p)\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Et} , \quad \psi(E,p) = \langle\Lambda_{E,p}|\Psi(0)\rangle \ . \tag{7.2}$$

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

$$w(t) = |a(t)|^2 , \tag{7.3}$$

$$a(t) = \langle\Psi(0)|\Psi(t)\rangle = \int \mathrm{d}E\, |F(E)|^2\, \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Et} , \tag{7.4}$$

wobei

$$|F(E)|^2 = \int \mathrm{d}p\, |\, \langle\Lambda_{E,p}|\Psi(0)\rangle\, |^2 \tag{7.5}$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte ist, bei einer Energiemessung den Wert E zu erhalten.

Diese Wahrscheinlichkeit $w(t)$, das anfängliche Teilchen noch vorzufinden, nimmt mit der Zeit t exponentiell ab, wenn es sich bei dem Zustand um eine Lorentzresonanz

$$F_{\mathrm{Lorentz}}(E) = \sqrt{\frac{\Gamma}{2\pi}}\frac{1}{(E-E_0)+i\frac{\Gamma}{2}} , \quad |F_{\mathrm{Lorentz}}(E)|^2 = \frac{1}{2\pi}\frac{\Gamma}{(E-E_0)^2+\frac{\Gamma^2}{4}} , \tag{7.6}$$

handelt. Hierbei ist E_0 die Resonanzenergie und $\Gamma \geq 0$ die Breite der Resonanzkurve.

Allerdings sind die Resonanzenergie und Breite einer Lorentzresonanz nicht als Energieerwartungswert $\langle H\rangle$ und Energieunschärfe ΔH definiert. Diese Größen divergieren, weil die Funktion $F(E)$ nicht schnell genug abfällt (vergleiche Abschnitt (2.2)). Es erfüllt $\Psi(t) = \exp(-iHt/\hbar)\Psi(0)$ die integrierte Schrödingergleichung, aber $\Psi(t)$ ist zu keinem Zeitpunkt differenzierbar, $\|H\Psi(t)\|$ divergiert.

Man kann die Amplitude

$$a_{\text{Lorentz}}(t) = \frac{\Gamma}{2\pi}\int dE\,\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}{(E-E_0)^2+\frac{\Gamma^2}{4}} \tag{7.7}$$

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

$$a_{\text{Lorentz}}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}e^{-\frac{|\Gamma t|}{2\hbar}}\ . \tag{7.8}$$

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

$$w_{\text{Lorentz}}(t) = e^{-t/\tau} \quad \text{für} \quad t > 0 \tag{7.9}$$

Die Lebensdauer ist die inverse Breite, $\tau = \hbar/\Gamma$, was als Unschärferelation

$$\Delta t \Delta E \geq \hbar/2 \tag{7.10}$$

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 Zerfallsrate des exponentiell zerfallenden Zustandes

$$\Gamma = -\hbar\frac{1}{w(t)}\frac{d}{dt}w(t)\ . \tag{7.11}$$

Der Gleichung (7.4) 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 (7.7) sieht. Die Zerfallsrate ist $|\Gamma|$.

7.2 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 $E < E_{\text{min}}$), 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

$$\frac{d}{dt} w(t)_{|_{t=0}} = 0 \tag{7.12}$$

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

$$a(t + t') = \langle \Psi(0) | \Psi(t + t') \rangle = \left\langle \Psi(0) \middle| e^{-\frac{i}{\hbar} H t} e^{-\frac{i}{\hbar} H t'} \Psi(0) \right\rangle \ . \tag{7.13}$$

Schiebt man zwischen die e-Funktionen eine Zerlegung der Eins[1]

$$\mathbb{1} = |\Psi(0)\rangle \langle \Psi(0)| + \sum_n |\Upsilon_n\rangle \langle \Upsilon_n| \ , \tag{7.14}$$

wobei die Zustände Υ_n den Anfangszustand $\Psi(0)$ zu einer Orthonormalbasis ergänzen und für die Zerfallsprodukte stehen, so sieht man

$$a(t + t') = a(t) a(t') + \sum_n \left\langle \Psi(0) \middle| e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Upsilon_n \right\rangle \left\langle \Upsilon_n \middle| e^{-\frac{i}{\hbar} H t'} \Psi(0) \right\rangle \ . \tag{7.15}$$

Der letzte Term ist die Amplitude für Zerfall und Wiedererzeugung des Anfangszustandes. Verschwände dieser letzte Term, so ergäbe sich die Relation $a(t + t') = a(t)a(t')$ und daraus exponentieller Zerfall. Da die Zerfallsprodukte den Ort des Geschehens verlassen, wobei 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 (5.6)).

Akzeptieren wir aber (7.2) 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

$$\tilde{a}(E) = \int \frac{dt}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} E t} a(t) \tag{7.16}$$

[1]Das Zeichen Υ ist der griechische Buchstabe Ypsilon.

eine analytische Funktion komplexer Energien E im Streifen $|\Im(E)| < \hbar/\tau$, die zudem für reelle Energien $E = E^* < E_{\text{min}}$ 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.

7.3 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. Aber ein Hamiltonoperator, der die Zeitentwicklung eines zerfallenden Zustandes vollständig beschreibt, muß 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, beispielsweise einem angeregten Wasserstoffatom mit $n \geq 2$, und von dazu orthogonalen, kontinuumsnormierten Basiszuständen $\Lambda_{E,p}$ mit $E \geq E_{\text{min}}$ aufgespannt wird

$$\langle\Upsilon|\Upsilon\rangle = 1\,, \quad \langle\Upsilon|\Lambda_{E,p}\rangle = 0\,, \quad \langle\Lambda_{E,p}|\Lambda_{E',p'}\rangle = \delta(E - E')\delta(p - p')\;. \tag{7.17}$$

Bei den Kontinuumszuständen denke man an die Zweiteilchenzustände des abgeregten Atoms und eines Photons. Diese Paarzustände gibt es, da die möglichen Energien von Photonen kontinuierlich sind, mit einem Kontinuum möglicher Energien, unter anderem mit der Energie des angeregten Atoms.

Die Basiszustände seien der Zerlegung des Hamiltonoperators angepaßt,

$$H = H_0 + H_{\text{int}}\;. \tag{7.18}$$

Der Zustand Υ sei ein normierter H_0-Eigenzustand mit einer Energie $E_0 > E_{\text{min}}$. Der Anteil H_{int} bewirke eine Wechselwirkung (int=Interaction) mit den Zuständen $\Lambda_{E,p}$, die mit einem Entartungsindex p als verallgemeinerte Eigenzustände zum kontinuierlichen Spektrum von H_0 gehören

$$H_0\Upsilon = E_0\Upsilon\,, \quad H_0\Lambda_{E,p} = E\,\Lambda_{E,p}\,, \quad E \geq E_{\text{min}}. \tag{7.19}$$

Die Energie E der Paarzustände von Atom und Photon ist kontinuierlich, weil die denkbaren Energien von Photonen, $E = \hbar\omega = c|\vec{p}|$, kontinuierlich sind. Die Zweiteilchenzustände $\Lambda_{E,p}$ von Atom und Photon sind energieentartet, denn das Photon kann in alle möglichen Richtungen auslaufen.

Wir betrachten die Amplitude

$$\left\langle \Lambda_{E,p} \middle| e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Upsilon \right\rangle \tag{7.20}$$

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 $e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ in eine Taylorreihe in tH_{int}. Die Koeffizienten der Reihe entnehmen wir durch wiederholtes Differenzieren der Relation

$$\partial_\lambda e^{A(\lambda)} = \int_0^1 dz\, e^{zA(\lambda)}\, \partial_\lambda A\, e^{(1-z)A(\lambda)}\ . \tag{7.21}$$

Diese Relation beweist man durch Entwickeln beider Seiten (vergleiche auch (A.48))

$$\sum_n \frac{1}{n!}\sum_{l=0}^{n-1} A^{n-l-1}(\partial_\lambda A)A^l = \sum_k \frac{1}{k!}\sum_l \frac{1}{l!}\int dz\, z^k\,(1-z)^l\, A^k\,(\partial_\lambda A)\, A^l \tag{7.22}$$

mit der kombinatorischen Formel

$$\int_0^1 dz\, z^k\,(1-z)^l = \frac{k!\,l!}{(k+l+1)!}\ . \tag{7.23}$$

Entwickeln wir mit (7.21) den Zeitentwicklungsoperator $e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ nach $H_{\text{int}}t$, so verschwindet die Übergangsamplitude in niedrigster Ordnung und ist bis auf Terme höherer Ordnung gegeben durch

$$\left\langle \Lambda_{E,p} \middle| e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Upsilon \right\rangle = -\frac{i}{\hbar}t\,\langle \Lambda_{E,p}|H_{\text{int}}\Upsilon\rangle \int_0^1 dz\, e^{-\frac{i}{\hbar}ztE} e^{-\frac{i}{\hbar}(1-z)tE_0} + \ldots\ . \tag{7.24}$$

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

$$\left\langle \Lambda_{E,p} \middle| e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Upsilon \right\rangle = \langle \Lambda_{E,p}|H_{\text{int}}\Upsilon\rangle\, \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}Et} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}}{E-E_0} + \ldots\ . \tag{7.25}$$

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

$$w(\Delta,t) = \int_\Delta dE dp\, |\langle \Lambda_{E,p}|H_{\text{int}}\Upsilon\rangle|^2\, \frac{\sin^2\left(\frac{t}{\hbar}\frac{(E-E_0)}{2}\right)}{\left(\frac{E-E_0}{2}\right)^2} \tag{7.26}$$

gegeben. Wegen (A.8) gilt für genügend große Zeiten t etwa

$$\frac{w(\Delta,t)}{t} = \frac{2\pi}{\hbar}\int dE dp\, |\langle \Lambda_{E,p}|H_{\text{int}}\Upsilon\rangle|^2 \delta(E-E_0)\ . \tag{7.27}$$

Allerdings darf nicht der Grenzwert $t \to \infty$ 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 (A.8) 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.

$$\Gamma_{\text{Goldene Regel}} = 2\pi \int dEdp \, |\langle \Lambda_{E,p} \, | \, H_{\text{int}} \Upsilon \rangle|^2 \, \delta(E - E_0) \tag{7.28}$$

Die Zerfallsrate setzt sich additiv aus partiellen Zerfallsraten $d\Gamma$ von verschiedenen Prozessen zusammen

$$d\Gamma = 2\pi \, \delta(E - E_0) \, |\langle \Lambda_{E,p} \, | H_{\text{int}} \Upsilon \rangle|^2 \, dEdp \; . \tag{7.29}$$

Bei dieser Standardherleitung der Goldenen Regel ist die Zeit t genügend groß, denn kein quantenmechanisches System kann für kleine Zeiten exponentiell zerfallen (siehe Abschnitt (7.2)). 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.

7.4 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 $\psi_0 = \langle \Upsilon | \Psi \rangle$ und einer Wellenfunktion $\psi(E,p) = \langle \Lambda_{E,p} | \Psi \rangle$ in der Basis (7.17) als Linearkombination

$$\Psi = \Upsilon \, \psi_0 + \int dEdp \, \Lambda_{E,p} \, \psi(E,p) \, , \quad \psi(E,p) = 0 \text{ für } E < E_{\min} \; . \tag{7.30}$$

Die Wahrscheinlichkeit $w_0(\Delta, \Psi)$, bei einer Messung von Ψ die zu H_0 gehörende Energie im offenen Intervall Δ zu finden, beträgt

$$w_0(\Delta, \Psi) = \begin{cases} \int_\Delta dEdp \, |\psi(E,p)|^2 & \text{falls} \quad E_0 \notin \Delta \\ |\psi_0|^2 + \int_\Delta dEdp \, |\psi(E,p)|^2 & \text{falls} \quad E_0 \in \Delta \end{cases} \; . \tag{7.31}$$

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

$$H_{\text{int}} \Upsilon = \int dEdp \, \Lambda_{E,p} \, \nu(E,p) \, , \quad H_{\text{int}} \Lambda_{E,p} = \nu^*(E,p) \Upsilon \, , \tag{7.32}$$

$$\nu(E,p) = \langle \Lambda_{E,p} | H_{\text{int}} \Upsilon \rangle \ . \tag{7.33}$$

Die Matrixelemente $\langle \Upsilon | H_{\text{int}} \Upsilon \rangle$ und $\langle \Lambda_{E',p'} | H_{\text{int}} \Lambda_{E,p} \rangle$ verschwinden in unserer Modellrechnung. Dies ist keine wesentliche Einschränkung, wir können uns solch einen Teil der Wechselwirkung in H_0 absorbiert vorstellen. Ebenso verschwindet $\nu(E,p) = \langle \Lambda_{E,p} | H_{\text{int}} \Upsilon \rangle$ für $E < E_{\min}$.

Der Operator H_{int} ist auf Υ nur definiert, falls $\| H_{\text{int}} \Upsilon \| < \infty$ ist.

$$\int dE dp\, |\nu(E,p)|^2 < \infty \tag{7.34}$$

Wie klein die Amplitude $\nu(E,p)$ 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

$$\psi(E,p) = -\frac{\nu(E,p)}{E - E_1} \psi_0 \tag{7.35}$$

und die Energie E_1 durch die gap-Gleichung (Energielückengleichung)

$$E_1 - E_0 = -\int_{E_{\min}}^{\infty} dE dp\, \frac{|\nu(E,p)|^2}{E - E_1} \ . \tag{7.36}$$

Nur wenn $\int dp\, |\nu(E_1,p)|^2$ verschwindet, ist $\psi(E,p)$ eine quadratintegrable 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 (7.36) hat für $E_1 < E_{\min}$ genau eine Lösung, wenn

$$\lim_{\epsilon \to 0+} \int_{E_{\min}}^{\infty} dE dp\, \frac{|\nu(E,p)|^2}{E - E_{\min} + \epsilon} \geq E_0 - E_{\min} \tag{7.37}$$

ist. Es ist nämlich die linke Seite von (7.36) 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 (7.36) 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

$$a(t) = \left\langle \Upsilon \middle| e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Upsilon \right\rangle \ . \tag{7.38}$$

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 gegen den Uhrzeigersinn umläuft.

$$e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} dz\, e^{-\frac{i}{\hbar} t z} \frac{1}{z - H} \tag{7.39}$$

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

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2\pi i}\sum_n \oint_\Gamma dz\, e^{-\frac{i}{\hbar}zt}\frac{1}{z-H}\,\Lambda_n\,\psi_n = \\
= \; &\frac{1}{2\pi i}\sum_n \oint_\Gamma dz\, e^{-\frac{i}{\hbar}zt}\frac{1}{z-E_n}\Lambda_n\,\psi_n = \sum_n \Lambda_n\,\psi_n\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}
\end{aligned}$$

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 invertierbar ist und $|A^{-1}V| < 1$ genügend klein ist,

$$(A-V)^{-1} = (A(\mathbb{1}-A^{-1}V))^{-1} = (\mathbb{1}-A^{-1}V)^{-1}A^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty}(A^{-1}V)^n A^{-1}\ . \quad (7.40)$$

Wir schreiben daher

$$\frac{1}{z-H} = \frac{1}{z-H_0-H_{\text{int}}} = \sum_{n=0}^{\infty}\Big(\frac{1}{z-H_0}H_{\text{int}}\Big)^n\frac{1}{z-H_0}\ . \quad (7.41)$$

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

$$|V(E)|^2 = \int dp\, |\nu(E,p)|^2 \quad (7.42)$$

gilt

$$\frac{1}{z-H_0}H_{\text{int}}\Upsilon = \int dE dp\, \Lambda_{E,p}\,\frac{\nu(E,p)}{z-E} \quad (7.43a)$$

$$\Big(\frac{1}{z-H_0}H_{\text{int}}\Big)^2\Upsilon = \frac{1}{z-E_0}\int dE\,\frac{|V(E)|^2}{z-E}\Upsilon\ . \quad (7.43b)$$

Zum Matrixelement $\langle\Upsilon|(z-H)^{-1}\Upsilon\rangle$ tragen demnach nur die geraden Potenzen von $(z-H_0)^{-1}H_{\text{int}}$ bei.

$$\Big\langle\Upsilon\Big|\,\frac{1}{z-H}\,\Upsilon\Big\rangle = \sum_n\Big(\frac{1}{z-E_0}\int dE\frac{|V(E)|^2}{z-E}\Big)^n\frac{1}{z-E_0} = \Big(z-E_0-\int dE\,\frac{|V(E)|^2}{z-E}\Big)^{-1} \quad (7.44)$$

Für $a(t)$ folgt dann wegen (7.38) und (7.39)

$$a(t) = \frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma dz\, e^{-\frac{i}{\hbar}zt}\,\frac{1}{z-E_0+\int dE\,\frac{|V(E)|^2}{E-z}}\ . \quad (7.45)$$

Wir wählen den Integrationsweg Γ gegen den Uhrzeigersinn um das Spektrum so, daß wir mit festem Imaginärteil $\epsilon > 0$ die Punkte $z = x + i\epsilon$ von $x = \infty$ zu $x = -\infty$

durchlaufen und danach die Punkte $z = x - i\epsilon$ von $x = -\infty$ bis $x = \infty$. Dann ist das komplexe Wegintegral die Differenz zweier Integrale über die reelle Achse.

Das Integral hängt nicht von ϵ ab. Wir werten es im Grenzfall $\epsilon \to 0+$ aus.

$$a(t) = \lim_{\epsilon \to 0+} \frac{i}{2\pi} \int_{E_{\min}}^{\infty} dx \Big(e^{-\frac{i}{\hbar} t(x+i\epsilon)} \frac{1}{x + i\epsilon - E_0 + \int dE \frac{|V(E)|^2}{E - x - i\epsilon}} - (\epsilon \to -\epsilon) \Big) \tag{7.46}$$

Wie in Anhang A.1 gezeigt, hat der Nenner

$$f(x) = x + i\epsilon - E_0 + \int dE \frac{|V(E)|^2}{E - x - i\epsilon} \tag{7.47}$$

für $\epsilon \to 0+$ den Grenzwert

$$f(x) = x - E_0 + \fint dE' \frac{|V(E' + x)|^2}{E'} + i\pi |V(x)|^2 \ , \tag{7.48}$$

wobei $\fint$ das Hauptwertintegral bezeichnet.

Falls $V(x)$ genügend klein ist, so daß kein gebundener Zustand existiert, der die gap-Gleichung (7.36) löst, so verschwindet der Nenner f nirgends.

Der zweite Beitrag zu $a(t)$, den man durch die Ersetzung von ϵ durch $-\epsilon$ erhält, ergibt den konjugiert komplexen Nenner f^*. Daher ist der Integrand von der Form

$$e^{-\frac{i}{\hbar} tx} \big(\frac{1}{f} - \frac{1}{f^*} \big) = e^{-\frac{i}{\hbar} tx} \big(\frac{f^* - f}{f f^*} \big) \tag{7.49}$$

und $a(t)$ ist

$$a(t) = \int dE \, e^{-\frac{i}{\hbar} Et} |F(E)|^2 \tag{7.50}$$

$$F(E) = \frac{V(E)}{E - E_0 + \fint dE' \frac{|V(E'+E)|^2}{E'} + i\pi |V(E)|^2} \ . \tag{7.51}$$

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 (7.6) 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

$$\Re f(E) = E - E_0 + \fint dE' \frac{|V(E' + E)|^2}{E'} \tag{7.52}$$

außer in einer kleinen Umgebung der Nullstelle $\hat{E}$ von $\Re f(E)$. 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 $\langle H \rangle$ und ΔH, allerdings hängen diese Größen vom Verhalten von $V(E)$ für $E \neq \hat{E}$ ab und brauchen nicht mit der Resonanzenergie und der Breite übereinstimmen.

Wenn sich in der Umgebung der Nullstelle von $\Re f(E)$ der Imaginärteil des Nenners von $F(E)$ nicht stark verändert, können wir ihn dort durch $\pi|V(\hat{E})|^2$ nähern und erhalten ungefähr

$$F(E) \approx \frac{V(\hat{E})}{(E-\hat{E})(1+\partial_{\hat{E}} \fint dE' \frac{|V(E'+\hat{E})|^2}{E'}) + i\pi|V(\hat{E})|^2} \tag{7.53}$$

mit der Resonanzenergie $\hat{E}$, die durch die Energielückengleichung $\Re f(\hat{E}) = 0$ implizit definiert ist, und der Breite

$$\Gamma = \frac{2\pi \int dp \, |\nu(\hat{E}, p)|^2}{1 + \partial_{\hat{E}} \fint dE' dp \frac{|\nu(E'+\hat{E}, p)|^2}{E'}} \; . \tag{7.54}$$

In niedrigster Ordnung ist dies die Goldene Regel.

$$\Gamma_{\text{Goldene Regel}} = 2\pi \int dE dp \, \delta(E - \hat{E}) \, | \, \langle \Lambda_{E,p} \, | \, H_{\text{int}} \Upsilon \rangle \, |^2 \tag{7.55}$$

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 (7.51), 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 $\langle \Lambda_{E,p} \, | \, H_{\text{int}} \Upsilon \rangle$ 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 (7.53) 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 (7.51) der Nenner $f(E_1) \approx (E_1 - E_0)$ 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.

7.5 Allgemeingültigkeit

Erstaunlicherweise haben wir in (7.50, 7.51) 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

$$P = |\Upsilon\rangle \, \langle\Upsilon| \; , \; P^2 = P \, , \; \mathbb{1} = P + (\mathbb{1} - P) \, , \tag{7.56}$$

werde zur Definition des ungestörten Hamiltonoperators

$$H_0 = PHP + (\mathbb{1} - P)H(\mathbb{1} - P) \tag{7.57}$$

verwendet. Der Zustand $\Upsilon = P\Upsilon$ ist ein normierter Eigenzustand zu H_0

$$H_0\Upsilon = PHP\Upsilon = \Upsilon \langle \Upsilon | H\Upsilon \rangle = E_0\Upsilon \tag{7.58}$$

mit Eigenwert $E_0 = \langle \Upsilon | H\Upsilon \rangle$, der im Kontinuum der Eigenwerte von H_0 liegt.

Die Wechselwirkung

$$H_{\text{int}} = H - H_0 = PH(\mathbb{1} - P) + (\mathbb{1} - P)HP \tag{7.59}$$

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 (7.4) gemacht haben. Durch Wahl des beliebigen Zustands Υ kann die Funktion $F(E)$ in (7.50) mit den Einschränkungen $F(E) = 0$ für $E < E_{\min}$ 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 $\nu(E, p)$ für den Zerfall in das Kontinuum der Zerfallsprodukte klein ist und nicht selbst resonantes Verhalten zeigt.

7.6 Zerfall bewegter Teilchen

In relativistischer Quantenmechanik ist der Hamiltonoperator $H = cP^0$ eine Komponente des Viererimpulses. Zu Lorentztransformationen Λ, die $\Lambda^0{}_0 \geq 1$ erfüllen und daher die Zeitrichtung nicht umdrehen, gehören unitäre Operatoren $U(\Lambda)$, die auf Zuständen mit ganzzahligem Spin die Lorentztransformationen darstellen.

$$U(\Lambda_2\Lambda_1) = U(\Lambda_2)U(\Lambda_1) \tag{7.60}$$

Für halbzahligen Spin und für Lorentztransformationen, die die Zeitrichtung spiegeln, sind die Verhältnisse verwickelter [15, 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 $U(\Lambda)$ bewirken zeitrichtungstreue Lorentztransformationen der Viererimpulse

$$U^{-1}(\Lambda)P^mU(\Lambda) = \Lambda^m{}_n P^n \ . \tag{7.61}$$

Auf einen Viererimpulseigenzustand Φ_p mit $P^m\Phi_p = p^m\Phi_p$ angewendet ergibt $U(\Lambda)$ daher einen Eigenzustand mit lorentztransformiertem Viererimpuls.

$$P^mU(\Lambda)\Phi_p = U(\Lambda)\Lambda^m{}_n P^n\Phi_p = \Lambda^m{}_n p^n U(\Lambda)\Phi_p \tag{7.62}$$

Für zerfallende Teilchen, die sich mit Geschwindigkeit v bewegen, folgt hieraus, daß ihre Lebensdauer τ_v durch Zeitdilatation vergrößert ist.

$$\tau_v = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\tau_0 \tag{7.63}$$

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 $a(t)$ (7.4) 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

$$\langle \Psi_v(0)\,|\,\Psi_v(t)\rangle \tag{7.64}$$

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 (3.27) $\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\vec{P}\vec{v}t}\Psi_v(0)$ verglichen werden.

$$a_v(t) = \left\langle \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\vec{P}\vec{v}t}\Psi_v(0)\middle|\Psi_v(t)\right\rangle = \left\langle \Psi_v(0)\middle|\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\vec{P}\vec{v}t}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Psi_v(0)\right\rangle \tag{7.65}$$

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

$$\Psi_v = U(\Lambda(v))\Psi_0\ , \tag{7.66}$$

die zur drehungsfreien Lorentztransformation $\Lambda(v)$ gehört, zum Beispiel

$$\Lambda(v) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\begin{pmatrix}1 & \frac{v}{c}\\ \frac{v}{c} & 1\end{pmatrix} & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix} \tag{7.67}$$

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 (7.66) in (7.65) ein und verwenden wir (7.61), so ergibt sich mit der Notation $u_m = (ct, -vt, 0, 0)$

$$\left\langle \Psi_0 \middle| U^{-1} e^{-\frac{i}{\hbar} u_m P^m} U \Psi_0 \right\rangle = \left\langle \Psi_0 \middle| e^{-\frac{i}{\hbar} u_m U^{-1} P^m U} \Psi_0 \right\rangle = \left\langle \Psi_0 \middle| e^{-\frac{i}{\hbar} u_m \Lambda^m{}_n P^n} \Psi_0 \right\rangle \ . \tag{7.68}$$

Wegen $u_m \Lambda^m{}_n P^n = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}\, tcP^0$ und $cP^0 = H$ erhalten wir

$$a_v(t) = \left\langle \Psi_0 \middle| e^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}\, tH} \Psi_0 \right\rangle = a_0(\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}\, t) \ . \tag{7.69}$$

Nimmt die Überlebenswahrscheinlichkeit des ruhenden Teilchens exponentiell mit einer Lebensdauer τ ab, $|a_0(t)|^2 = \exp(-t/\tau)$, so zerfällt das mit Geschwindigkeit v bewegte Teilchen langsamer, $|a_v(t)|^2 = \exp(-\sqrt{1 - v^2/c^2}\, t/\tau)$. Es hat die Lebensdauer

$$\tau_v = \frac{\tau}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \ . \tag{7.70}$$

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.

8 Das Wigner-Theorem

8.1 Wahrscheinlichkeitstreue und unitäre Abbildungen

Da die Wahrscheinlichkeit $w(i, O, \Psi)$ dafür, daß der i-te Meßwert a_i auftritt, wenn der Zustand $\Psi \sim e^{i\alpha}\Psi$ mit dem Apparat O vermessen wird, durch (1.1)

$$w(i, O, \psi) = |\langle \Lambda_i | \Psi \rangle|^2 \ , \quad O\Lambda_i = a_i \Lambda_i \ , \tag{8.1}$$

gegeben ist, läßt jede unitäre Abbildung U, $U^\dagger = U^{-1}$, der Hilbertraumvektoren Ψ und Λ_i auf $U\Psi$ und $U\Lambda_i$ sowie der Operatoren auf UOU^{-1} alle Wahrscheinlichkeiten invariant, denn alle Skalarprodukte und Eigenwertgleichungen bleiben ungeändert

$$\langle U\Lambda | U\Psi \rangle = \langle \Lambda | \Psi \rangle \ . \tag{8.2}$$

Ebenso bleiben alle Wahrscheinlichkeiten durch jede antiunitäre Abbildung A erhalten, das heißt, durch jede invertierbare Abbildung des Hilbertraumes, die

$$\langle A\Lambda | A\Psi \rangle = \langle \Psi | \Lambda \rangle \quad \forall\ \Lambda\ , \Psi \tag{8.3}$$

erfüllt. Da das Skalarprodukt im linken Argument antilinear ist,

$$\langle A\Lambda | Aa\Psi \rangle = \langle a\Psi | \Lambda \rangle = a^* \langle \Psi | \Lambda \rangle = a^* \langle A\Lambda | A\Psi \rangle = \langle A\Lambda | a^* A\Psi \rangle \ , \tag{8.4}$$

ist A nicht linear, sondern antilinear,

$$A(a\Psi) = a^* A\Psi \ , \quad A(\Psi + \Lambda) = (A\Psi) + (A\Lambda) \ . \tag{8.5}$$

Das Wigner-Theorem besagt: Zu jeder invertierbaren Abbildung T von Zuständen auf Zustände, also von Strahlen im Hilbertraum $\{\Psi\} = \{\lambda\Psi, \lambda \in \mathbb{C}\}$ auf Strahlen

$$\{\Psi\} \mapsto T\{\Psi\} \ , \tag{8.6}$$

die alle Wahrscheinlichkeiten erhält,

$$\frac{|\langle T\Psi | T\chi \rangle|^2}{\langle T\Psi | T\Psi \rangle \langle T\chi | T\chi \rangle} = \frac{|\langle \Psi | \chi \rangle|^2}{\langle \Psi | \Psi \rangle \langle \chi | \chi \rangle} \quad \forall\ \Psi, \chi \ , \tag{8.7}$$

gehört (falls der Hilbertraum mindestens dreidimensional ist) eine unitäre Abbildung U oder eine antiunitäre Abbildung A des Hilbertraumes. Dabei ist U oder A durch T bis auf eine Phase, $U' = e^{i\alpha}U$ oder $A' = e^{i\alpha}A$, eindeutig festgelegt.

Diesem Theorem von Wigner entspricht der elementargeometrische Sachverhalt, daß jede längentreue Abbildung Dreiecke dreht (unitär) oder drehspiegelt (antiunitär). Man beachte, daß T eine Selbstabbildung der Menge der Strahlen ist, während U oder A eine Selbstabbildung des Hilbertraums ist.

Beim folgenden Beweis des Wigner-Theorems wählen wir jeweils normierte Repräsentanten der Strahlen, $\langle\Psi|\Psi\rangle = \langle T\Psi|T\Psi\rangle = 1$. Wir betrachten eine Orthonormalbasis χ_l. Die Strahlen $T\{\chi_l\} = \{\chi_l\}'$ definieren, bis auf Phasen $e^{i\alpha_l}$ eindeutig, eine Orthonormalbasis. Denn aus den Beträgen der Skalarprodukte $|\langle\chi'_k|\chi'_l\rangle| = |\langle\chi_k|\chi_l\rangle| = \delta^k{}_l$ können die Skalarprodukte

$$\langle\chi'_k|\chi'_l\rangle = \delta^k{}_l \tag{8.8}$$

eindeutig abgelesen werden, da $z = 0$ aus $|z| = 0$ folgt und sich, weil Längenquadrate positiv sind, $\langle\chi'_k|\chi'_k\rangle = 1$ aus $|\langle\chi'_k|\chi'_k\rangle| = 1$ ergibt.

Weil T invertierbar ist, sind die Vektoren χ'_k nicht nur ein Orthonormalsystem, sondern eine Basis. Anderenfalls gäbe es einen nichtverschwindenden Vektor Ψ', der senkrecht auf allen χ'_k stünde, dessen Strahl ein Urbild hätte, $\{\Psi'\} = T\{\Psi\}$. Dann verschwänden aber alle $|\langle\Psi|\chi_k\rangle| = |\langle\Psi'|\chi'_k\rangle| = 0$, und die χ_k wären keine Basis.

Für $k = 2, 3, \ldots,$ legen wir die Phasen von χ'_k relativ zu χ'_1 durch das Transformierte des Strahls

$$\{\Upsilon_k\} = \{\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_1 + \chi_k)\} \tag{8.9}$$

fest. Die Komponenten c_{lk} von $T\{\Upsilon_k\}$ sind durch

$$T\{\Upsilon_k\} = \{\Upsilon'_k\} = \{e^{i\beta_k}\sum_l \chi'_l c_{lk}\} \tag{8.10}$$

bis auf Phasen $e^{i\beta_k}$ eindeutig bestimmt. Insbesondere ist für $k \neq l \neq 1$

$$|\langle\chi'_k|\Upsilon'_l\rangle| = |\langle\chi_k|\Upsilon_l\rangle| = 0 \tag{8.11}$$

und

$$\begin{aligned} |c_{1k}| &= |\langle\chi'_1|\Upsilon'_k\rangle| = |\langle\chi_1|\Upsilon_k\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}\ , \\ |c_{kk}| &= |\langle\chi'_k|\Upsilon'_k\rangle| = |\langle\chi_k|\Upsilon_k\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}\ , \end{aligned} \tag{8.12}$$

also

$$\{\Upsilon'_k\} = \{\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi'_1 e^{i\alpha_1} + \chi'_k e^{i\alpha_k})\}\ . \tag{8.13}$$

Wir wählen die Phasen der Basis $\chi'_1, \chi'_2, \ldots$ so, daß

$$\{\Upsilon'_k\} = \{\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi'_1 + \chi'_k)\} \tag{8.14}$$

gilt. Diese Wahl läßt eine gemeinsame Phase aller χ'_k, $k = 1, 2, \ldots,$ unbestimmt.

Jeder Strahl $\{\Psi\} = \{\sum_k \chi_k \psi_k\}$ wird von T auf einen Strahl $\{\Psi'\} = \{\sum_k \chi'_k \psi'_k\}$ abgebildet. Hierbei sind die Beträge der Komponenten ψ_k und ψ'_k gleich, denn

$$|\psi_k| = |\langle \chi_k | \Psi \rangle| = |\langle \chi'_k | \Psi' \rangle| = |\psi'_k| \ . \tag{8.15}$$

Weiter gilt

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_1 + \psi_k| = |\langle \Upsilon_k | \Psi \rangle| = |\langle \Upsilon'_k | \Psi' \rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi'_1 + \psi'_k| \ . \tag{8.16}$$

Geometrisch bilden die komplexen Zahlen ψ_1, ψ_k und $-(\psi_1 + \psi_k)$ die Seitenvektoren eines Dreiecks Δ in der komplexen Ebene, $(\psi_1) + (\psi_k) - (\psi_1 + \psi_k) = 0$. Die komplexen Zahlen ψ'_1, ψ'_k und $-(\psi_1 + \psi_k)'$ sind die Seitenvektoren eines zweiten Dreiecks Δ' mit gleichen Seitenlängen. Bis auf eine Drehung und Verschiebung, mit der man einen Eckpunkt und eine Seite in Übereinstimmung bringt, sind daher beide Dreiecke gleich oder ihr Spiegelbild.

Algebraisch sieht man das im Fall $\psi_1 \neq 0$ folgendermaßen ein: wir multiplizieren mit $\sqrt{2}/|\psi_1| = \sqrt{2}/|\psi'_1|$

$$|1 + a| = |1 + a'| \ , \quad |a|^2 = |a'|^2 \ , \quad \text{wobei} \quad a = \frac{\psi_k}{\psi_1} \ , \quad a' = \frac{\psi'_k}{\psi'_1} \ . \tag{8.17}$$

Wegen $|1 + a|^2 = 1 + |a|^2 + 2\Re a$ besagt dies

$$\Re a = \Re a' \tag{8.18}$$

und zusammen mit $|a|^2 = |a'|^2$

$$(\ \Im a = \Im a' \quad \text{oder} \quad \Im a = -\Im a'\ ) \ . \tag{8.19}$$

Für jedes k gilt also, falls $\psi_1 \neq 0$,

$$\frac{\psi_k}{\psi_1} = \frac{\psi'_k}{\psi'_1} \quad \text{oder} \quad \frac{\psi_k}{\psi_1} = \frac{\psi'^*_k}{\psi'^*_1} \ . \tag{8.20}$$

Schreibt man $a = r e^{i\phi}$ als Produkt einer Streckung um r und einer Drehung um ϕ, so sieht man aus $a\psi_1 = \psi_k$, daß diese Drehstreckung die Dreiecksseite ψ_1 auf die zweite Dreiecksseite ψ_k, abbildet. Die Alternative $a = a'$ gilt, wenn die Längen beider Seiten und ihr eingeschlossener Winkel mit den Längen und dem Winkel im Dreieck Δ' übereinstimmt, gilt $a^* = a'$, so hat der Winkel im Dreieck Δ' das entgegengesetzte Vorzeichen und Δ' hängt mit Δ durch eine Drehspiegelung zusammen.

Gruppieren wir die beiden Fälle, so gilt insgesamt

$$\{T\Psi\} = \{ \sum_k{}' \chi'_k \frac{\psi'_1}{\psi_1}\psi_k + \sum_l{}'' \chi'_l \frac{\psi'_1}{\psi^*_1}\psi^*_l\} = \{\psi'_1 \Big(\sum_k{}' \chi'_k \frac{\psi_k}{\psi_1} + \sum_l{}'' \chi'_l \frac{\psi^*_l}{\psi^*_1}\Big)\} \ . \tag{8.21}$$

Dabei erstrecken sich die Summen über diejenigen Werte von k oder l, für die die eine oder andere Alternative gilt.

Tatsächlich kann aber für alle k nur eine der Alternativen gelten, wenn sie sich unterscheiden. Gäbe es nämlich ein Paar k und l mit

$$\frac{\psi'_k}{\psi'_1} = \frac{\psi_k}{\psi_1} \neq \frac{\psi^*_k}{\psi^*_1} \quad \text{und} \quad \frac{\psi'_l}{\psi'_1} = \frac{\psi^*_l}{\psi^*_1} \neq \frac{\psi_l}{\psi_1} \ , \tag{8.22}$$

dann wäre der Betrag des Skalarproduktes mit

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{3}}(\chi_1 + \chi_k + \chi_l) \tag{8.23}$$

nicht invariant unter T. Gemäß (8.21) wird $\{\phi\}$ von T auf $\{\phi'\} = \{\frac{1}{\sqrt{3}}(\chi'_1 + \chi'_k + \chi'_l)\}$ abgebildet. Aus

$$\sqrt{3}|\,\langle\phi\,|\Psi\rangle\,| = |\psi_1 + \psi_k + \psi_l| = \sqrt{3}|\,\langle\phi'\,|\Psi'\rangle\,| = |\psi'_1 + \psi'_k + \psi'_l| \tag{8.24}$$

ergäbe sich nach Ausklammern von $|\psi_1| = |\psi'_1|$

$$|1 + a + b|^2 = |1 + a + b^*|^2 \ , \quad \text{wobei} \quad a = \frac{\psi_k}{\psi_1} \neq a^* \quad \text{und} \quad b = \frac{\psi_l}{\psi_1} \neq b^* \ . \tag{8.25}$$

Ausmultiplizieren ergibt

$$1+|a|^2+|b|^2+2\Re a+2\Re b+2\Re(a\,b^*) = 1+|a|^2+|b|^2+2\Re a+2\Re b^*+2\Re(a\,b) \ , \tag{8.26}$$

das heißt

$$\Re(a\,b^*) = \Re(a\,b) \ \Leftrightarrow\ \Re a\,\Re b + \Im a\,\Im b = \Re a\,\Re b - \Im a\,\Im b \ \Leftrightarrow\ \Im a\,\Im b = 0 \tag{8.27}$$

im Widerspruch zur Annahme $a \neq a^*$ und $b \neq b^*$.

Es gilt also für jedes Ψ

$$T\{\Psi\} = \{\sum_k \chi'_k\psi_k\} \quad \text{oder} \quad T\{\Psi\} = \{\sum_k \chi'_k\psi^*_k\} \ . \tag{8.28}$$

Von beiden Alternativen muß bei allen Strahlen

$$\{\Lambda_k\} = \{\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_1 + i\chi_k)\} \ , \quad k = 2, 3, \ldots \tag{8.29}$$

dieselbe realisiert sein, sonst gäbe es ein k und ein l mit

$$T\{\Lambda_k\} = \{\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi'_1 + i\chi'_k)\} \ , \quad T\{\Lambda_l\} = \{\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi'_1 - i\chi'_l)\} \ . \tag{8.30}$$

Der Strahl $\{\Gamma\} = \{\frac{1}{\sqrt{3}}(\chi_1 + i\chi_k + i\chi_l)\}$ wird auf $\{\Gamma'\} = \{\frac{1}{\sqrt{3}}(\chi'_1 + i\chi'_k + i\chi'_l)\}$ abgebildet oder auf $\{\Gamma'\} = \frac{1}{\sqrt{3}}(\chi'_1 - i\chi'_k - i\chi'_l)$. Im ersten Fall ist der Betrag des Skalarproduktes mit Λ_l nicht invariant,

$$\begin{aligned} &\sqrt{6}|\,\langle\Gamma\,|\Lambda_l\rangle\,| = |\,\langle\chi_1 + i\chi_k + i\chi_l\,|\chi_1 + i\chi_l\rangle\,| = 2 \\ \neq &\sqrt{6}|\,\langle\Gamma'\,|\Lambda'_l\rangle\,| = |\,\langle\chi'_1 + i\chi'_k + i\chi'_l\,|\chi'_1 - i\chi'_l\rangle\,| = 0 \end{aligned} \tag{8.31}$$

im zweiten Fall der Betrag des Skalarproduktes mit Λ_k. In jedem Fall müssen Γ und alle Λ_k linear oder antilinear transformieren.

Dann aber müssen alle Strahlen $\{\Psi\}$ genauso linear oder antilinear transformieren wie die $\{\Lambda_k\}$. Denn gäbe es ein $\{\Psi\}$ mit $\{\Psi'\} = \{\psi'_1 \sum_l \chi'_l (\frac{\psi_l}{\psi_1})^*\}$ mit einem $\frac{\psi_l}{\psi_1} \neq (\frac{\psi_l}{\psi_1})^*$, während $\{\Lambda'_l\} = \{\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi'_1 + i\chi'_l)\}$ gilt, dann ergäbe sich

$$\sqrt{2}|\,\langle\Lambda_l|\Psi\rangle\,| = |\psi_1 - i\psi_l| = |\psi_1||1 - i\frac{\psi_l}{\psi_1}| = \sqrt{2}|\,\langle\Lambda'_l|\Psi'\rangle\,| = |\psi'_1 - i\psi'_l| = |\psi'_1||1 - i(\frac{\psi_l}{\psi_1})^*|\,, \tag{8.32}$$

also $|1+a|^2 = |1-a^*|^2$ mit $a = -i\psi_l/\psi_1$, und demnach $1+|a|^2+2\Re a = 1+|a|^2-2\Re a$, also $0 = \Re a = \Im(\psi_l/\psi_1)$ im Widerspruch zur Annahme $(\frac{\psi_l}{\psi_1})^* \neq \frac{\psi_l}{\psi_1}$.

Ebenso untersucht man die verbleibenden Fälle mit $\psi_1 = 0$.

Wir haben damit das Wigner-Theorem bewiesen: Zu jeder invertierbaren, wahrscheinlichkeitstreuen Abbildung T von Strahlen auf Strahlen gehört eine unitäre Abbildung U oder eine antiunitäre Abbildung A von Hilbertraumvektoren,

$$\begin{aligned} &\Psi = \sum_k \chi_k \psi_k \mapsto U\Psi = \sum_k \chi'_k \psi_k \\ \text{oder}\quad &\Psi = \sum_k \chi_k \psi_k \mapsto A\Psi = \sum_k \chi'_k \psi^*_k\,. \end{aligned} \tag{8.33}$$

Die Selbstabbildung des Hilbertraumes, U oder A, ist bis auf eine gemeinsame Phase aller χ'_k eindeutig durch die wahrscheinlichkeitstreue Selbstabbildung T des Zustandsraumes bestimmt.

Es ist U linear, $U(a\Psi + b\Lambda) = a(U\psi) + b(U\Lambda)$, und unitär, $\langle U\Lambda|U\Psi\rangle = \langle\Lambda|\Psi\rangle$, während A antilinear, $A(a\Psi+b\Lambda) = a^*(A\psi)+b^*(A\Lambda)$, und antiunitär ist, $\langle A\Lambda|A\Psi\rangle = \sum_k \Lambda_k \psi^*_k = \langle\Psi|\Lambda\rangle$.

Da A^2 linear und unitär ist, gehören zu Transformationen T, die sich als Quadrat $T = T'^2$ schreiben lassen, unitäre Operatoren U im Hilbertraum, denn auch wenn T' antiunitär realisiert wäre, wäre das Quadrat dieser Realisierung unitär. Insbesondere gehören zu allen Transformationen, die sich wie Translationen und Drehungen durch wiederholtes Anwenden infinitesimaler Transformationen erzeugen lassen, wenn sie alle Wahrscheinlichkeiten invariant lassen, unitäre Operatoren im Hilbertraum.

In endlichdimensionalen Räumen hat jede lineare Abbildung einen Eigenvektor. Da die Transformation A^2 unitär ist, haben ihre Eigenwerte den Betrag 1 und ein Eigenvektor erfüllt $A^2\hat{\chi} = e^{2i\alpha}\hat{\chi}$.

Wenn $A^2\hat{\chi} = \hat{\chi}$ ist, so wird $\hat{\chi} + A\hat{\chi}$ auf sich abgebildet. Falls zudem $A\hat{\chi} = -\hat{\chi}$ ist, definieren wir den Hilbertraumvektor als $\chi = i\hat{\chi}$, falls nicht als $\chi = \hat{\chi} + A\hat{\chi}$. Er ist nicht Null und wird von A invariant gelassen

$$A\chi = \chi\,. \tag{8.34}$$

Der von χ aufgespannte eindimensionale Unterraum wird von A gespiegelt, $\forall\lambda \in \mathbb{C}$: $A(\lambda\chi) = \lambda^*\chi$, der dazu senkrechte Unterraum wird auf sich abgebildet.

Wenn der Eigenwert $e^{2i\alpha}$ nicht 1 ist, dann bezeichnen wir $A\hat{\chi}$ als $e^{-i\alpha}\bar{\chi}$, und A wirkt wegen $A^2\hat{\chi} = e^{2i\alpha}\hat{\chi}$ auf diese Zustände durch

$$A\hat{\chi} = e^{-i\alpha}\bar{\chi}\ , \quad A\bar{\chi} = e^{i\alpha}\hat{\chi}\ . \tag{8.35}$$

Der Zustand $\hat{\chi}$ steht senkrecht auf $\bar{\chi}$, denn A ist antiunitär, $\langle\hat{\chi}|A\hat{\chi}\rangle = \langle A(A\hat{\chi})|A\hat{\chi}\rangle$, und wegen $A^2\hat{\chi} = e^{2i\alpha}\hat{\chi}$ folgt $(1 - e^{-2i\alpha})\langle\hat{\chi}|A\hat{\chi}\rangle = 0$. Zudem haben $\hat{\chi}$ und $\bar{\chi}$ dieselbe Norm, $\langle\hat{\chi}|\hat{\chi}\rangle = \langle A\hat{\chi}|A\hat{\chi}\rangle$.

Der Unterraum der Vektoren Λ, die senkrecht auf χ oder $\hat{\chi}$ und $\bar{\chi}$ stehen, wird durch A auf sich abgebildet, da A antiunitär ist,

$$\begin{aligned} \langle\chi|\Lambda\rangle = 0 \ &\Leftrightarrow\ \langle A\Lambda|A\chi\rangle = 0 \ \Leftrightarrow\ \langle A\Lambda|\chi\rangle = 0\ , \quad \text{und ebenso} \\ \big(\langle\hat{\chi}|\Lambda\rangle = 0 \text{ und } \langle\bar{\chi}|\Lambda\rangle = 0\big) \ &\Leftrightarrow\ \big(\langle A\Lambda|A\hat{\chi}\rangle = 0 \text{ und } \langle A\Lambda|A\bar{\chi}\rangle = 0\big) \\ &\Leftrightarrow\ \big(\langle A\Lambda|\bar{\chi}\rangle = 0 \text{ und } \langle A\Lambda|\hat{\chi}\rangle = 0\big)\ . \end{aligned} \tag{8.36}$$

Da in diesem Unterraum wiederum ein Eigenzustand zu A^2 existiert, auf dem A durch (8.34) oder (8.35) wirkt, finden wir so durch vollständige Induktion eine Orthonormalbasis, χ_k, $\hat{\chi}_i$, $\bar{\chi}_i$, in der A auf Singuletts χ_k oder auf Dubletts $\hat{\chi}_i$, $\bar{\chi}_i$ wirkt. Auf einen beliebigen Zustand Ψ mit Komponenten ψ_k, $\hat{\psi}_i$, $\bar{\psi}_i$ wirkt A als

$$A : \Psi = \sum_k \chi_k\psi_k + \sum_i \big(\hat{\chi}_i\hat{\psi}_i + \bar{\chi}_i\bar{\psi}_i\big) \mapsto \sum_k \chi_k\psi_k^* + \sum_i \big(\hat{\chi}_i e^{i\alpha_i}\bar{\psi}_i^* + \bar{\chi}_i e^{-i\alpha_i}\hat{\psi}_i^*\big)\ . \tag{8.37}$$

Mit den entsprechenden Überlegungen zeigt man, daß in endlichdimensionalen Räumen die Eigenvektoren χ_k jeder unitäre Abbildung U, $U\chi_k = e^{i\alpha_k}\chi_k$, als Orthonormalbasis gewählt werden können und daß U folgendermaßen wirkt

$$U : \Psi = \sum_k \chi_k\psi_k \mapsto \sum_k \chi_k e^{i\alpha_k}\psi_k\ . \tag{8.38}$$

8.2 Nichtlineare Schrödingergleichung

Nichtlineare Zeitentwicklung verletzt den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik, daß die Entropie eines abgeschlossenen Systems im Laufe der Zeit in keinem Fall abnimmt.

Dies folgt durch Betrachtung von Gemischen ρ zweier normierter Zustände, $|u\rangle$ und $|v\rangle$,

$$\rho = \frac{1}{2}\,|u\rangle\,\langle u| + \frac{1}{2}\,|v\rangle\,\langle v|\ , \tag{8.39}$$

die nicht notwendig senkrecht aufeinander stehen.

Da 2ρ den Vektor $|u\rangle$ auf $2\rho\,|u\rangle = |u\rangle\,1 + |v\rangle\,\langle v|u\rangle$ und $|v\rangle$ auf $2\rho\,|v\rangle = |u\rangle\,\langle u|v\rangle + |v\rangle\,1$ abbildet, gehört zu ρ in dieser Basis des von $|u\rangle$ und $|v\rangle$ aufgespannten Unterraumes die Matrix

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \langle u|v\rangle \\ \langle v|u\rangle & 1 \end{pmatrix} \tag{8.40}$$

mit den Eigenwerten $\rho_\pm = (1 \pm a)/2$, $a = |\langle u|v\rangle|$, $0 \le a \le 1$. Die Entropie (6.5) dieses Gemisches, $S = -\rho_+ \ln \rho_+ - \rho_- \ln \rho_-$, ist maximal, wenn $|u\rangle$ senkrecht auf $|v\rangle$ steht, $a = 0$, und nimmt monoton auf Null ab, wenn a auf Eins anwächst.

Damit die Entropie mit fortlaufender Zeit in keinem Fall abnimmt, darf also kein Betrag eines Skalarproduktes normierter Zustände zunehmen,

$$t > t' : \qquad |\langle u(t)|v(t)\rangle| \le |\langle u(t')|v(t')\rangle| \ . \tag{8.41}$$

Insbesondere müssen Paare aufeinander senkrechter Zustände im Laufe der Zeit senkrecht bleiben, und jede Orthonormalbasis $\Lambda_i(t')$ bleibt eine Orthonormalbasis $\Lambda_i(t)$.

Aber dann erzwingt die Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit (1.29), daß sich kein Betrag eines Skalarproduktes mit der Zeit ändert. Denn zerlegen wir den Zustand $v(t')$ in eine Orthonormalbasis $\Lambda_i(t')$ mit $\Lambda_1(t') = u(t')$ und $v(t)$ in die Basis $\Lambda_i(t)$, die sich daraus im Laufe der Zeit entwickelt, so gilt

$$1 = \sum_i |\langle \Lambda_i(t)|v(t)\rangle|^2 \le \sum_i |\langle \Lambda_i(t')|v(t')\rangle|^2 = 1 \ . \tag{8.42}$$

Da keiner der Summanden zunimmt und die Summe gleich bleibt, bleibt jeder Term ungeändert, insbesondere ist $|\langle u(t)|v(t)\rangle| = |\langle u(t')|v(t')\rangle|$.

Demnach ist, wenn die Entropie (6.5) im Laufe der Zeit in keinem Fall abnimmt, die Zeitentwicklung eine wahrscheinlichkeitstreue Abbildung (8.7) von Strahlen des Hilbertraumes, zu der nach dem Wignertheorem eine unitäre oder antiunitäre Abbildung des Hilbertraumes gehört. Da das Produkt zweier antiunitärer Abbildungen unitär ist und sich jede Zeitentwicklung als hintereinander folgende Entwicklungen in Teilzeiten schreiben läßt, ist Zeitentwicklung unitär und die Schrödingergleichung linear.

Dennoch wird die Zeitentwicklung von beispielsweise einem geladenen Teilchen, das in leitenden Flächen seine Spiegelladung erzeugt, zutreffend von einer nichtlinearen Schrödingergleichung beschrieben, in der die influenzierte Ladung durch die Wellenfunktion des Teilchens ausgedrückt ist. Die Entropie eines Gemisches solcher geladenen Teilchen darf durchaus abnehmen, nur nicht die Entropie des abgeschlossenen Gesamtsystems, das auch die Spiegelladungen umfaßt. Die Schrödingergleichung des Gesamtsystems ist linear.

9 Relativistische Quantenmechanik

Relativistisch ist Quantenmechanik, in deren Hilbertraum eine unitäre Darstellung der Überlagerung derjenigen Poincaré-Transformationen existiert, die stetig mit der Identität zusammenhängen.

Dabei heißt die Zeitentwicklung, die vom Hamiltonoperator $H = P^0$ erzeugt wird, frei. Einfachheitshalber verwenden wir Einheiten $\hbar = 1$, $\epsilon_0 = 1$ und $c = 1$ [7, Kapitel 25].

9.1 Poincaré- und Lorentztransformationen

Poincaré-Transformationen $T_{\Lambda,a}$ sind linear inhomogene Transformationen der Raumzeit

$$T_{\Lambda,a} : \begin{cases} \mathbb{R}^4 & \rightarrow & \mathbb{R}^4 \\ x & \mapsto & x' = \Lambda x + a \end{cases} . \tag{9.1}$$

Als Matrixgleichung gelesen sind dabei x', x und $a = (a^0, a^1, a^2, a^3)$ Spaltenvektoren, auch wenn wir sie im laufenden Text des Druckbilds wegen als Zeilenvektoren schreiben.

Die Translation $T_a = T_{1,a}$ ist eine Verschiebung um den Vierervektor a. Die lineare Abbildung $T_\Lambda = T_{\Lambda,0}$ ist eine Lorentztransformation, läßt also die Skalarprodukte von Vierervektoren

$$u \cdot v = u^0 v^0 - u^1 v^1 - u^2 v^2 - u^3 v^3 \tag{9.2}$$

invariant,

$$(\Lambda u) \cdot (\Lambda v) = u \cdot v \ , \quad \forall\, u, v \ . \tag{9.3}$$

Weil das Skalarprodukt in Matrixschreibweise die Form

$$u \cdot v = u^T \eta v \tag{9.4}$$

hat, wobei η die Matrix

$$\eta = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} \tag{9.5}$$

ist, erfüllen Lorentztransformationen die Matrixgleichung

$$\Lambda^T \eta \Lambda = \eta \ . \tag{9.6}$$

Zum Beispiel bewirkt in einer Zerlegung in $(1 + 3) \times (1 + 3)$-Blöcke die Matrix

$$L_{\vec{v}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-v^2}} & \frac{\vec{v}^T}{\sqrt{1-v^2}} \\ \frac{\vec{v}}{\sqrt{1-v^2}} & \mathbf{1}_{3\times 3} + \frac{\vec{v}\vec{v}^T}{a(v)} \end{pmatrix} \ , \quad \text{mit} \quad a(v) = \sqrt{1-v^2}\,(1 + \sqrt{1-v^2}) \tag{9.7}$$

die drehungsfreie Lorentztransformation, die die Weltlinie $\Gamma : s \mapsto x(s) = (s, 0, 0, 0)$ eines im Ursprung ruhenden Teilchens auf die Weltlinie $\Gamma' : s \mapsto x'(s) = \frac{s}{\sqrt{1-v^2}}(1, \vec{v})$ eines Teilchens abbildet, das sich mit Geschwindigkeit $\vec{v}$, $\vec{v}^2 < 1$, bewegt.

Die drehungsfreie Lorentztransformation $L_{\vec{v}}$ bildet den Vektor $e_0 = (1, 0, 0, 0)$ auf $L_{\vec{v}}\, e_0 = \frac{1}{\sqrt{1-v^2}}(1, \vec{v})$ ab und läßt die Vektoren w invariant, die senkrecht auf e_0 und $L_{\vec{v}}\, e_0$ stehen, also nur einen räumlichen Anteil haben und der senkrecht auf $\vec{v}$ steht.

Die Poincaré-Transformationen bilden eine Gruppe, denn hintereinander ausgeführte oder invertierte Poincaré-Transformationen sind wieder Poincaré-Transformationen

$$\begin{gathered} T_{\Lambda_2, a_2} T_{\Lambda_1, a_1}(x) = T_{\Lambda_2, a_2}(\Lambda_1 x + a_1) = \Lambda_2(\Lambda_1 x + a_1) + a_2 = T_{\Lambda_2\Lambda_1,\, a_2 + \Lambda_2 a_1}(x)\ , \\ (T_{\Lambda, a})^{-1} = T_{\Lambda^{-1}, -\Lambda^{-1} a}\ . \end{gathered} \tag{9.8}$$

Die Lorentzgruppe besteht aus vier Zusammenhangskomponenten. Mit dem Determinantenproduktsatz $\det(AB) = (\det A)(\det B)$ und wegen $\det \Lambda^T = \det \Lambda$ folgt nämlich aus $\Lambda^T \eta \Lambda = \eta$ die Gleichung $(\det \Lambda)^2 = 1$, also

$$\det \Lambda = 1 \quad \text{oder} \quad \det \Lambda = -1\ . \tag{9.9}$$

Zudem folgt aus der 0-0-Komponente von $\Lambda^T \eta \Lambda = \eta$,

$$({\Lambda^0}_0)^2 - ({\Lambda^0}_1)^2 - ({\Lambda^0}_2)^2 - ({\Lambda^0}_3)^2 = 1\ , \tag{9.10}$$

die Ungleichung $({\Lambda^0}_0)^2 \geq 1$, also

$${\Lambda^0}_0 \geq 1 \quad \text{oder} \quad {\Lambda^0}_0 \leq -1\ . \tag{9.11}$$

Daher können nicht die **1**-Matrix, die Raumspiegelung $\mathcal{P}$ und die Zeitumkehr $\mathcal{T}$,

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}\ , \quad \mathcal{T} = \begin{pmatrix} -1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}\ , \tag{9.12}$$

sowie ihr Produkt $\mathcal{PT}$ durch stetige Abänderung ihrer Matrixelemente innerhalb der Lorentzmatrizen ineinander verformt werden, denn ${\Lambda^0}_0$ und $\det \Lambda$ sind stetige Funktionen von Λ.

Jede Lorentztransformation ist daher entweder von der Form

$$\Lambda \quad \text{oder} \quad \mathcal{T}\Lambda \quad \text{oder} \quad \mathcal{P}\Lambda \quad \text{oder} \quad \mathcal{TP}\Lambda\ , \tag{9.13}$$

wobei Λ eine eigentliche Lorentztransformation ist, also orientierungstreu, $\det \Lambda = 1$, und zeitrichtungstreu, ${\Lambda^0}_0 \geq 1$.

Die eigentlichen Lorentztransformationen bilden die Gruppe $\mathrm{SO}(1,3)^{\uparrow}$. Zusammen mit den Translationen bilden sie die Gruppe der eigentlichen Poincaré-Transformationen.

Jede eigentliche Lorentztransformation Λ läßt sich auf genau eine Art als Produkt schreiben von einer Drehung R, die ${R^0}_0 = 1$ und $\det R = 1$ erfüllt, und einer symmetrischen Matrix $L = L^T$, das ist eine drehungsfreie Lorentztransformation $L_{\vec{v}}$ (9.7) [6, Anhang D]

$$\Lambda = L_{\vec{v}} R\ . \tag{9.14}$$

Da die Menge der drehungsfreien Lorentztransformationen $L_{\vec{v}}$ und die Menge der Drehungen R mit $\det R = 1$ zusammenhängend sind, ist $SO(1,3)^{\uparrow}$ zusammenhängend.

Jede Transformation

$$\Lambda = e^{\omega} \tag{9.15}$$

ist eine Lorentztransformation, wenn

$$\eta\omega = -(\eta\omega)^{T} \tag{9.16}$$

erfüllt ist. Denn dann gilt $\eta\omega^n = (-\omega^T)^n\eta$ und $\eta e^{\omega} = e^{-\omega^T}\eta$, also erfüllt e^{ω} die definierende Relation (9.6) von Lorentzmatrizen, $(e^{\omega})^T\eta(e^{\omega}) = e^{\omega^T}e^{-\omega^T}\eta = \eta$.

Umgekehrt ist (9.16) notwendig, damit $\Lambda = e^{\lambda\omega}$ für jeden Wert von $\lambda \in \mathbb{R}$ eine Lorentztransformation ist. Denn (9.3) besagt in erster Ordnung in λ (9.16).

Mit Koeffizienten $\omega^{ab} = \eta^{bc}\omega^{a}{}_{c}$ lassen sich die infinitesimalen Lorentztransformationen als Linearkombination $\frac{1}{2}\omega^{ab}l_{ab}$ einer Basis schreiben, die wir, um Verwechslungen mit dem Kronecker-Delta $\delta^{a}{}_{b}$ zu vermeiden, mit l_{ab} bezeichnen

$$l_{ab}e_c = e_a\eta_{bc} - e_b\eta_{ac} = e_d\big(\delta^{d}{}_{a}\eta_{bc} - \delta^{d}{}_{b}\eta_{ac}\big)\ . \tag{9.17}$$

Wir zählen diese Basis $l_{ab} = -l_{ba}$ durch antisymmetrische Indexpaare ab, wobei $a < b$ die natürlichen Zahlen von 0 bis $D-1$ durchlaufen und D die Dimension der Raumzeit benennt. Die Basis ist so gewählt, daß die Matrixelemente $\frac{1}{2}(\omega^{ab}l_{ab})^{r}{}_{s} = \omega^{r}{}_{s}$ mit den Komponenten bezüglich der Basis übereinstimmen.

Der Kommutator zweier infinitesimaler Lorentztransformationen ist

$$\begin{aligned}[l_{ab}, l_{cd}]e_f &= l_{ab}\big(e_c\eta_{df} - e_d\eta_{cf}\big) - l_{cd}\big(e_a\eta_{bf} - e_b\eta_{af}\big) = \\ &= \big(e_a\eta_{bc} - e_b\eta_{ac}\big)\eta_{df} - \big(e_a\eta_{bd} - e_b\eta_{ad}\big)\eta_{cf} - ab \leftrightarrow cd = \\ &= \big(-\eta_{ac}l_{bd} + \eta_{bc}l_{ad} + \eta_{ad}l_{bc} - \eta_{bd}l_{ac}\big)e_f\ .\end{aligned} \tag{9.18}$$

Die infinitesimalen Lorentztransformationen genügen also der reellen Liealgebra

$$[l_{ab}, l_{cd}] = -\eta_{ac}l_{bd} + \eta_{bc}l_{ad} + \eta_{ad}l_{bc} - \eta_{bd}l_{ac}\ . \tag{9.19}$$

9.2 Massenschalen

Die Massenschale eines (Vierer-)Impulses $\underline{p} \in \mathbb{R}^D$ ist die Menge aller Punkte $p = \Lambda\underline{p}$, die durch eigentliche Lorentztransformationen $\Lambda \in SO(1, D-1)^{\uparrow}$ aus $\underline{p}$ erzeugt wird.

Im einfachsten Fall, $\underline{p} = (0, 0, \dots, 0)$, besteht sie nur aus einem Punkt, dem Ursprung. Er ist invariant unter allen Lorentztransformationen und weil er der einzige invariante Viererimpuls ist, ist er der Viererimpuls des Vakuums, das für alle Beobachter gleich ist.

Bei einem Teilchen der Masse $m > 0$, das in Ruhe den Viererimpuls $\underline{p} = (m, 0, \dots, 0)$ hat, ist die Massenschale die Schale eines Hyperboloids

$$\mathcal{M}_m = \Big\{p = (p^0, p^1, \dots, p^3) : p^0 = \sqrt{m^2 + \vec{p}^{\,2}}\Big\}\ . \tag{9.20}$$

Sie wird durch die drehungsfreien Lorentztransformationen (9.7)

$$L_p = \frac{1}{m}\begin{pmatrix} p^0 & \vec{p}^T \\ \vec{p} & m\mathbf{1} + \frac{\vec{p}\vec{p}^T}{m+p^0} \end{pmatrix} \ , \ p^0 = \sqrt{m^2 + \vec{p}^{\,2}} \ , \tag{9.21}$$

aus $\underline{p}$ erzeugt, $L_p\underline{p} = p$. Denn jede Lorentztransformation Λ läßt sich eindeutig in das Produkt einer Drehung R und einer drehungsfreien Lorentztransformation L_p zerlegen. Die Drehgruppe $H = \mathrm{SO}(D-1) \subset \mathrm{SO}(1, D-1)^\uparrow$ ist die Stabilitätsgruppe von $\underline{p}$, $R\underline{p} = \underline{p}$.

Die antihermiteschen Erzeugenden $\Sigma_{ij} = -\Sigma_{ji}$, $i, j \in \{1, \dots, D-1\}$, $w(e^\omega) = e^{\frac{1}{2}\omega^{ij}\Sigma_{ij}}$, der Darstellung w von $H = \mathrm{SO}(D-1)$ erfüllen die Unteralgebra von (9.19)

$$[\Sigma_{ij}, \Sigma_{kl}] = \delta_{ik}\Sigma_{jl} - \delta_{il}\Sigma_{jk} - \delta_{jk}\Sigma_{il} + \delta_{jl}\Sigma_{ik} \ . \tag{9.22}$$

Da sie eine kompakte Gruppe erzeugen, sind sie vollständig reduzibel und ihre irreduziblen Unterräume sind endlichdimensional.

So sind für $D-1 = 3$ die unitären Darstellungen der Drehgruppe, wie unsere Untersuchung der Drehimpulsalgebra (2.51) gezeigt hat, $2s+1$-dimensional, wobei der Spin s ganz- oder (wenn man die Überlagerungsgruppe SU(2) darstellt) halbzahlig ist.

Als Koordinaten für die Massenschale $\mathcal{M}_m$ bieten sich die räumlichen Impulse $\vec{p} = (p^1, \dots, p^{D-1})$ an.

Die Massenschale eines masselosen Teilchens ist topologisch nichttrivial. Sie wird durch Lorentztransformationene beispielsweise des Viererimpulses $\underline{p} = (1, 1, 0, 0)$ erzeugt

$$\mathcal{M}_0 = \left\{ p = (p^0, p^1, p^2, p^3) : p^0 = \sqrt{\vec{p}^{\,2}} > 0 \ , \ \vec{p} \neq 0 \right\} \ , \tag{9.23}$$

ist also der Vorwärtslichtkegel, $p^2 = 0$, $p^0 > 0$, ohne die Spitze. Der Ursprung gehört nicht zur Massenschale eines masselosen Teilchens, denn Lorentztransformationen sind invertierbar und bilden keinen nichtverschwindenden Vektor, also auch nicht $\underline{p} = (1, 1, 0, 0)$, auf 0 ab. In der Folge hat $\mathcal{M}_0$ die Topologie von (ist bijektiv stetig abbildbar auf) $\mathbb{R} \times S^2$, denn zu jedem nichtverschwindenden Impuls $\vec{p}$ gehört ein Betrag $|\vec{p}| = e^\alpha$, $\alpha \in \mathbb{R}$, und eine Richtung $\vec{e} \in S^2$.

Der Viererimpuls $\underline{p} = (1, 1, 0, 0)$ wird von infinitesimalen Lorentztransformationen der Form

$$\omega(a, b, c) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & a & b \\ 0 & 0 & a & b \\ a & -a & 0 & -\alpha \\ b & -b & \alpha & 0 \end{pmatrix} \tag{9.24}$$

auf Null abgebildet, bleibt also unter der Gruppe der zugehörigen endlichen Transformationen e^ω invariant. Dabei erzeugt $\omega(0, 0, \alpha)$ Drehungen R_α um den Winkel α,

$$R_\alpha = \exp\begin{pmatrix} & & & \\ & & & \\ & & & -\alpha \\ & & \alpha & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ & & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \ , \tag{9.25}$$

und $\omega(a,b,0)$ vertauscht mit $\omega(a',b',0)$, erzeugt also Translationen $T(a,b) = e^{\omega(a,b,0)}$, $T(a,b)\,T(a',b') = T(a+a',b+b')$. Da sie von R_α gedreht werden,

$$R_\alpha T(a,b) R_\alpha^{-1} = T(a',b')\ ,\quad \begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}\ , \tag{9.26}$$

so wie die Translationen in der Euklidischen Ebene, ist die Stabilitätsgruppe des lichtartigen Viererimpulses $\underline{p} = (1,1,0,0)$ die Euklidische Gruppe E(2) in zwei Dimensionen. Ebenso erschließt man in D-dimensionalen Raumzeiten, daß E$(D-2)$, die Euklidische Gruppe in $D-2$-Dimensionen, die Stabilitätsgruppe des lichtartigen Viererimpulses $\underline{p} = (1,1,0,\dots)$ ist $(D \geq 3)$.

Jede endlichdimensionale, unitäre Darstellung von E$(D-2)$ stellt die Translationen $T \in$ E$(D-2)$ trivial durch $U(T) = 1$ dar [10]. Die antihermiteschen Erzeugenden der Darstellung von SO$(D-2) \subset$ E$(D-2)$ erfüllen (9.22), wobei der Laufbereich der Indizes $2,\dots,D-1$ ist. Für $D = 4$ sind die irreduziblen Darstellungen von $R_\alpha \in$ SO(2) eindimensional und durch $U(R_\alpha) = e^{-i\,h\,\alpha}$ gegeben. Dabei ist h, die Helizität, ganzzahlig oder, bei Darstellungen der Überlagerungsgruppe halbzahlig.

Auch auf der Massenschale $\mathcal{M}_0$ kann man die räumlichen Impulse außerhalb $\vec{p} = 0$ als Koordinaten verwenden. Allerdings sind nur genügend kleine Koordinatenumgebungen einfach zusammenhängend.

Für $D = 4$ ist auf allen Massenschalen $(p^0)^2 - \vec{p}^{\,2} =$ konst (außerhalb von $(p^0,\vec{p}) = 0$)[1]

$$\tilde{d}p = \frac{d^3p}{(2\pi)^3\, 2\, p^0} \tag{9.27}$$

ein Lorentzinvariantes Maß. Es ist offensichtlich drehinvariant. Unter infinitesimalen, drehungsfreien Lorentztransformationen $L_{\vec{v}}$ (9.7) ändert sich der Viererimpuls um $(\delta p^0, \delta\vec{p}) = (\vec{v}\cdot\vec{p}, \vec{v}\,p^0)$. Dabei transformiert die Dreiform d^3p mit der Determinante der 3×3-Matrix $\frac{\partial p'}{\partial p}$ in erster Ordnung durch $d^3p' = \det \frac{\partial p'}{\partial p}\, d^3p = (1 + \mathrm{tr}\,\frac{\partial \vec{v} p^0}{\partial p})\, d^3p = (1 + \frac{\vec{v}\cdot\vec{p}}{p^0})\, d^3p$, wobei $p^0 = \pm\sqrt{\vec{p}^{\,2} + \text{konst}}$ als Funktion von $\vec{p}$ aufzufassen ist. Diese Änderung von d^3p im Produkt d^3p/p^0 wird von der Änderung von $1/p^0$ aufgehoben, $\delta(p^0)^{-1} = -\vec{v}\cdot\vec{p}/(p^0)^2$. Daher ist (9.27) unter infinitesimalen Lorentztransformationen und folglich auch unter endlichen Transformationen invariant.

Verwenden wir als Koordinaten für die Massenschale von massiven oder masselosen Teilchen die räumlichen Impulse, so ist das invariante Maß explizit (für $m = 0$ sei $\vec{p} \neq 0$)

$$\tilde{d}p = \frac{d^3p}{(2\pi)^3\, 2\,\sqrt{m^2 + \vec{p}^{\,2}}}\ . \tag{9.28}$$

9.3 Induzierte Darstellungen

Ist eine Gruppe G durch Transformationen M_g einer Mannigfaltigkeit $\mathcal{M}$ realisiert und stellt R die Gruppe G durch lineare Transformationen in $\mathbb{C}^d$ dar, so sind die Transfor-

[1] Der Faktor $2(2\pi)^3$ ist weitverbreitete Konvention.

mationen (3.17) [2]

$$(U_g\Psi)(p) = \sum_j \sqrt{\rho_g(x)}\, R(g)\, \Psi(M_g^{-1}p) \tag{9.29}$$

von Wellenfunktionen $\Psi : \mathcal{M} \to \mathbb{C}^d$ unitäre Darstellungen von G.

Solche Darstellungen von G sind normalerweise reduzibel, insbesondere, wenn die Mannigfaltigkeit $\mathcal{M}$ aus mehreren Orbits der Transformationsgruppe G besteht. Denn der Unterraum der Wellenfunktionen, die auf einer Teilmenge der Orbits verschwinden, ist unter U_g invariant. Untersuchen wir eine irreduzible unitäre Darstellung von G auf den Wellenfunktionen einer Mannigfaltigkeit $\mathcal{M}$, so können wir daher unterstellen, daß sie nur aus einem Orbit $\mathcal{M} = \{M_g\underline{p}\,,\ g \in G\}$ besteht, der sich durch Anwenden aller Transformationen M_g auf einen Punkt $\underline{p}$ ergibt.

Dieser Punkt definiert durch die Transformationen, die ihn invariant lassen, seine Stabilitätsgruppe $H = \{h : M_h\underline{p} = \underline{p}\} \subset G$.

Verschiedene Transformationen M_g und $M_{g'}$ ergeben denselben Punkt $M_g\underline{p} = M_{g'}\underline{p}$ genau dann, wenn $g' = gh$ mit $h \in H$ ist. Also gehört zu jedem Punkt des Orbits genau eine Linksnebenklasse gH und die Abbildung $gH \mapsto M_g\underline{p}$, ist bijektiv. Wir können also den Punkt $\underline{p}$ als seine Stabilitätsgruppe H auffassen und jeden anderen Punkt des Orbits als Linksnebenklasse gH. Auf diese Linksnebenklassen wirkt G durch Multiplikation von links, $M_{g'}(gH) = g'gH$.

Für eine unitäre Darstellung von G auf Wellenfunktionen von $\mathcal{M} = G/H$ ist aber nicht erforderlich, daß im d-dimensionalen Bildraum der Wellenfunktionen eine unitäre Darstellung von G existiert. Es reicht eine Wigner-Rotation W, das ist eine Abbildung von $G \times G/H$ in die unitären Abbildungen von d-dimensionalen Vektorräumen, die

$$W(g_2\, g_1, p) = W(g_2, g_1 p) W(g_1, p) \tag{9.30}$$

erfüllt. Die Wignerrotation $W(g,p)$ bildet auf eine mit der Transformationsgruppe verträgliche, invertierbare Art den d-dimensionalen Raum $\mathcal{V}_p$ am Punkt p auf einen d-dimensionalen Raum $\mathcal{V}_{gp}$ am transformierten Punkt gp ab.

Ist W eine Wignerrotation, so ist

$$\big(U_g\Psi\big)(gp) = \rho_g(gp)\, W(g,p)\, \Psi(p) \tag{9.31}$$

eine unitäre Transformation von Wellenfunktionen Ψ, die jeden Punkt $p \in G/H$ auf einen Vektor $\Psi(p) \in \mathcal{V}_p$ abbildet.

Die Transformation U_g stellt $g \in G$ dar: $U_{g_2}U_{g_1} = U_{g_2 g_1}$. Wenn wir zunächst der leichteren Lesbarkeit wegen die Maßfaktoren ρ_g in der folgenden Gleichung unterschlagen, so gilt

$$\begin{aligned}\Big(U_{g_2}\big(U_{g_1}\Psi\big)\Big)(g_2 g_1 p) &= W(g_2, g_1 p)\big(U_{g_1}\Psi\big)(g_1 p) = W(g_2, g_1 p)W(g_1, p)\Psi(p)\\ &= W(g_2 g_1, p)\Psi(p) = \big(U_{g_2 g_1}\Psi\big)(g_2 g_1 p)\ ,\end{aligned} \tag{9.32}$$

[2] Um das Formelbild einfach zu halten, verwenden wir Matrixschreibweise und unterdrücken Indizes, die Komponenten und Matrixelemente numerieren.

und das Produkt der Maßfaktoren erfüllt (3.19)

$$\rho_{g_2g_1}(g_2g_1p) = \rho_{g_2}(g_2g_1p)\,\rho_{g_1}(g_1p)\ . \tag{9.33}$$

Aus (9.30) folgern wir $W(e,p) = 1$ und

$$W(g^{-1},gp)\,W(g,p) = W(e,p) = 1\ ,\ W(g^{-1},gp) = \bigl(W(g,p)\bigr)^{-1}\ . \tag{9.34}$$

Für $h_1, h_2 \in H$ und am Punkt $\underline{p}$ ergibt (9.30), daß

$$w(h) = W(h,\underline{p}) \tag{9.35}$$

eine d-dimensionale, unitäre Darstellung der Stabilitätsgruppe H des Punktes $\underline{p}$ ist,

$$w(h_2)\,w(h_1) = w(h_2h_1)\ . \tag{9.36}$$

Sei nun $U(p)$ an jedem Punkt p eine unitäre Transformation des dortigen Vektorraumes $\mathcal{V}_p$ und sei W eine Wigner-Rotation, dann ist auch die eichtransformierte Wignerrotation

$$W'(g,p) = U(gp)^{-1}W(g,p)U(p) \tag{9.37}$$

eine Wigner-Rotation.

Wählen wir nun mit einer Abbildung $L : G/H \to G$ für jeden Punkt p eine Transformation $L_p \in G$, die $\underline{p}$ auf p abbildet, $L_p\underline{p} = p$, wobei $L_{\underline{p}} = e$ sei. Wählen wir zudem die Eichtransformation $U(p) = W(L_p,\underline{p})$. Dann gilt $U(\underline{p}) = W(e,\underline{p}) = 1$ und die zu $(L_p,\underline{p})$ gehörige Wigner-Rotation wird umgeeicht zu (9.34)

$$W'(L_p,\underline{p}) = \bigl(W(L_p,\underline{p})\bigr)^{-1}W(L_p,\underline{p})1 = 1\ . \tag{9.38}$$

Um den Strich am W zu sparen, unterstellen wir, daß die Eichbedingung $W(L_p,\underline{p}) = 1$ schon gilt. Dann gilt auch $W((L_p)^{-1},p) = 1$ (9.34). Diese Eichung ist mit Parallelverschiebung in Riemann-Normalkoordinaten verwandt, die auf Strahlen vom Ursprung die Komponenten von Vektoren unverändert läßt.

In dieser Eichung besagt (9.30) für die Transformation $L_{gp}^{-1}gL_p$, die $\underline{p}$ auf p, dann auf gp und danach zurück auf $\underline{p}$ abbildet, die also aus der Stabilitätsgruppe H ist,

$$w(L_{gp}^{-1}gL_p) = W(L_{gp}^{-1}gL_p,\underline{p}) = W(L_{gp}^{-1},gp)W(g,p)W(L_p,\underline{p}) = 1\,W(g,p)\,1 \tag{9.39}$$

daß die Wigner-Rotation

$$W(g,p) = w(L_{gp}^{-1}\,g\,L_p) \tag{9.40}$$

durch die unitäre Darstellung w von H gegeben ist. Daß w eine unitäre Darstellung von H ist, sichert umgekehrt, daß $W(g,p) = w(L_{gp}^{-1}gL_p)$ eine Wignerrotation ist (9.30).

Jede unitäre, d-dimensionale Darstellung w der Stabilitätsgruppe H eines Punktes $\underline{p}$ induziert so eine unitäre Darstellung U_g (9.31, 9.40) der Gruppe G auf dem Hilbertraum der d-komponentigen, quadratintegrablen Wellenfunktionen Ψ des Orbits G/H.

9.4 Induzierte Darstellungen der Poincaré-Gruppe

Die Untersuchungen von George Mackey [10] zeigen das

Mackey Theorem: *Jede irreduzible, unitäre Darstellung der eigentlichen Poincarégruppe wirkt in einer geeigneten Basis des Hilbertraumes auf die Wellenfunktionen der Massenschale eines Viererimpulses* $\underline{k}$ *und stellt die Erzeugenden* P^m *der Translationen* T_a *multiplikativ dar*

$$U(T_a) = e^{i\,P\cdot a}\ ,\ \big(P^m\Psi\big)(k) = k^m\Psi(k)\ . \tag{9.41}$$

Die Darstellung der Lorentztransformationen (9.31) ist durch eine irreduzible, unitäre Darstellung w *der Stabilitätsgruppe* H *des Viererimpulses* $\underline{k}$ *induziert (9.40).*

Wir vereinfachen die Transformation der Impulswellenfunktionen der Massenschalen indem wir von ihnen einen Faktor abspalten, so daß das Skalarprodukt die Form

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \sum_i \int \tilde{d}p\ \Phi_i^*(p)\Psi_i(p) \tag{9.42}$$

mit dem Lorentzinvarianten Maß $\tilde{d}p$ (9.27) annimmt. Zwar ist dann (für $m \geq 0$) nicht $\Psi(p)$ sondern $\Psi(p)/\sqrt{(2\pi)^3 2\sqrt{m^2+\vec{p}^{\,2}}}$ der Wert der Impulswellenfunktion, deren Betragsquadrat die Wahrscheinlichkeitsdichte ergibt, das Teilchen mit Impulswert p im Bereich d^3p zu messen. Aber in der unitären Transformation (9.31) erübrigt sich dann der Maßfaktor $\rho_g(p)$.

Das induzierte Transformationsgesetz der Funktionen Ψ unter Lorentztransformationen Λ lautet dann

$$(U_\Lambda\Psi)(\Lambda p) = w(L_{\Lambda p}^{-1}\Lambda L_p)\,\Psi(p)\ . \tag{9.43}$$

Als Transformationen L_p, die den Ruheimpuls $\underline{p} = (m,0,0,0)$ massiver Teilchen auf p abbilden, wählen wir die drehungsfreie Lorentztransformationen L_p (9.7). Sie ist symmetrisch, $(L_p)^T = L_p$, und geht unter der zu Drehungen $D = D^{-1\,T}$ adjungierten Transformation wieder in eine symmetrische Matrix DL_pD^{-1} mit $DL_pD^{-1}\underline{p} = Dp$ über. Also ist $DL_pD^{-1} = L_{Dp}$. Dies kann man auch leicht mit (9.7) nachrechnen.

Aus $DL_p = L_{Dp}D$ folgt dann aber für die von Drehungen $\Lambda = D$ induzierte Wignerrotation,

$$w(L_{Dp}^{-1}DL_p) = w(D)\ , \tag{9.44}$$

daß sie unabhängig von p die d-dimensionale Darstellung $w(D)$ ist.

Die infinitesimalen Transformationen folgen aus $\Lambda = e^{\lambda\omega}$ und $U_\Lambda = e^{\frac{i}{2}\lambda\omega_{mn}M^{mn}}$ durch Ableiten von (9.43) nach λ bei $\lambda = 0$. Die linke Seite ergibt

$$(\delta_\omega p)^i\partial_i\Psi(p) + \frac{i}{2}\omega_{mn}\big(M^{mn}\Psi\big)(p)\ . \tag{9.45}$$

Dabei läuft die Summe des Indexpaares i über drei Koordinaten, mit denen wir die Massenschale parametrisieren. Die Änderungen dieser Koordinaten $(\delta_\omega p)^i$ und die partiellen

Ableitungen ∂_i hängen zwar vom verwendeten Koordinatensystem ab, nicht aber der Differentialoperator $(\delta_\omega p)^i\partial_i$. Er ist das Tangentialvektorfeld an die Kurven $e^{\lambda\omega}p$ durch die Punkte p und ergibt angewendet auf Ψ eine Funktion der Massenschale, deren Wert am Punkt p unabhängig von den Koordinaten ist, mit denen wir p bezeichnen. Als Koordinaten der Massenschale $\mathcal{M}_m$ verwenden wir die räumlichen Impulse $\vec{p} = (p^1, p^2, p^3)$. Sie ändern sich um $(\delta_\omega p)^i = \omega^i{}_j p^j + \omega^i{}_0 p^0$, $p^0 = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$.

Auf die rechte Seite gebracht ergibt der Koeffizientenvergleich bei ω^{ij} und ω^{0i}, $i, j \in \{1, 2, 3\}$, den Ableitungsanteil der Operatoren M_{ij} und M_{0i},

$$i\,M_{ij}\Psi = -\big(p^i\partial_j - p^j\partial_i\big)\Psi + \dots\ ,\ i\,M_{0j}\Psi = \sqrt{m^2 + \vec{p}^{\,2}}\,\partial_j\Psi + \dots\ . \tag{9.46}$$

Die durch Punkte angedeuteten multiplikativen Terme stammen von der Entwicklung von $w(L^{-1}_{\Lambda p}\Lambda L_p)$ und verschwinden bei einem spinlosen Teilchen mit $w = 1$. Mit wenig Aufwand rechnet man nach, daß die Differentialoperatoren auf der rechten Seite die Algebra (9.19) darstellen und bezüglich des Skalarproduktes (9.42) antihermitesch sind, also im Skalarprodukt der Wellenfunktionen partiell integriert werden können.

Schreiben wir Drehungen als $D = e^{\lambda\,\omega}$ und $w(e^{\lambda\omega}) = e^{\frac{\lambda}{2}\omega^{ij}\Sigma_{ij}}$, wobei die Erzeugenden $\Sigma_{ij} = -\Sigma_{ji}$ antihermitesche $d \times d$-Matrizen sind, die der Liealgebra (9.22) genügen, so wirken im Hilbertraum der Wellenfunktionen die antihermiteschen Erzeugenden $i\,M_{ij}$ von Drehungen durch

$$i\,M_{ij}\Psi = -\big(p^i\partial_j - p^j\partial_i\big)\Psi + \Sigma_{ij}\Psi\ . \tag{9.47}$$

Für drehungsfreie Lorentztransformationen $\Lambda = e^{\lambda\omega}$,

$$\omega = \begin{pmatrix} & \vec{v}^{\,T} \\ \vec{v} & \end{pmatrix}\ ,\ \omega^i{}_0 = \omega^0{}_i = v^i\ , \tag{9.48}$$

ist die Ableitung des Arguments $L^{-1}_{\Lambda p}\Lambda L_p$ der Darstellung w nach λ bei $\lambda = 0$ mühsamer. Die Ableitung des mittleren Faktors Λ ergibt nach der Produktregel $L_p^{-1}\omega L_p$. Für die Ableitung von $L^{-1}_{\Lambda p}$ gilt $\partial\big(L^{-1}\big) = -L^{-1}\big(\partial L\big)L^{-1}$. Folglich gilt

$$\partial\big(L^{-1}_{\Lambda p}\Lambda L_p\big) = L_p^{-1}(\omega - (\delta_\omega p)^i\partial_i L_p)L_p\ . \tag{9.49}$$

Wirkt eine Gruppe G als Transformationsgruppe einer Mannigfaltigkeit $\mathcal{M}$ mit mehr als einem Orbit, so sind die Transformationen $\mathrm{Ad}_g : f \mapsto N_g \circ f \circ M_g^{-1}$ (3.15) von Funktionen $f : \mathcal{M} \to \mathcal{N}$ von $\mathcal{M}$ in einen Vektorraum $\mathcal{N}$ nicht irreduzibel, denn die Funktionen, die außerhalb des Orbits verschwinden, bilden einen invarianten Unterraum. Sucht man irreduzible Darstellungen von G, so reicht es daher, Funktionen auf einem Orbit G/H (Seite 32) zu betrachten. Ihnen entsprechen Funktionen von G, die auf Linksnebenklassen konstant sind,

$$g \in G,\ h \in H: \qquad \Psi(gh) = \Psi(g)\ , \tag{9.50}$$

und auf die G durch Linksmultiplikation wirkt, $M_g g' = gg'$. Für solche komplexwertigen Funktionen Ψ definiert die Vorschrift

$$(U_g\Psi)(g') = \Psi(g^{-1}\,g') \tag{9.51}$$

für jedes $g \in G$ eine unitäre Transformation der auf H-Nebenklassen konstanten Funktionen, wenn ihr Skalarprodukt durch

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \int_{G/H} \mu(k)\, \Psi^*(k)\, \Phi(k) \tag{9.52}$$

gegeben ist. Hierbei bezeichne k die Punkte des Orbits und $\mu(k) = \mu(gk)$ ein Maß, das unter den Transformationen invariant ist.

Betrachten wir nun Funktionen von G, die auf den H-Nebenklassen nicht konstant sind, sondern die aus einem Unterraum sind, der unter Rechtsmultiplikation mit $h \in H$ in sich übergeht und

$$\Psi(gh) = \big(R(h)\,\Psi\big)(g) \tag{9.53}$$

erfüllen, wobei $R(h)$ eine unitäre, irreduzible Darstellung von H ist. Die Werte $\Psi(g)$ sind aus (endlichdimensionalen) Hilberträumen $\mathcal{H}_{gH}$, die längs jeder Faser übereinstimmen, aber von Faser zu Faser nur zueinander isomorph sein müssen. Es ist also Ψ ein Schnitt in einem Vektorbündel über G.

Da $R(h)$ unitär ist, ist das $\mathcal{H}_{gH}$-Skalarprodukt der Funktionswerte

$$\big(\Psi(g)|\Phi(g)\big) = \big(\Psi(gh)|\Phi(gh)\big) \tag{9.54}$$

konstant auf jeder Faser, also eine Funktion von G/H. Definieren wir das Skalarprodukt im Raum der Schnitte des Vektorbündels durch

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \int_{G/H} \tilde{\mathrm{d}}k\, \big(\Psi(\sigma(k))|\Phi(\sigma(k))\big)\ , \tag{9.55}$$

so hängt es nicht vom Schnitt σ des Bündels G ab.

Die Bedingung (9.53) ist invariant unter Linksmultiplikation, also definiert

$$(U_g\Psi)(g') = \tag{9.56}$$

9.5 Basiszustände und Wellenfunktionen

Eine unitäre Darstellung der Poincaré-Transformationen im Hilbertraum $\mathcal{H}$ ordnet jeder Transformation $T_{\Lambda,a}$ einen unitären oder antiunitären Operator $U_{\Lambda,a} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ zu, wobei das Produkt der Operatoren hintereinander ausgeführten Poincaré-Transformationen entspricht

$$U_{\Lambda_2,a_2} U_{\Lambda_1,a_1} = U_{\Lambda_2\Lambda_1,a_2+\Lambda_2 a_1}\ . \tag{9.57}$$

Insbesondere gilt $U_{\Lambda,0}U_{1,a}U_{\Lambda^{-1},0} = U_{\Lambda,0}U_{\Lambda^{-1},a} = U_{1,\Lambda a}$ Schreiben wir kürzer für Lorentztransformationen U_Λ statt $U_{\Lambda,0}$ und für Translationen U_a statt $U_{1,a}$, so besagt (9.57) insbesondere

$$U_\Lambda U_a U_\Lambda^{-1} = U_{\Lambda a}\ . \tag{9.58}$$

Da das Produkt von zwei antiunitären Operatoren unitär ist, und da sich jede Translation und jede eigentliche Lorentztransformation als Quadrat schreiben läßt, gehören zu eigentlichen Lorentztransformationen und zu Translationen unitäre Operatoren U_Λ und U_a. Lediglich zur Raumspiegelung $\mathcal{P}$ oder zur Zeitumkehr $\mathcal{T}$ kann ein antiunitärer Operator Π oder T gehören. Wir werden sehen, daß der Paritätsoperator Π unitär und die Zeitspiegelung T antiunitär sein muß.

Da sich Translationen, Drehungen und drehungsfreie Lorentztransformationen als Exponentialreihen schreiben lassen, lassen sich die zugehörigen unitären Operatoren als Exponentialreihe mit hermiteschen Operatoren $P^m = P^{m\,\dagger}$ und $M^{mn} = M^{mn\,\dagger}$, den Erzeugenden von Translationen, Drehungen und drehungsfreien Lorentztransformationen, schreiben[3]

$$U_a = e^{ia\cdot P}\ , \quad U_\Lambda = e^{\frac{i}{2}\omega_{mn}M^{mn}}\ . \tag{9.59}$$

Die Erzeugenden P^i, $i = 1, 2, 3$, der räumlichen Translationen in $a \cdot P = a^0 H - \vec{a}\vec{P}$ sind definitionsgemäß die drei Komponenten des Impulsoperators. Der Hamiltonoperator

$$H = P^0 \tag{9.60}$$

erzeugt die wechselwirkungsfreie Zeitentwicklung.

Aus (9.57) folgt $U_a U_b = U_{a+b} = U_b U_a$. Differenzieren nach a und nach b bei $a = b = 0$ zeigt, daß die Viererimpulsoperatoren miteinander vertauschen,

$$[P^m, P^n] = 0\ . \tag{9.61}$$

In einer geeigneten Basis wirken sie in jeder unitären Darstellung der Poincaré-Gruppe [10] multiplikativ auf (mehrkomponentige) Impulswellenfunktionen Ψ

$$(P^m\Psi)(k) = k^m\Psi(k)\ . \tag{9.62}$$

Ihr Definitionsbereich $\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^4$ ist ein Orbit, der durch Anwenden von Lorentztransformationen Λ auf einen Punkt $\underline{k} \in \mathbb{R}^4$ entsteht, $M_\Lambda \underline{k} = \Lambda\underline{k}$.

Beispielsweise für $\underline{k} = (m, 0, 0, 0)$, $m > 0$, ist $\mathcal{M}$ die Massenschale

$$\mathcal{M}_m = \{k : k^0 = \sqrt{m^2 + \vec{k}^2}\ ,\ \vec{k} \in \mathbb{R}^3\} \tag{9.63}$$

Da $\underline{k}$ unter Drehungen invariant ist, ist $\mathcal{M}_m = SO(1,3)^\uparrow/SO(3)$.

Der Orbit des lichtartigen Vektors $\underline{k} = (1, 1, 0, 0)$ ist der Vorwärtslichtkegel

$$\mathcal{M}_0 = \{k : k^0 = \sqrt{\vec{k}^2}\ ,\ \vec{k} \neq 0\}\ . \tag{9.64}$$

Da die Spitze des Lichtkegels, $k = 0$, nicht zum Orbit gehört, hat er die Topologie $S^2 \times \mathbb{R}$, mit anderen Worten, jeder Impulswert k des masselosen Teilchens hat eine Richtung $\in S^2$ und einen Betrag $|\vec{k}| \neq 0$. Die Stabilitätsgruppe von $\underline{k}$ wird von Matrizen ω mit $(\eta\omega)^T = -\eta\omega$ (9.16) und $\omega\underline{k} = 0$

$$\omega = \begin{pmatrix} & & b & c \\ & & b & c \\ b & -b & & -a \\ c & -c & a & \end{pmatrix}\ , \tag{9.65}$$

[3] Wir verwenden die Einsteinsche Summationskonvention: ein in einem Term doppelt vorkommender Index enthält die Anweisung, über seinen Laufbereich zu summieren.

erzeugt. Für $b = c = 0$ erzeugt ω Drehungen um den Winkel a. Die für $a = 0$ erzeugten Transformationen kommutieren wie Translationen. Die Drehungen um den Winkel a drehen die Vektoren $(b, c) \in \mathbb{R}^2$. Also ist die Stabilitätsgruppe des lichtartigen Vektors $\underline{k}$ die Euklidische Gruppe E(2) der zweidimensionalen Ebene.

Auf dem Vakuumzustand Ω wirkt die Poincaré-Gruppe trivial $U_\Lambda \Omega = \Omega$, $U_a \Omega = \Omega$: das Vakuum ist Poincaré-invariant. Insbesondere ist es daher Eigenzustand des Viererimpulses $P^m \Omega = 0$ mit verschwindenden Impulswerten. In relativistischer Quantenmechanik verschwindet die Vakuumsenergiedichte, auch wenn jedes Lehrbuch der Quantenfeldtheorie dem Rezept der „kanonischen Quantisierung“ folgend unendlich ausrechnet. Dieses Rezept muß man für relativistische Quantenmechanik geeignet abändern, zum Beispiel durch Normalordnung der Operatoren.

In erster Ordnung in a besagt (9.58) $U_\Lambda (P \cdot a) U_\Lambda^{-1} = P \cdot (\Lambda a)$ Dabei ist die linke Seite $(U_\Lambda P U_\Lambda^{-1}) \cdot a$, denn U_Λ ist linear. Die rechte Seite ist $(\Lambda^{-1} P) \cdot a$, denn das Skalarprodukt ist Lorentzinvariant. Da dies identisch in a gilt, besagt der Koeffizientenvergleich

$$U_\Lambda P^m U_\Lambda^{-1} = \Lambda^{-1\,m}{}_n P^n \ . \tag{9.66}$$

Die Koeffizienten $\omega_{mn} = \eta_{ml} \omega^l{}_n = -\omega_{nm}$ sind die Matrixelemente der antisymmetrischen Matrix $\eta\omega$ (9.16), wobei $\Lambda = \mathrm{e}^\omega$ gilt. Wegen $\omega_{mn} = \eta_{ml} \omega^l{}_n = -\omega_{nm}$ gilt auch $M^{mn} = -M^{nm}$, ein eventueller symmetrischer Anteil würde in der Doppelsumme $\omega_{mn} M^{mn}$ nicht beitragen. Die Operatoren M^{0i} erzeugen drehungsfreie Lorentztransformationen, die Operatoren $M^{12} = -J_z$, $M^{23} = -J_x$ und $M^{31} = -J_y$ erzeugen Drehungen und sind definitionsgemäß die drei Komponenten des Drehimpulsoperators $\vec{J}$.

Weil Translationen vertauschen, $U_a U_b = U_{a+b} = U_b U_a$, vertauschen die Komponenten des Viererimpulses

$$[P^m, P^n] = 0 \tag{9.67}$$

und die Operatoren P^m haben gemeinsame Eigenzustände $\chi_{p\sigma}$

$$P^m \chi_{p\sigma} = p^m \chi_{p\sigma} \ , \tag{9.68}$$

die eine Basis des Hilbertraumes aufspannen. Der Index σ ist ein Entartungsindex, den wir im Vorgriff auf das Ergebnis unserer Betrachtung als Spin des Zustandes $\chi_{p\sigma}$ mit Impuls p bezeichnen.

Mit Lorentztransformationen werden Translationen transformiert,

$$U_\Lambda U_a U_\Lambda^{-1} = U_{\Lambda a} \tag{9.69}$$

denn es gilt $U_{\Lambda,0} U_{1,a} U_{\Lambda^{-1},0} \overset{9.57}{=} U_{\Lambda,\Lambda a} U_{\Lambda^{-1},0} \overset{9.57}{=} U_{1,\Lambda a}$, und für den Viererimpuls P folgt $U_\Lambda \mathrm{e}^{\mathrm{i}a \cdot P} U_\Lambda^{-1} = U_{\Lambda a} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\Lambda a) \cdot P} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\Lambda a) \cdot (\Lambda \Lambda^{-1} P)} \overset{9.3}{=} \mathrm{e}^{\mathrm{i}a \cdot (\Lambda^{-1} P)}$. Weil für jede Potenzreihe $U f(P) U^{-1} = f(U P U^{-1})$ gilt, folgt also $\mathrm{e}^{(\mathrm{i}a \cdot U_\Lambda P U_\Lambda^{-1})} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}a \cdot (\Lambda^{-1} P)}$ oder, für die inverse Lorentztransformation ausgeschrieben,

$$U_\Lambda^{-1} P^m U_\Lambda = \Lambda^m{}_n P^n \ . \tag{9.70}$$

Daher ist $U_\Lambda \chi_{p\sigma}$ ein Zustand mit Viererimpuls Λp.

$$P^m(U_\Lambda \chi_{p\sigma}) = U_\Lambda(U_\Lambda^{-1} P^m U_\Lambda)\chi_{p\sigma} = U_\Lambda \Lambda^m{}_n P^n \chi_{p\sigma} = \Lambda^m{}_n p^n (U_\Lambda \chi_{p\sigma}) \qquad (9.71)$$

Im letzten Schritt ist die Eigenwertgleichung (9.68) verwendet worden, und die Multiplikation mit den Zahlen $\Lambda^m{}_n p^n$ ist mit der unitären Transformation U_Λ vertauscht worden. Weil der Zustand $(U_\Lambda \chi_{p\sigma})$ Vierimpuls Λp hat, ist er eine Linearkombination von Basiszuständen mit diesem Impuls

$$U_\Lambda \chi_{p\sigma} = \sum_{\sigma'} \chi_{(\Lambda p)\sigma'} M_{\sigma'\sigma} \qquad (9.72)$$

Wenn es, wie wir im weiteren unterstellen wollen, Zustände $\chi_{\text{Ruhe}\,\sigma}$ gibt, die zu einem ruhenden Teilchen gehören, dessen Energie seine Masse ist, $p^0 = m$, und dessen Impuls $\vec{p} = 0$ verschwindet, dann gibt es auch Zustände $U_{L_{\vec{v}}} \chi_{\text{Ruhe}\,\sigma}$ des bewegten Teilchens mit Energie $p^0 = \frac{m}{\sqrt{1-v^2}}$ und Impuls $\vec{p} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-v^2}}$, $p = (p^0, \vec{p}^{\,T})^T = L_{\vec{v}}(m,0,0,0)^T$, die man durch drehungsfreie Lorentztransformation (9.7) des ruhenden Teilchens erhält. Dabei ist m eine feste Zahl und nicht ein Eigenwert aus einem Kontinuum möglicher Energien, die Mehrteilchenzustände mit verschwindendem Gesamtimpuls $\vec{p}$ haben können. Die möglichen Impulseigenwerte p, die dieses Teilchen haben kann, bilden die Massenschale

$$p^2 = p^{0\,2} - \vec{p}^{\,2} = m^2\ . \qquad (9.73)$$

Auf diesen Einteilchenzuständen wirkt H als der Operator

$$H = P^0 = \sqrt{m^2 + \vec{P}^2}\ . \qquad (9.74)$$

Weil das Spektrum von $\vec{P}$ dreidimensional kontinuierlich ist und die unitären Transformationen U_Λ differenzierbar von Λ abhängen sollen, können die Eigenzustände nicht normierbar sein, sondern müssen kontinuumsnormiert sein. Wir verlangen daher

$$\langle \chi_{p\sigma} | \chi_{p'\sigma'} \rangle = \delta^3(\vec{p} - \vec{p}\,')\delta_{\sigma\sigma'} \qquad (9.75)$$

und setzen aus den Basiszuständen normierbare Wellenpakete zusammen

$$|\Psi\rangle = \sum_\sigma \int d^3p\ |\chi_{p\sigma}\rangle\ \tilde{\psi}_\sigma(\vec{p})\ . \qquad (9.76)$$

Dabei ist $\tilde{\psi}_\sigma(\vec{p})$ die Impulswellenfunktion für Spin σ, das heißt, die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung des Zustandes $|\Psi\rangle$ den Spin σ zu messen und dabei den Impuls $\vec{p}$ in einem Bereich Δ_p zu finden, ist

$$w(\sigma, \Delta_p, \vec{P}, \Psi) = \int_{\Delta_p} d^3p\, |\tilde{\psi}_\sigma(\vec{p})|^2\ . \qquad (9.77)$$

Ist Δ_p eine kleiner Bereich bei $\vec{p}$ von der Größe d^3p, so gilt näherungsweise

$$w(\sigma, \vec{p}, d^3p, \Psi) \approx |\tilde{\psi}_\sigma(\vec{p})|^2\, d^3p\ . \qquad (9.78)$$

Die Ortswellenfunktion $\Psi_\sigma(\vec{x}) = \langle \Lambda_{x\sigma} | \Psi \rangle$ ist das Skalarprodukt des Ortseigenzustandes $\Lambda_{x\sigma}$ mit Spin σ mit dem Zustand Ψ. Es ergibt sich aus den Ortswellenfunktionen der Impulszustände

$$\langle \Lambda_{x\sigma} | \chi_{p\sigma'} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \delta_{\sigma\sigma'} \, e^{i\vec{p}\vec{x}} \tag{9.79}$$

als

$$\psi_\sigma(\vec{x}) = \int d^3p \, \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \, e^{i\vec{p}\vec{x}} \, \tilde{\psi}_\sigma(\vec{p}) \ . \tag{9.80}$$

Daß die Ortswellenfunktion die Fouriertransformierte der Impulswellenfunktion ist (3.59), gilt immer, wenn die Orts- und Impulsoperatoren die Heisenbergschen Vertauschungsrelation $[X^i, P^j] = i\delta^{ij}$ (2.36) erfüllen. Wir verwenden diese Vertauschungsrelation, die daraus folgt, daß $\vec{P}$ Translationen von $\vec{X}$ erzeugt, um den Ortsoperator in relativistischer Quantenmechanik zu definieren.

Es läßt sich in relativistischer Quantenmechanik kein Operator X^0 definieren, der die Zeit mißt und mit den anderen Orts- und Impulsoperatoren Heisenbergsche Vertauschungsrelationen

$$[X^m, P^n] = -i\eta^{mn} \tag{9.81}$$

erfüllt. Solche Relationen sind zwar verträglich damit, daß X und P unter Lorentztransformationen wie Vierervektoren transformieren, sie hätten aber zur Folge, daß das Spektrum von H so wie das Spektrum der Operatoren P_x, P_y und P_z kontinuierlich ist und auch bei festgehaltenen Werten der anderen Impulsoperatoren aus allen reellen Zahlen besteht. Das Spektrum möglicher Energien wäre also nach unten unbeschränkt. Zudem wäre (9.81) unverträglich mit $P^0 = \sqrt{m^2 + \vec{P}^2}$ (9.74), denn jede Funktion von $\vec{P}$ vertauscht mit X^0, wenn X^0 mit $\vec{P}$ vertauscht.

Da kovariante String-Theorien die Relation (9.81) enthalten, sind sie meiner Einschätzung nach physikalisch unhaltbar. Zwar enthalten sie eine Auswahlregel, daß für physikalische Zustände $p^2 = m^2$ gelten muß, wobei für m^2 eine diskrete Menge von Zahlen zulässig ist. Es lassen sich aber aus kontinuumsnormierten Basiszuständen $\langle \chi_p | \chi_{p'} \rangle = \delta^4(p - p')$, wie sie zur Realisierung von (9.81) erforderlich wären, keine normierbaren Wellenpakete zusammensetzen, deren Impulswellenfunktionen $\tilde{\psi}(p)$ nur bei $p^2 = m^2$ von Null verschieden sind: Durch Abändern des Funktionswertes der Wellenfunktion in einzelnen Punkten eines Kontinuums ändert man den Zustand nicht, denn alle Skalarprodukte bleiben unverändert. Folglich gehört eine Wellenfunktion, die nur für $p^2 = m^2$ von Null verschieden ist und im übrigen in einem vierdimensionalen Kontinuum von Impulswerten verschwindet, zum Nullvektor des Hilbertraumes $\mathcal{H}$ und nicht zu einem physikalischen Zustand. Enthielte die Wellenfunktion eine Deltafunktion $\tilde{\psi}(p) = \delta(p^0 - \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}) f(\vec{p})$, so wäre $\langle \Psi | \Psi \rangle$ nicht Null sondern unendlich und gehörte wiederum nicht zu einem physikalischen Zustand.

Das Problem wird von String-Theoretikern ignoriert.

Wegen $H = \sqrt{m^2 + \vec{P}^2}$ (9.74) ist die Zeitentwicklung von Einteilchenzuständen und ihrer Ortswellenfunktion einfach

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_\sigma \int d^3p\, |\chi_{p\sigma}\rangle\, e^{-i\sqrt{m^2+\vec{p}^2}\,t}\, \tilde{\psi}_\sigma(\vec{p})\ , \tag{9.82}$$

$$\psi_\sigma(t,\vec{x}) = \int d^3p\, \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\, e^{i(\vec{p}\vec{x}-\sqrt{m^2+\vec{p}^2}\,t)}\, \tilde{\psi}_\sigma(\vec{p})\ . \tag{9.83}$$

Auch wenn hier $\vec{x}$ und t im Lorentzinvarianten Skalarprodukt $p\cdot x$ auftreten, so haben sie doch wesentlich verschiedene Eigenschaften: $\vec{x}$ sind mögliche Meßwerte von Ortsoperatoren $\vec{X}$, t parametrisiert die Zustände im Ablauf der Zeit. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen mit Spinwert σ in einem örtlichen Bereich Δ zu finden, ist

$$w(\sigma,\Delta,\vec{X},\Psi) = \int_\Delta d^3x\, |\psi_\sigma(t,\vec{x})|^2\ . \tag{9.84}$$

Auch in relativistischer Quantenmechanik sind Ort und Zeit konzeptionell grundverschieden.

Durch inverse Fouriertransformation läßt sich die Impulswellenfunktion durch die Ortswellenfunktion ausdrücken

$$\tilde{\psi}_\sigma(\vec{p}) = \int d^3x\, \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\, e^{-i(\vec{p}\vec{x}-p^0t)}\, \psi_\sigma(t,\vec{x})\ . \tag{9.85}$$

Dies gilt für alle Zeiten t. In (9.83) eingesetzt ergibt sich ($x=(t,\vec{x})$, $y=(y^0,\vec{y})$)

$$\psi_\sigma(x) = \int d^3y\, D(x,y)\, \psi_\sigma(y) \text{ mit } D(x,y) = \int d^3p\, \frac{1}{(2\pi)^3}\, e^{i(\vec{p}(\vec{x}-\vec{y})-\sqrt{m^2+\vec{p}^2}(x^0-y^0))}\ . \tag{9.86}$$

Die Funktion $D(x,y)$ verschwindet nicht, wenn x raumartig zu y liegt. Sie hängt nur von $x-y$ ab und schreibt sich mit dem Lorentzinvarianten Integrationsmaß [6, Kapitel 5.6]

$$\tilde{d}p = \frac{d^3p}{(2\pi)^3 2p^0}\ ,\quad p^0 = \sqrt{m^2+\vec{p}^{\,2}} \tag{9.87}$$

als Ableitung

$$D(x) = \int \tilde{d}p\, 2p^0\, e^{ip\cdot x} = -2i\frac{\partial}{\partial x^0}\int \tilde{d}p\, e^{ip\cdot x}\ . \tag{9.88}$$

Im Anhang A.4 zeigen wir, daß das Integral für große raumartige Abstände r wie e^{-mr} abnimmt.

Daß $D(x)$ für raumartige Abstände nicht verschwindet, besagt nur, daß man in relativistischer Quantenmechanik Zustände höchstens zu einem Zeitpunkt strikt lokalisieren kann. Das Problem ist die Zeitableitung der Ortswellenfunktion. Wenn die Wellenfunktion zu einem Zeitpunkt außerhalb eines Gebietes verschwindet, so ist in diesem Augenblick schon die Zeitableitung der Wellenfunktion auch außerhalb dieses Gebietes von Null verschieden. Könnte man nämlich zu einer Zeit $t=0$ die Ortswellenfunktion $\psi(0,\vec{x})$ und ihre Zeitableitung $\dot{\psi}(0,\vec{x})$ auf ein Gebiet lokalisieren, so wäre $\psi(t,\vec{x})$ eine Lösung der Klein-Gordon-Gleichung $(\Box + m^2)\psi = 0$ mit lokalisierten Anfangsbedingungen, und diese Lösungen verschwinden außerhalb des Vorwärts- und Rückwärtslichtkegels des Lokalisierungsgebietes.

Das Problem der Lokalisierung relativistischer Einteilchenzustände zeigt sich auch beim Wahrscheinlichkeitsstrom. Auch wenn wegen der Schrödingergleichung die Wahrscheinlichkeit erhalten ist, so gehören dennoch zu den Ortswahrscheinlichkeitsdichten

$$\rho_\sigma(t, \vec{x}) = |\psi_\sigma(t, \vec{x})|^2 \tag{9.89}$$

keine lokalen Ströme $\vec{\jmath}_\sigma(t, \vec{x})$, die Kontinuitätsgleichungen $\dot{\rho}_\sigma + \mathrm{div}\vec{\jmath}_\sigma = 0$ erfüllen und zu lokaler Erhaltung von Wahrscheinlichkeiten gehören. Es ist nämlich definitionsgemäß ein lokaler Strom aus den Funktionen $\psi_\sigma(t, x)$, $\psi^*_\sigma(t, x)$ und endlich vielen ihrer Ableitungen gebildet. Er muß, wenn er zu ρ_σ gehört, linear in Ableitungen von ψ_σ und linear in Ableitungen von ψ^*_σ sein und ist dann wegen (9.83) von der Form

$$\vec{\jmath}_\sigma(x) = \int \mathrm{d}^3p'\mathrm{d}^3p\, \frac{1}{(2\pi)^3}\, \mathrm{e}^{-i(p-p')\cdot x}\, \tilde{\psi}^*_\sigma(\vec{p}\,')\, \tilde{\psi}_\sigma(\vec{p})\, \vec{J}_\sigma(\vec{p}\,', \vec{p})\ . \tag{9.90}$$

Der Strom ist lokal und macht nur Gebrauch von endlich vielen Ableitungen von ψ_σ und ψ^*_σ, wenn $\vec{J}_\sigma$ polynomial von $\vec{p}$ und $\vec{p}\,'$ abhängt. Dann ist auch $\mathrm{div}\,\vec{\jmath}_\sigma$ von dieser Form

$$\mathrm{div}\,\vec{\jmath}_\sigma(x) = \int \mathrm{d}^3p'\mathrm{d}^3p\, \frac{\mathrm{i}}{(2\pi)^3}\, \mathrm{e}^{-i(p-p')\cdot x}\, \tilde{\psi}^*_\sigma(\vec{p}\,')\, \tilde{\psi}_\sigma(\vec{p})\, (\vec{p} - \vec{p}\,') \cdot \vec{J}_\sigma(\vec{p}\,', \vec{p}) \tag{9.91}$$

und $(\vec{p} - \vec{p}\,') \cdot \vec{J}_\sigma(\vec{p}\,', \vec{p})$ ist polynomial in $\vec{p}$ und $\vec{p}\,'$. Es ist aber in

$$\dot{\rho}_\sigma(x) = \int \mathrm{d}^3p'\mathrm{d}^3p\, \frac{-\mathrm{i}}{(2\pi)^3}\, \mathrm{e}^{-i(p-p')\cdot x}\, \tilde{\psi}^*_\sigma(\vec{p}\,')\, \tilde{\psi}_\sigma(\vec{p})\, (p^0 - p'^0) \tag{9.92}$$

die Größe $p^0 - p'^0 = \sqrt{m^2 + \vec{p}^{\,2}} - \sqrt{m^2 + \vec{p}\,'^2}$ nichtpolynomial. Der Strom mit

$$\vec{J}_\sigma(\vec{p}, \vec{p}\,') = (\vec{p} + \vec{p}\,')\, \frac{\sqrt{m^2 + \vec{p}^{\,2}} - \sqrt{m^2 + \vec{p}\,'^2}}{\vec{p}^{\,2} - \vec{p}\,'^2} \tag{9.93}$$

erfüllt zwar eine Kontinuitätsgleichung, ist aber nichtlokal.

Diese unausweichlichen Schlußfolgerungen sind hinzunehmen. Genau betrachtet gibt es in der Quantenmechanik keinen Operator im Hilbertraum, der zur Messung eines Wahrscheinlichkeitsstromes gehört. Auch in nichtrelativistischer Quantenmechanik gehört zum Wahrscheinlichkeitsstrom

$$\vec{\jmath} = \frac{\hbar}{2im}(\psi^* \overleftrightarrow{\partial} \psi) = \frac{\hbar}{2im}(\psi^* \vec{\partial}\psi - (\vec{\partial}\psi^*)\psi) \tag{9.94}$$

kein hermitescher Operator. Gemessen werden Impulse, daraus werden Geschwindigkeiten und Ströme rekonstruiert. Die quantenmechanische Impulsmessung aber ist nichtlokal.

9.6 Unitäre Darstellung der Stabilitätsgruppe

Die Untergruppe H_p aller Lorentztransformationen, die einen Impuls p invariant lassen, $H_p = \{\Lambda : \Lambda p = p\}$, nennen wir Stabilitätsgruppe von p oder auch kleine Gruppe.

Weil zu Lorentztransformationen gehörige unitäre Transformationen U_Λ Zustände $\chi_{p\sigma}$ mit Impuls p auf Zustände mit Impuls Λp abbilden (9.72), werden die Unterräume von Zuständen mit festem Impuls p durch die zur Stabilitätsgruppe H_p gehörigen unitären Transformationen auf sich abgebildet.

Die Stabilitätsgruppe des Viererimpulses ruhender Teilchen $\underline{p} = (m, 0, 0, 0)$ besteht aus Drehungen R. Die zugehörigen unitären Transformationen drehen die Basiszustände $\chi_{\text{Ruhe}\,\sigma}$ in Linearkombinationen

$$U_R \chi_{\text{Ruhe}\,\sigma} = \sum_{\sigma'} \chi_{\text{Ruhe}\,\sigma'} D_{\sigma'\sigma}(R) \ . \tag{9.95}$$

Die hierbei auftretenden Entwicklungskoeffizienten $D_{\sigma'\sigma}(R)$ sind die Matrixelemente einer unitären Darstellung der Gruppe der Drehungen! Denn für hintereinander ausgeführte Drehungen gilt

$$\begin{aligned} U_{R_1} U_{R_2} \chi_{\text{Ruhe}\,\sigma} &= U_{R_1} \sum_{\sigma'} \chi_{\text{Ruhe}\,\sigma'} D_{\sigma'\sigma}(R_2) = \sum_{\sigma''\sigma'} \chi_{\text{Ruhe}\,\sigma''} D_{\sigma''\sigma'}(R_1) D_{\sigma'\sigma}(R_2) \\ &= U_{R_1 R_2} \chi_{\text{Ruhe}\,\sigma} = \sum_{\sigma''} \chi_{\text{Ruhe}\,\sigma''} D_{\sigma''\sigma}(R_1 R_2) \ , \end{aligned} \tag{9.96}$$

und $D(R)$ ist folglich eine Darstellung

$$\sum_{\sigma'} D_{\sigma''\sigma'}(R_1) D_{\sigma'\sigma}(R_2) = D_{\sigma''\sigma}(R_1 R_2) \ . \tag{9.97}$$

Die Darstellungsmatrizen $D(R)$ sind unitär, denn U_R ist unitär und läßt Skalarprodukte invariant

$$\begin{aligned} \delta^3(\vec{p}\,')\delta_{\sigma'\sigma} &\overset{9.75}{=} \langle U_R \chi_{p'\sigma'} | U_R \chi_{\text{Ruhe}\,\sigma} \rangle \overset{9.72}{=} \sum_{\nu'\nu} \langle \chi_{Rp'\nu'} | \chi_{\text{Ruhe}\,\nu} \rangle \, M^*_{\nu'\sigma'} D_{\nu\sigma}(R) \\ &= \sum_{\nu'\nu} \delta^3(R\vec{p}\,') \delta_{\nu'\nu} M^*_{\nu'\sigma'} D_{\nu\sigma}(R) \ . \end{aligned} \tag{9.98}$$

Wegen $f(x)\delta(x) = f(0)\delta(x)$ können wir den Faktor bei $\delta^3(R\vec{p}\,')$ bei $\vec{p}\,' = 0$ auswerten. Dort ist $M_{\nu'\sigma'} = D_{\nu'\sigma'}(R)$ (9.95). Zudem ist $\delta^3(R\vec{p}\,') = \delta^3(\vec{p}\,')/|\det R| = \delta^3(\vec{p}\,')$. Vergleichen wir nun die Koeffizienten der Deltafunktion, so lesen wir ab, daß $D_{\nu\sigma}$ Matrixelemente einer Matrix sind, die $D^\dagger D = 1$ erfüllt, also unitär ist

$$\delta_{\sigma'\sigma} = \sum_\nu D^*_{\nu\sigma'}(R) D_{\nu\sigma}(R) = (D^{*\mathrm{T}} D)_{\sigma'\sigma} \ . \tag{9.99}$$

Daß die Darstellung der Drehgruppe unitär sein muß, schränkt sie nicht wesentlich ein. Denn da die Drehgruppe kompakt ist, ist jede ihrer irreduziblen Darstellungen in geeigneter Basis unitär.

Der Unterraum der Zustände des ruhenden Teilchens zerfällt, wie wir mit (2.51) gezeigt haben, in Drehimpulsmultipletts. Da verschiedene Multipletts nicht ineinander transformieren, reicht es, jeweils nur ein Multiplett zu betrachten, also einfachheitshalber zu unterstellen, daß D eine Darstellung mit Spin s ist mit $2s+1$ Basiszuständen. Diese Basiszustände wählen wir als Eigenzustände von J_z und bezeichnen sie mit ihrem Spin in z-Richtung (2.51)

$$J_z \chi_{\text{Ruhe}\,\sigma} = \sigma\, \chi_{\text{Ruhe}\,\sigma} \ , \quad \sigma \in \{s, s-1, \dots, -s\} \ . \tag{9.100}$$

Die Leiteroperatoren $J_\pm = J_x \pm iJ_y$ erhöhen und erniedrigen den Spin in z-Richtung

$$J_\pm\, \chi_{\text{Ruhe}\,\sigma} = \sqrt{(s \mp \sigma)(s \pm \sigma + 1)}\, \chi_{\text{Ruhe}\,\sigma \pm 1} \ . \tag{9.101}$$

Mit $J_x = (J_+ + J_-)/2$ und $J_y = (J_+ - J_-)/(2i)$ läßt sich durch Auswertung der Exponentialreihe $e^{-i\vec{\alpha}\vec{J}}\chi_{\text{Ruhe}\,\sigma} = \sum_{\sigma'} \chi_{\text{Ruhe}\,\sigma'} D_{\sigma'\sigma}(R)$ die Darstellungsmatrix derjenigen Drehung R bestimmen, die um die Achse $\vec{\alpha}/|\vec{\alpha}|$ um den Winkel $|\vec{\alpha}|$ dreht.

9.7 Induzierte Darstellung

Die Darstellung D der Stabilitätsgruppe H_p auf den Zuständen mit einem festen Impuls p induziert die Darstellung U_Λ aller Lorentztransformationen. Sie wirkt auf dem Hilbertraum, der von Zuständen aufgespannt wird, deren Impulse auf der zu p gehörigen Massenschale liegen, also aus p durch Lorentztransformationen hervorgehen.

Um dies zu zeigen, betrachten wir die drehungsfreie Lorentztransformation L_p, die den Viererimpuls $\underline{p} = (m, 0, 0, 0)$ des ruhenden Teilchens auf p abbildet

$$L_p \underline{p} = p \ . \tag{9.102}$$

Sie ist durch $L_{\vec{v}}$ (9.7) mit $\vec{v} = \vec{p}/p^0$ gegeben. In einer Zerlegung in $(1+3)\times(1+3)$-Blöcke ist sie

$$L_p = \frac{1}{m}\begin{pmatrix} p^0 & p^j \\ p^i & m\delta^{ij} + \frac{p^i p^j}{p^0 + m} \end{pmatrix} \ , \text{ wobei } p^0 = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2} \ . \tag{9.103}$$

Hierbei zählen i und j, $i, j \in \{1, 2, 3\}$, die räumlichen Zeilen und Spalten ab. Eine Drehung R hat in derselben Zerlegung die Form

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \hat{R} \end{pmatrix} \ , \quad R^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \hat{R}^T \end{pmatrix} \ , \tag{9.104}$$

wobei $\hat{R}$ eine dreidimensionale Drehung ist, $\hat{R}^T = \hat{R}^{-1}$. Man rechnet elementar nach

$$R L_p R^{-1} = L_{Rp} \ . \tag{9.105}$$

Der zur Lorentztransformation L_p gehörige Operator U_{L_p} transformiert die Basis $\chi_{\text{Ruhe}\,\sigma}$ der Zustände in Ruhe in eine Basis der Zustände mit Impuls p. Wir denken uns die Basis $\chi_{p\sigma}$ schon so gewählt, daß sie bis auf positive Normierungsfaktoren $N(p,\sigma)$ mit $U_{L_p}\chi_{\text{Ruhe}\,\sigma}$ übereinstimmt

$$\chi_{p\sigma} = N(p,\sigma)U_{L_p}\chi_{\text{Ruhe}\,\sigma} \ . \tag{9.106}$$

Jede eigentliche Lorentztransformation Λ, angewendet auf eine drehungsfreie Lorentztransformation L_p, läßt sich als drehungsfreie Lorentztransformation $L_{\Lambda p}$, angewendet auf eine Drehung $W(\Lambda,p)$, schreiben,

$$U_\Lambda U_{L_p} = U_{L_{\Lambda p}} {U_{L_{\Lambda p}}}^{-1} U_\Lambda U_{L_p} = U_{L_{\Lambda p}} U_W \quad \text{mit} \quad W(\Lambda,p) = {L_{\Lambda p}}^{-1}\Lambda L_p \ . \tag{9.107}$$

Denn $W(\Lambda,p)$ ist eine Lorentztransformation, die $\underline{p}$ zunächst mit L_p auf p abbildet, dann auf Λp und schließlich drehungsfrei mit $L^{-1}_{\Lambda p}$ zurück auf $\underline{p}$. Sie läßt also $\underline{p}$ invariant und ist eine Drehung, die sogenannte Wigner-Rotation. Folglich wirkt jede eigentliche Lorentztransformation durch

$$\begin{aligned} U_\Lambda \chi_{p\sigma} &= N(p,\sigma)U_\Lambda U_{L_p}\chi_{\text{Ruhe}\,\sigma} = N(p,\sigma)U_{L_{\Lambda p}}U_W\chi_{\text{Ruhe}\,\sigma} \\ &\overset{9.95}{=} N(p,\sigma)U_{L_{\Lambda p}}\sum_{\sigma'}\chi_{\text{Ruhe}\,\sigma'}D_{\sigma'\sigma}(W) \overset{9.106}{=} \sum_{\sigma'}\frac{N(p,\sigma)}{N(\Lambda p,\sigma')}\chi_{\Lambda p\,\sigma'}D_{\sigma'\sigma}(W(\Lambda,p)) \ . \end{aligned} \tag{9.108}$$

Aus der Normierungsbedingung (9.75) folgen die Normierungsfaktoren $N(p,\sigma)$,

$$\begin{aligned} \delta^3(\vec q - \vec p)\delta_{\nu\sigma} &= \langle\chi_{q\nu}|\chi_{p\sigma}\rangle = \left\langle\chi_{q\nu}\middle|U_{L_p}\chi_{\text{Ruhe}\,\sigma}\right\rangle N(p,\sigma) = N(p,\sigma)\left\langle {U_{L_p}}^{-1}\chi_{q\nu}\middle|\chi_{\text{Ruhe}\,\sigma}\right\rangle \\ &= \sum_{\nu'}\frac{N(p,\sigma)N(q,\nu)}{N(L_p^{-1}q,\nu')}\left\langle\chi_{L_p^{-1}q\nu'}\middle|\chi_{\text{Ruhe}\,\sigma}\right\rangle D^*_{\nu'\nu}(W(L_p^{-1},q)) \\ &= \delta^3(\overrightarrow{L_p^{-1}q})\frac{N(p,\sigma)N(q,\nu)}{N(L_p^{-1}q,\nu)}D^*_{\sigma\nu}(W(L_p^{-1},q)) \ . \end{aligned} \tag{9.109}$$

Wegen $f(x)\delta(x) = f(0)\delta(x)$ kann der Faktor bei der δ-Funktion dort ausgewertet werden, wo $\overrightarrow{L_p^{-1}q}$ verschwindet, also bei $q = p$. Dort ist die Wigner-Rotation $W(L_p^{-1},q)$ wegen $L_p^{-1}p = \underline{p}$ die Identität, $L_{L_p^{-1}p}L_p^{-1}L_p = L_{L_p^{-1}p} = L_{\underline{p}} = \mathbf{1}$, nämlich diejenige drehungsfreie Lorentztransformation, die $\underline{p}$ auf sich abbildet. Sie wird durch $D(1) = 1$ dargestellt, $D^*_{\sigma\nu}(W(L_p^{-1},p)) = \delta_{\sigma\nu}$.

Die Normierungsfaktoren vereinfachen sich bei $q = p$ zu $N(p,\sigma)^2$, denn $N(\underline{p},\nu) = 1$.

Vom Argument der δ-Funktion ziehen wir $\vec 0 = \vec{\underline{p}} = \overrightarrow{L_p^{-1}p}$ ab

$$\delta^3(\overrightarrow{L_p^{-1}q} - \overrightarrow{L_p^{-1}p}) = \delta^3(\overrightarrow{L_p^{-1}(q-p)}) = \frac{1}{|\det J|}\delta^3(\vec q - \vec p) \tag{9.110}$$

Dabei ist J die 3×3-Matrix der partiellen Ableitungen von $\overrightarrow{L_p^{-1}q}$ (9.103),

$$(L_p^{-1}q)^i = -\frac{p^i}{m}\sqrt{m^2+\vec q^{\,2}} + q^i + \frac{p^i}{(p^0+m)}\vec q\vec p \ , \tag{9.111}$$

nach den Komponenten von $\vec{q}$ bei $q = p$. Sie hat die Matrixelemente

$$J^i{}_j = \delta^i{}_j - \frac{p^i p^j}{p^0(p^0 + m)} \ . \tag{9.112}$$

Ihre Determinante ist das Produkt ihrer Eigenwerte. Von denen sind zwei 1, denn Vektoren, die senkrecht auf $\vec{p}$ stehen, werden durch J auf sich abgebildet. Zudem ist $\vec{p}$ Eigenvektor, $J\vec{p} = -\frac{m}{p^0}\vec{p}$. Die Determinante von J hat also den Betrag $\frac{m}{p^0}$.

Für $N(p, \sigma)$ erhalten wir schließlich

$$N(p, \sigma) = \sqrt{\frac{m}{p^0}} \ . \tag{9.113}$$

Die Wirkung von eigentlichen Lorentztransformationen und Translationen auf Einteilchenzuständen,

$$U_\Lambda \chi_{p\sigma} = \sqrt{\frac{(\Lambda p)^0}{p^0}} \sum_{\sigma'} \chi_{\Lambda p\,\sigma'} D_{\sigma'\sigma}(W(\Lambda, p)) \ , \quad U_a \chi_{p\sigma} = e^{-ia\cdot p} \chi_{p\sigma} \ , \tag{9.114}$$

ist, wie behauptet, vollständig durch die Masse und den Spin des Teilchens festgelegt.

Wegen (9.105) ist die Wigner-Rotation, die zu einer Drehung R gehört, unabhängig von p und einfach R selbst

$$W(R, p) = L_{Rp}{}^{-1} R L_p = L_{Rp}{}^{-1} (R L_p R^{-1}) R = L_{Rp}{}^{-1} L_{Rp} R = R \ , \tag{9.115}$$

und die Wirkung von Drehungen R auf Basiszustände vereinfacht sich zu

$$U_R \chi_{p\,\sigma} = \sum_{\sigma'} \chi_{Rp\,\sigma'} D_{\sigma'\sigma}(R) \ , \tag{9.116}$$

sie dreht Spin und Impuls, gehört also zum Gesamtdrehimpuls.

Die Ortswellenfunktionen $\psi_\sigma(t, \vec{x}) = \langle \Lambda_{\vec{x}\,\sigma} | \Psi(t) \rangle$ normierbarer Wellenpakete (9.76)

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_\sigma \int d^3p \ |\chi_{p\,\sigma}\rangle \ \tilde{\psi}_\sigma(p) \, e^{-ip^0 t} \tag{9.117}$$

werden unabhängig vom Spin durch Translation verschoben

$$\begin{aligned} |U_a \Psi(t)\rangle &= \sum_\sigma \int d^3p \ |\chi_{p\,\sigma}\rangle \ \tilde{\psi}_\sigma(p) \, e^{ip\cdot a} \, e^{-ip^0 t} \ , \\ (U_a \psi)_\sigma(t, \vec{x}) &= \int d^3p \, \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \, e^{i\vec{p}\vec{x}} \, \tilde{\psi}_\sigma(p) \, e^{ip\cdot a} e^{-ip^0 t} = \psi_\sigma(t - a^0, \vec{x} - \vec{a}) \end{aligned} \tag{9.118}$$

und durch Drehungen R im Spin und Ort gedreht

$$\begin{aligned} |U_R \Psi(t)\rangle &= \sum_{\sigma'\sigma} \int d^3p \ |\chi_{Rp\,\sigma'}\rangle \ D_{\sigma'\sigma}(R) \, \tilde{\psi}_\sigma(p) \, e^{-ip^0 t} \ , \\ (U_R \psi)_{\sigma'}(t, \vec{x}) &= \sum_\sigma D_{\sigma'\sigma}(R) \int d^3p \, \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \, e^{i(R\vec{p})\vec{x}} \, \tilde{\psi}_\sigma(p) \, e^{-ip^0 t} \\ &= \sum_\sigma D_{\sigma'\sigma}(R) \, \psi_\sigma(t, R^{-1}\vec{x}) \ , \end{aligned} \tag{9.119}$$

wobei wir verwendet haben, daß sich das Skalarprodukt unter Drehungen nicht ändert $(R\vec{p})\vec{x} = (R\vec{p})(RR^{-1}\vec{x}) = \vec{p}(R^{-1}\vec{x})$.

Unter Lorentztransformationen transformieren die Ortswellenfunktionen nicht als Felder,

$$(U_\Lambda \psi)_\sigma(\Lambda x) \neq \sum_{\sigma'} D_{\sigma\sigma'}(\Lambda)\psi_{\sigma'}(x) \ , \tag{9.120}$$

wobei $D(\Lambda)$ Darstellungen der Lorentzgruppe sind, sondern nichtlokal. Um dies zu zeigen, unterstellen wir, daß es sich bei den Darstellungsmatrizen D der Drehgruppe, die bisher auftraten, um die Einschränkung einer Darstellung der Lorentzgruppe auf die Untergruppe der Drehungen handelt und schreiben den Einteilchenzustand

$$\Psi = \sum_\sigma \int d^3p\, \chi_{p,\sigma}\, \tilde{\psi}_\sigma(p) = \sum_{\sigma\sigma'} \int \tilde{d}p\, \hat{\chi}_{p,\sigma}\, D^{-1}_{\sigma\sigma'}(L_p)\, \breve{\psi}_{\sigma'}(p) \tag{9.121}$$

mit dem Lorentzinvarianten Maß $\tilde{d}p$ (9.87) nach Abspalten der Matrixelementen $D^{-1}_{\sigma\sigma'}(L_p)$ als Superposition reskalierter Basiszustände

$$\hat{\chi}_{p,\sigma} = \sqrt{(2\pi)^3 2p^0}\, \chi_{p,\sigma} \ , \quad \langle \hat{\chi}_{p',\sigma'} | \hat{\chi}_{p,\sigma} \rangle = (2\pi)^3\, 2p^0\, \delta^3(\vec{p}\,' - \vec{p})\, \delta_{\sigma'\sigma} \ , \tag{9.122}$$

die einfacher transformieren

$$U_\Lambda \hat{\chi}_{p,\sigma} = \sum_{\sigma'} \hat{\chi}_{\Lambda p,\sigma'}\, D_{\sigma'\sigma}(W(\Lambda, p)) \ . \tag{9.123}$$

Damit ist Ψ durch Koeffizientenfunktionen

$$\breve{\psi}_\sigma(p) = \sum_{\sigma'} \sqrt{(2\pi)^3 2p^0}\, D_{\sigma\sigma'}(L_p)\tilde{\psi}_{\sigma'}(p) \ , \tag{9.124}$$

ausgedrückt, die wie Felder transformieren,

$$U_\Lambda \Psi = \sum_{\sigma\sigma'\sigma''} \int \tilde{d}p\, \hat{\chi}_{\Lambda p,\sigma}\, D_{\sigma\sigma'}(W(\Lambda, p))\, D^{-1}_{\sigma'\sigma''}(L_p)\, \breve{\psi}_{\sigma''}(p) \ . \tag{9.125}$$

Das Produkt der Darstellungsmatrizen ist nach Definition der Wignerrotation gleich $D(L^{-1}_{\Lambda p})\, D(\Lambda)$. Integrieren wir statt über p über $p' = \Lambda p$, so ändert sich das Integrationsmaß nicht, und wir erhalten, wenn wir zudem den Strich $'$ weglassen,

$$U_\Lambda \Psi = \sum_{\sigma\sigma'\sigma''} \int \tilde{d}p\, \hat{\chi}_{p,\sigma}\, D_{\sigma\sigma'}(L_p^{-1})\, D_{\sigma'\sigma''}(\Lambda)\, \breve{\psi}_{\sigma''}(\Lambda^{-1}p) \ , \tag{9.126}$$

woraus wir das Transformationsgesetz der Koeffizientenfunktion ablesen

$$(U_\Lambda \breve{\psi})_\sigma(p) = \sum_{\sigma'} D_{\sigma\sigma'}(\Lambda)\, \breve{\psi}_{\sigma'}(\Lambda^{-1}p) \ . \tag{9.127}$$

Die Fouriertransformierte Koeffizientenfunktion

$$\breve{\psi}_\sigma(x) = \int \tilde{d}p\, e^{-ip\cdot x}\, \breve{\psi}_\sigma(p) \tag{9.128}$$

transformiert folglich lokal,

$$(U_\Lambda \check{\psi})_\sigma(x) = \sum_{\sigma'} D_{\sigma\sigma'}(\Lambda)\, \check{\psi}_{\sigma'}(\Lambda^{-1}x)\ . \tag{9.129}$$

Aber sie ist nicht die Ortswellenfunktion (9.83), sondern die Ortswellenfunktion ist die Fouriertransformierte der Impulswellenfunktion $\tilde{\psi}$

$$\psi_\sigma(t,x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^{3/2}}\, e^{-ip\cdot x}\, \tilde{\psi}_\sigma(p) = \int \tilde{d}p\, e^{-ip\cdot x}\, \sqrt{2p^0}\, D^{-1}_{\sigma\sigma'}(L_p)\, \check{\psi}_{\sigma'}(p) \tag{9.130}$$

also die Fouriertransformierte eines Produktes und demnach ein Faltungsintegral der lokal transformierenden Funktionen $\check{\psi}_{\sigma'}(x)$ mit den Fouriertransformierten der Funktionen $\sqrt{2p^0}\, D^{-1}_{\sigma\sigma'}(L_p)$.

9.8 Quantenfeldtheorie

Wenn es Operatoren $\phi(x)$ mit dem Transformationsgesetz von Feldern

$$U_{\Lambda,a}\Phi_\alpha(x)U^{-1}_{\Lambda,a} = D_{\alpha\beta}(\Lambda^{-1})\,\Phi_\beta(\Lambda x + a) \tag{9.131}$$

gibt, wobei $U_{\Lambda,a}$ die unitären Operatoren im Hilbertraum sind, die die Poincaré-Gruppe darstellen und $D(\lambda)$ eine Matrixdarstellung der Lorentzgruppe ist, dann folgt schon aus diesem Transformationsgesetz, daß die Felder $\phi_\alpha(x)$ Teilchen erzeugen und vernichten. Um dies einzusehen, betrachten wir Translationen $U_a = e^{iPa}$

$$e^{iPa}\phi_\alpha(x)e^{-iPa} = \phi_\alpha(x+a) \tag{9.132}$$

in erster Ordnung in a oder, gleichwertig, die Ableitung nach a^m bei $a = 0$,

$$[iP_m, \phi_\alpha(x)] = \partial_m\phi_\alpha(x)\ . \tag{9.133}$$

Für die Fourierzerlegung

$$\phi_\alpha(x) = \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4}\, e^{iq\cdot x}\, \tilde{\phi}_\alpha(q) \tag{9.134}$$

besagt dies

$$\int \frac{d^4q}{(2\pi)^4}\, e^{iqx}[iP_m, \tilde{\phi}_\alpha(q)] = \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4}\, e^{iqx}(iq_m)\tilde{\phi}_\alpha(q)\ , \tag{9.135}$$

denn sowohl der Kommutator als auch die partielle Ableitung wirken linear und können unter das Integral gezogen werden. Beide Fourierintegrale sind gleich, wenn die Fouriertransformierten gleich sind, also gilt

$$[P_m, \tilde{\phi}_\alpha(q)] = q_m\tilde{\phi}_\alpha(q)\ . \tag{9.136}$$

Demnach sind $\tilde{\phi}_\alpha(q)$ Operatoren, die auf einen Impulseigenzustand χ_p angewendet, $P_m\chi_p = p_m\chi_p$, einen Eigenzustand mit Eigenwert $p_m + q_m$ ergeben, wenn $\tilde{\phi}_\alpha(q)\chi_p$ nicht verschwindet,

$$P_m\tilde{\phi}_\alpha(q)\chi_p = ([P_m, \tilde{\phi}_\alpha(q)] + \tilde{\phi}_\alpha(q)P_m)\chi_p = (q_m + p_m)\tilde{\phi}_\alpha(q)\chi_p \ . \tag{9.137}$$

Wie Adjungieren von (9.136) zeigt, $[P_m, (\tilde{\phi}_\alpha(q))^\dagger] = -q_m(\tilde{\phi}_\alpha(q))^\dagger$, ist $(\tilde{\phi}_\alpha(q))^\dagger\chi_p$ Null oder ein Zustand mit Viererimpuls $p - q$.

Solche Operatoren können beispielsweise in einem Hilbertraum wirken, der einen Poincaré-invarianten Zustand, das Vakuum Ω enthält,

$$U_{\Lambda,a}\Omega = \Omega \ , \quad P_m\Omega = 0 \ , \quad M_{mn}\Omega = 0 \ , \quad \langle\Omega|\Omega\rangle = 1 \ , \tag{9.138}$$

und Einteilchenzustände einer Masse m, ${p^0}^2 - {p^1}^2 - {p^2}^2 - {p^3}^2 = m^2$. In einem solchen Raum ergibt $\tilde{\phi}_\alpha(p)$, angewendet auf das Vakuum, einen Zustand mit Viererimpuls p, der nur dann von Null verschieden ist, wenn p der Viererimpuls eines Teilchens ist. Auf einen Einteilchenzustand angewendet ergibt $\big(\tilde{\phi}_\alpha(p)\big)^\dagger$ das Vakuum, wenn $-p$ der Viererimpuls des Teilchens ist. Wir betrachten daher Felder, deren Fourierzerlegung nur für $p^2 = m^2$ von Null verschieden ist und die demnach die Form haben

$$\phi_\alpha(x) = \int \tilde{d}p \big(e^{ipx}\,\tilde{\phi}^-_\alpha(p) + e^{-ipx}\,\tilde{\phi}^+_\alpha(p)\big) \ . \tag{9.139}$$

Hierbei ist $\tilde{d}p = d^3p/((2\pi)^3 2p^0)$ mit $p^0 = \sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$ das Lorentzinvariante Maß (9.87).

Der Anteil

$$\phi^+_\alpha(x) = \int \tilde{d}p\, e^{-ipx}\,\tilde{\phi}^+_\alpha(p) \tag{9.140}$$

besteht aus ebenen Wellen $\exp(-ipx) = \exp(i(\vec{k}\vec{x} - \omega t))$ mit positiver Frequenz $\omega = p^0$ und heißt daher positiver Frequenzanteil von $\phi_\alpha(x)$. Der Anteil

$$\phi^-_\alpha(x) = \int \tilde{d}p\, e^{ipx}\,\tilde{\phi}^-_\alpha(p) \tag{9.141}$$

ist der negative Frequenzanteil. Auf das Vakuum angewendet fügen die Operatoren $\tilde{\phi}^-_\alpha(p)$ Impuls $\vec{p}$ und Energie $\sqrt{m^2 + \vec{p}^2}$ hinzu, sie erzeugen Teilchen mit Impuls $\vec{p}$ und Energie p^0 . Die Operatoren $\tilde{\phi}^+_\alpha(p)$ sind Vernichtungsoperatoren, die, auf Teilchen mit Impuls $\vec{p}$ und Energie p^0 angewendet, das Vakuum ergeben, denn sie vermindern die Energie. Diese Operatoren können nicht als Erzeugungsoperator von Teilchen mit Impuls $-\vec{p}$ und Energie $-p^0$ mißdeutet werden, denn das Vakuum ist nach Annahme der Zustand niedrigster Energie, es gibt keine Teilchen mit negativer Energie.

Da die Operatoren $\phi_\alpha(x)$ nur aus ebenen Wellen $\exp \pm ipx$ mit $p^2 = m^2$ bestehen, erfüllen sie die Klein-Gordon-Gleichung

$$(\Box + m^2)\phi_\alpha(x) = 0 \ . \tag{9.142}$$

Umgekehrt gibt (9.139) alle Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung, die man als Fourierintegral schreiben kann.

Das Feldtransformationsgesetz (9.131) legt fest, wie die Fourierkomponenten transformieren

$$\begin{aligned} U_\Lambda \phi_\alpha(x) U_\Lambda^{-1} &= \int \tilde{d}p \left(e^{-ipx}\, U_\Lambda \tilde{\phi}^+_\alpha(p) U_\Lambda^{-1} + e^{ipx}\, U_\Lambda \tilde{\phi}^-_\alpha(p) U_\Lambda^{-1} \right) \\ &= \sum_\beta D_{\alpha\beta}(\Lambda^{-1})\, \phi_\beta(\Lambda x) = \sum_\beta D_{\alpha\beta}(\Lambda^{-1}) \int \tilde{d}p \left(e^{-ip\Lambda x}\, \tilde{\phi}^+_\beta(p) + e^{ip\Lambda x}\, \tilde{\phi}^-_\beta(p) \right) . \end{aligned} \tag{9.143}$$

Schreiben wir die Integrationsvariable als $p = \Lambda p'$, verwenden wir, daß das Maß und Skalarprodukte Lorentzinvariant sind, $\tilde{d}p = \tilde{d}p'$, $p\,\Lambda x = p' x$, und lassen wir schließlich den Strich $'$ an der Integrationsvariablen weg, so heißt dies

$$\begin{aligned} &\int \tilde{d}p \left(e^{-ipx}\, U_\Lambda \tilde{\phi}^+_\alpha(p) U_\Lambda^{-1} + e^{ipx}\, U_\Lambda \tilde{\phi}^-_\alpha(p) U_\Lambda^{-1} \right) \\ &= \sum_\beta D_{\alpha\beta}(\Lambda^{-1}) \int \tilde{d}p \left(e^{-ipx}\, \tilde{\phi}^+_\beta(\Lambda p) + e^{ipx}\, \tilde{\phi}^-_\beta(\Lambda p) \right) , \end{aligned} \tag{9.144}$$

also, da die Integrale nur übereinstimmen, wenn die Integranden gleich sind,

$$U_\Lambda \tilde{\phi}^+_\alpha(p) U_\Lambda^{-1} = \sum_\beta D_{\alpha\beta}(\Lambda^{-1})\, \tilde{\phi}^+_\beta(\Lambda p) , \quad U_\Lambda \tilde{\phi}^-_\alpha(p) U_\Lambda^{-1} = \sum_\beta D_{\alpha\beta}(\Lambda^{-1})\, \tilde{\phi}^-_\beta(\Lambda p) . \tag{9.145}$$

Hermitesches Adjungieren zeigt, daß die Erzeuger $(\tilde{\phi}^+_\alpha(p))^\dagger$ mit der konjugiert komplexen Darstellung D^* transformieren

$$U_\Lambda (\tilde{\phi}^+_\alpha(p))^\dagger U_\Lambda^{-1} = \sum_\beta D^*_{\alpha\beta}(\Lambda^{-1})\, (\tilde{\phi}^+_\beta(\Lambda p))^\dagger . \tag{9.146}$$

9.9 Zeitumkehr und Raumspiegelung

Die Zeitumkehr muß, wenn überhaupt, im Hilbertraum als antiunitäre Operation T realisiert sein, wenn der Hamiltonoperator ein nach unten beschränktes und nach oben unbeschränktes Spektrum hat.

Wegen (9.69) gilt nämlich

$$T U_a T^{-1} = U_{\mathcal{T}a} , \quad T e^{ia\cdot P} T^{-1} = e^{T(ia\cdot P)T^{-1}} = e^{i(\mathcal{T}a)\cdot P} = e^{ia\cdot(\mathcal{T}P)} \tag{9.147}$$

also

$$T(iP^0)T^{-1} = -iP^0 , \quad T(i\vec{P})T^{-1} = i\vec{P} . \tag{9.148}$$

Falls nun T linear wäre, würde $TP^0T^{-1} = -P^0$ folgen. Zu jedem Energieeigenzustand χ_E mit Energie E, $P^0\chi_E = E\chi_E$, gäbe es dann den Zustand $T\chi_E$ mit Energie $-E$.

$$P^0(T\chi_E) = -(TP^0T^{-1})(T\chi_E) = -TP^0\chi_E = -E(T\chi_E) \tag{9.149}$$

Wenn das Energiespektrum nicht spiegelsymmetrisch zu Null ist, wie das in allen physikalisch akzeptablen Theorien der Fall ist, so ist T antilinear

$$\mathsf{T}(c\Psi) = c^*(\mathsf{T}\Psi)\ , \quad \forall c \in \mathbb{C}\ \forall \Psi \in \mathcal{H}\ . \tag{9.150}$$

und erfüllt in relativistischer Quantenmechanik

$$\mathsf{T}P^0\mathsf{T}^{-1} = P^0\ , \mathsf{T}\vec{P}\mathsf{T}^{-1} = -\vec{P}\ . \tag{9.151}$$

Die Zeitumkehr dreht also Impulse um und läßt Energien unverändert.

Wegen $U_{\Lambda_1}U_{\Lambda_2} = U_{\Lambda_1\Lambda_2}$ folgt $\mathsf{T}U_\Lambda\mathsf{T}^{-1} = U_{\mathcal{T}\Lambda\mathcal{T}^{-1}}$ und damit das Transformationsverhalten der Erzeugenden M^{0i} und M^{ij} von drehungsfreien Lorentztransformationen und Drehungen. In beiden Fällen ist $U_\Lambda = e^{\frac{i}{2}\omega_{mn}M^{mn}}$ wobei Λ die Matrix e^ω ist. Einerseits gilt $\mathcal{T}\Lambda\mathcal{T}^{-1} = e^{\mathcal{T}\omega\mathcal{T}^{-1}} = e^{(\omega^t)}$ mit $\omega^t_{0i} = -\omega_{0i}$ und $\omega^t_{ij} = \omega_{ij}$ und andererseits $\mathsf{T}e^{\frac{i}{2}\omega_{mn}M^{mn}}\mathsf{T}^{-1} = e^{\mathsf{T}\frac{i}{2}\omega_{mn}M^{mn}\mathsf{T}^{-1}} = e^{-\frac{i}{2}\omega_{mn}\mathsf{T}M^{mn}\mathsf{T}^{-1}}$, da T antilinear ist, und folglich

$$\mathsf{T}M^{0i}\mathsf{T}^{-1} = M^{0i}\ , \quad \mathsf{T}M^{ij}\mathsf{T}^{-1} = -M^{ij}\ . \tag{9.152}$$

Es werden also Spins umgedreht, nicht aber Schübe (boosts). Daß die Geschwindigkeit von drehungsfreien Lorentztransformationen $L_{\vec{v}}$ umgedreht wird, folgt aus der Antilinearität von T.

unvollständig

Anhang

A Anhang

A.1 $\lim_{\epsilon\to 0+}\frac{1}{x+\mathrm{i}\,\epsilon} = \mathrm{PV}\,\frac{1}{x} - \mathrm{i}\pi\delta(x)$

Um den Grenzwert $\lim_{\epsilon\to 0+}\frac{1}{x+\mathrm{i}\,\epsilon}$ zu untersuchen, wenden wir $\frac{1}{x+\mathrm{i}\,\epsilon} = \frac{x-\mathrm{i}\,\epsilon}{x^2+\epsilon^2}$ auf eine reelle Testfunktionen $t(x)$ an.

Der Imaginärteil wird durch Variablensubstitution identifiziert.

$$\int\!\mathrm{d}x\, t(x)\,\frac{-\epsilon}{x^2+\epsilon^2} = -\int\!\frac{\mathrm{d}x}{\epsilon}\, t(\epsilon\frac{x}{\epsilon})\,\frac{1}{1+\left(\frac{x}{\epsilon}\right)^2} = -\mathrm{sign}(\epsilon)\int\!\mathrm{d}x\, t(\epsilon x)\,\frac{1}{1+x^2}$$

Bei stetigen, beschränkten Testfunktionen $t(x)$ strebt dies für $\epsilon \to 0+$ gegen

$$-t(0)\int\!\frac{\mathrm{d}x}{1+x^2} = -\pi\, t(0) = -\int\!\mathrm{d}x\, t(x)\,\pi\delta(x)\ . \tag{A.1}$$

Der Realteil $\frac{x}{x^2+\epsilon^2}$ 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.

$$t(x) - t(-x) = 2x\,\hat{t}(x) \tag{A.2}$$

$$\begin{aligned}
\int\!\mathrm{d}x\, t(x)\,\frac{x}{x^2+\epsilon^2} &= \int\!\mathrm{d}x\,\frac{1}{2}\,\frac{xt(x)-xt(-x)}{x^2+\epsilon^2} = \int\!\mathrm{d}x\frac{\frac{x^2}{\epsilon^2}}{1+\frac{x^2}{\epsilon^2}}\hat{t}(x)\\
&= \int\!\mathrm{d}x\,\hat{t}(x) - |\epsilon|\int\!\mathrm{d}\big(\frac{x}{\epsilon}\big)\frac{1}{1+\frac{x^2}{\epsilon^2}}\hat{t}(\epsilon\big(\frac{x}{\epsilon}\big))\\
&= \int\!\mathrm{d}x\,\hat{t}(x) - |\epsilon|\int\!\mathrm{d}x\frac{\hat{t}(\epsilon x)}{1+x^2} \xrightarrow[\epsilon\to 0]{} \int\!\mathrm{d}x\,\hat{t}(x)
\end{aligned} \tag{A.3}$$

Für differenzierbare Testfunktionen t ist $\hat{t}$ stetig ergänzbar bei $x = 0$ und hat dort den Wert $\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x}$. Das Integral über $\hat{t}$ ist der Hauptwert (principal value) PV $\frac{1}{x}$ integriert mit einer Testfunktion $t(x)$.

$$\int\!\mathrm{d}x\,\frac{1}{2}\,\frac{t(x)-t(-x)}{x} = \lim_{\epsilon\to 0+}\Big(\int_{-\infty}^{-\epsilon}\!\mathrm{d}x\,\frac{t(x)}{x} + \int_{+\epsilon}^{\infty}\!\mathrm{d}x\,\frac{t(x)}{x}\Big) = \fint\!\mathrm{d}x\frac{t(x)}{x} \tag{A.4}$$

Damit ist die Behauptung

$$\lim_{\epsilon\to 0+}\frac{1}{x+\mathrm{i}\,\epsilon} = \mathrm{PV}\,\frac{1}{x} - \mathrm{i}\pi\delta(x) \tag{A.5}$$

gezeigt.

A.2 $\lim_{t\to\infty}\frac{\sin^2(tx)}{tx^2} = \pi\delta(x)$

Das Integral mit einer Testfunktion $f(x)$ schreibt sich als

$$\int dx\, f(x)\,\frac{\sin^2(tx)}{tx^2} = \int t dx\, f(\frac{tx}{t})\,\frac{\sin^2 tx}{(tx)^2} = \int dx\, f(\frac{x}{t})\,\frac{\sin^2 x}{x^2} \tag{A.6}$$

und strebt, falls f eine stetige, beschränkte Testfunktion ist, für $t \to \infty$ gegen

$$f(0)\int dx\,\frac{\sin^2 x}{x^2} = f(0)\pi\ . \tag{A.7}$$

Es ist also

$$\lim_{t\to\infty}\frac{\sin^2(tx)}{tx^2} = \pi\delta(x)\ . \tag{A.8}$$

A.3 Ableitung der Determinante

Die Determinante einer Matrix M ist eine polynomiale Funktion der Matrixelemente $M^i{}_j$. Aus ihrer Definition

$$\det M = \epsilon_{i_1 i_2 \dots i_n} M^{i_1}{}_1 M^{i_2}{}_2 \dots M^{i_n}{}_n \tag{A.9}$$

folgt durch Differenzieren

$$\frac{\partial \det M}{\partial M^i{}_j} = \epsilon_{i_1,\dots,i_{j-1},\,i\,,i_{j+1},\dots i_n} M^{i_1}{}_1 \dots M^{i_{j-1}}{}_{j-1} M^{i_{j+1}}{}_{j+1} \dots M^{i_n}{}_n\ . \tag{A.10}$$

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.

$$\frac{\partial \det M}{\partial M^i{}_j} = \det M (M^{-1})^j{}_i \tag{A.11}$$

Die Ableitung der Determinante einer einparametrigen Schar von Matrizen $M(\alpha)$ ist daher nach Kettenregel

$$\partial_\alpha \det M(\alpha) = \det M(M^{-1})^j{}_i\, \partial_\alpha M^i{}_j\ . \tag{A.12}$$

Ist für $\alpha = 0$ die Matrix $M(0) = \mathbb{1}$, so ist dort die Ableitung der Determinante die Spur der abgeleiteten Matrix $\partial_\alpha M_{|\alpha=0}$

$$\partial_\alpha \det M_{|\alpha=0} = 1 \cdot \delta^i{}_j\, \partial_\alpha M^i{}_{j|\alpha=0} = \partial_\alpha M^i{}_{i|\alpha=0} = \mathrm{tr}\ \partial_\alpha M_{|\alpha=0} \tag{A.13}$$

A.4 Der Propagator des Skalarfeldes

Der Kommutator des positiven und des negativen Frequenzanteil eines reellen, skalaren Feldes

$$\phi(x) = \phi^-(x) + \phi^+(x)\ , \quad \phi^-(x) = \int \tilde{d}k\, e^{ikx}\, a^\dagger(\vec{k})\ , \quad \phi^+(x) = \int \tilde{d}k\, e^{-ikx}\, a(\vec{k}) \quad \text{(A.14)}$$

definiert die Distribution $\Delta(x)$, $\Delta^*(x) = \Delta(-x)$,

$$\Delta(x) = [\phi^+(x), \phi^-(0)] = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3 2k^0}\, e^{-ik\cdot x}\ , \quad k^0 = \sqrt{m^2 + \vec{k}^2}\ . \quad \text{(A.15)}$$

Wir [3, § 15] werten das Integral in Kugelkoordinaten aus, $k\cdot x = \sqrt{m^2+k^2}\,x^0 - k\,r\,\cos\theta$. Die Integration über den Winkel φ gibt einen Faktor 2π,

$$\begin{aligned}
(2\pi)^3\,\Delta(x) &= \int_0^\infty \frac{dk\,k^2}{2\sqrt{m^2+k^2}}\, 2\pi \int_{-1}^{+1} d\cos\theta\, e^{i\,k\,r\,\cos\theta} e^{-i\sqrt{m^2+k^2}\,x^0} \\
&= \pi \int_0^\infty \frac{dk\,k^2}{\sqrt{m^2+k^2}} \frac{1}{(ikr)} \left(e^{ikr} - e^{-ikr}\right) e^{-i\sqrt{m^2+k^2}\,x^0} \\
&= \frac{\pi}{i\,r} \int_{-\infty}^\infty \frac{dk\,k}{\sqrt{m^2+k^2}}\, e^{i\,(kr - \sqrt{m^2+k^2}\,x^0)} \\
\Delta(x) &= -\frac{2\pi^2}{r}\frac{\partial}{\partial r} f(x^0, r)\ , \quad f(x^0,r) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty \frac{dk}{\sqrt{m^2+k^2}}\, e^{-i(\sqrt{m^2+k^2}x^0 - kr)}\ .
\end{aligned} \quad \text{(A.16)}$$

Das Integral erhält seine Standardform durch die Substitution

$$k = m\,\mathrm{sh}\,\varphi\ . \quad \text{(A.17)}$$

Dann ist $\sqrt{m^2+k^2} = m\,\mathrm{ch}\,\varphi$, $dk = d\varphi\, m\,\mathrm{ch}\,\varphi$, und

$$f(x^0, r) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty d\varphi\, e^{-im(x^0\,\mathrm{ch}\,\varphi - r\,\mathrm{sh}\,\varphi)}\ . \quad \text{(A.18)}$$

Für $x^0 > r$, falls also x im Vorwärtslichtkegel liegt, können wir x^0 als $\sqrt{\lambda}\,\mathrm{ch}\,\varphi_0$ mit

$$\lambda = x\cdot x = {x^0}^2 - r^2 \quad \text{(A.19)}$$

und r als $\sqrt{\lambda}\,\mathrm{sh}\,\varphi_0$ schreiben, den Exponenten mit dem Additionstheorem der hyperbolischen Funktionen auswerten, die Integrationsvariable verschieben und schließlich das Integral auf Besselfunktionen J_0 und N_0 zurückführen [4, Gleichung 3.714],

$$\begin{aligned}
x^0 > r:\quad f(x^0,r) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty d\varphi\, e^{-im\sqrt{\lambda}(\mathrm{ch}\,\varphi\,\mathrm{ch}\,\varphi_0 - \mathrm{sh}\,\varphi\,\mathrm{sh}\,\varphi_0)} \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty d\varphi\, e^{-im\sqrt{\lambda}\,\mathrm{ch}(\varphi-\varphi_0)} \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty d\varphi\, e^{-im\sqrt{\lambda}\,\mathrm{ch}\,\varphi} = -\frac{1}{2}\left(N_0(m\sqrt{\lambda}) + iJ_0(m\sqrt{\lambda})\right)\ .
\end{aligned} \quad \text{(A.20)}$$

Für $r > |x^0|$, für raumartige x also, setzen wir $r = \sqrt{-\lambda}\,\mathrm{ch}\,\varphi_0$, $x^0 = \sqrt{-\lambda}\,\mathrm{sh}\,\varphi_0$ und erhalten den nichtverschwindenden Wert

$$r > |x^0|: \quad f(x^0, r) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varphi\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\sqrt{-\lambda}\,\mathrm{sh}\,\varphi} = \frac{1}{\pi} K_0(m\sqrt{-\lambda})\ . \tag{A.21}$$

Für x aus dem Rückwärtslichtkegel, $-x^0 > r$, und mit $x^0 = -\sqrt{\lambda}\,\mathrm{ch}\,\varphi_0$ und $r = \sqrt{\lambda}\,\mathrm{sh}\,\varphi_0$ erhalten wir ebenso

$$-x^0 > r: \quad f(x^0, r) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varphi\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\sqrt{\lambda}\,\mathrm{ch}\,\varphi} = -\frac{1}{2}N_0(m\sqrt{\lambda}) + \frac{\mathrm{i}}{2}J_0(m\sqrt{\lambda})\ . \tag{A.22}$$

Die hierbei und später auftretenden Funktionen J_0, N_0, K_0, sowie $J_1(z) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}J_0(z)$, $N_1(z) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}N_0(z)$ und $K_1(z) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}K_0(z)$ verhalten sich für große Argumente asymptotisch wie [4, Abschnitt 8.45]

$$\begin{aligned} z \to \infty:\ \ J_0(z) &= -\frac{2\sin z}{\sqrt{\pi z}}\ , \quad N_0(z) = \frac{2\sin z}{\sqrt{\pi z}}\ , \quad K_0(z) = -\frac{2}{\sqrt{\pi z}}\mathrm{e}^{-z}\ , \\ J_1(z) &= \frac{2\cos z}{\sqrt{\pi z}}\ , \quad N_1(z) = -\frac{2\cos z}{\sqrt{\pi z}}\ , \quad K_1(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi z}}\mathrm{e}^{-z}\ . \end{aligned} \tag{A.23}$$

Für kleine Argumente gilt [4, Abschnitt 8.40]

$$\begin{aligned} J_0(z) &= 1 - \frac{z^2}{4} + O(z^4)\ , & J_1(z) &= \frac{z}{2} + O(z^3)\ , \\ N_0(z) &= \frac{2}{\pi}(1 - \frac{z^2}{4})\ln\frac{z}{2} + \frac{2}{\pi}C + O(z^2\ln z)\ , & N_1(z) &= -\frac{2}{\pi z} + \frac{z}{\pi}\ln\frac{z}{2} + O(z\ln z)\ , \\ K_0(z) &= -(1 + \frac{z^2}{4})\ln\frac{z}{2} - C + O(z^2\ln z)\ , & K_1(z) &= -\frac{1}{z} + \frac{z}{2}\ln\frac{z}{2} + O(z\ln z)\ . \end{aligned} \tag{A.24}$$

Dabei ist $C = 0{,}577214\ldots$ Eulers Konstante [4, Abschnitt 8.367]

$$C = -\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{-t}\, \ln t\ . \tag{A.25}$$

Verwenden wir zu Berechnung der Distribution $\Delta(x)$, daß die Besselfunktionen von r über λ abhängen, $\partial/\partial r = (-2r)\partial/\partial\lambda$, und berücksichtigen wir die Fallunterscheidungen von raumartigem, zukünftigem und vergangenem x durch die Stufenfunktion $\theta(\lambda)$, die für negatives λ verschwindet und für positives λ den Wert 1 hat, und die Vorzeichenfunktion $\varepsilon(x^0)$, die für negative Zeiten -1 und für positive Zeiten $+1$ ist, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \Delta(x) &= \frac{1}{4\pi r}(2r)\frac{\partial}{\partial\lambda}\Big(\frac{1}{2}\theta(\lambda)\big(-N_0(m\sqrt{\lambda}) + \mathrm{i}\varepsilon(x^0)\, J_0(m\sqrt{\lambda})\big) + \theta(-\lambda)\frac{1}{\pi}\, K_0(m\sqrt{-\lambda})\Big) \\ &= \frac{1}{4\pi}\delta(\lambda)\big(-N_0 + \mathrm{i}\varepsilon(x^0)\, J_0 - \frac{2}{\pi}K_0\big) + \\ &\quad + \frac{1}{8\pi}\frac{m}{\sqrt{\lambda}}\theta(\lambda)\big(N_1(m\sqrt{\lambda}) - \mathrm{i}\varepsilon(x^0)\, J_1(m\sqrt{\lambda})\big) - \frac{1}{4\pi^2}\frac{m}{\sqrt{-\lambda}}\theta(-\lambda)K_1(m\sqrt{-\lambda})\ . \end{aligned} \tag{A.26}$$

Die Funktionen, die $\delta(\lambda)$ multiplizieren, können bei $\lambda = 0$ ausgewertet werden,

$$\lim_{z\to 0}(-N_0(z) + i\varepsilon(x^0)J_0(z) - \frac{2}{\pi}K_0(z))) = i\varepsilon(x^0)\ . \tag{A.27}$$

Damit erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned}\Delta(x) = \frac{i}{4\pi}\varepsilon(x^0)\delta(\lambda) + \frac{1}{8\pi}\frac{m}{\sqrt{\lambda}}\theta(\lambda)\big(N_1(m\sqrt{\lambda}) - i\varepsilon(x^0)\,J_1(m\sqrt{\lambda})\big)- \\ - \frac{1}{4\pi^2}\frac{m}{\sqrt{-\lambda}}\theta(-\lambda)K_1(m\sqrt{-\lambda})\ .\end{aligned} \tag{A.28}$$

Für kleine $m\sqrt{|\lambda|}$ ist dies bis auf Fehler der Ordnung $O\big(m\sqrt{|\lambda|}\ln(m\sqrt{|\lambda|})\big)$

$$\Delta(x) \approx \frac{i}{4\pi}\varepsilon(x^0)\delta(\lambda) - \frac{1}{4\pi^2\lambda} + \frac{m^2}{8\pi^2}\ln\frac{m\sqrt{|\lambda|}}{2} - i\frac{m^2}{16\pi}\varepsilon(x^0)\theta(\lambda) \tag{A.29}$$

und für masselose Teilchen

$$\Delta_{|m=0}(x) = \frac{i}{4\pi}\varepsilon(x^0)\delta(\lambda) - \frac{1}{4\pi^2\,\lambda}\ . \tag{A.30}$$

Die Distribution $\Delta(x)$ hat unabhängig von der Masse auf dem Lichtkegel eine δ-Funktions-Singularität und einen Pol $-1/(4\pi^2\,x\cdot x)$. Zudem hat sie proportional zum Massenquadrat eine logarithmische Singularität $\ln\sqrt{|x\cdot x|}$ und eine Unstetigkeit $\theta(x\cdot x)\varepsilon(x^0)$.

Der Vakuumerwartungswert des zeitgeordneten Produktes von zwei Skalarfeldern, der Propagator, ist für positive Zeiten durch Δ und für negative Zeiten durch $\Delta(-x)$ gegeben

$$\langle T\phi(x)\phi(0)\rangle := \langle\Omega|T\phi(x)\phi(0)\Omega\rangle = \theta(x^0)\int\tilde{d}k\,e^{ikx} + \theta(-x^0)\int\tilde{d}k\,e^{-ikx}\ . \tag{A.31}$$

Er ist eine symmetrische Funktion von x, die auch für raumartige Abstände, $x\cdot x < 0$, nicht verschwindet, $z = m\sqrt{|\lambda|}$,

$$\langle T\phi(x)\phi(0)\rangle = \frac{i}{4\pi}\delta(\lambda) + \frac{1}{8\pi}\frac{m}{\sqrt{\lambda}}\theta(\lambda)\Big(N_1(z) - i\,J_1(z)\Big) - \frac{1}{4\pi^2}\frac{m}{\sqrt{-\lambda}}\theta(-\lambda)K_1(z)\ . \tag{A.32}$$

Im Gegensatz dazu ist der Kommutator eine ungerade Funktion, die für raumartige Abstände verschwindet,

$$[\phi(x),\phi(0)] = \Delta(x) - \Delta(-x) = \frac{i}{2\pi}\varepsilon(x^0)\delta(\lambda) - \frac{i}{4\pi}\frac{m}{\sqrt{\lambda}}\theta(\lambda)\varepsilon(x^0)\,J_1(m\sqrt{\lambda})\ . \tag{A.33}$$

A.5 Definitheit des Skalarproduktes

In Eichtheorien treten Fockräume mit nicht-definitem Skalarprodukt auf. Solch ein Fockraum kann nicht der Raum der physikalischen Zustände sein, denn die Definitheit des Skalarproduktes (1.4)

$$0 \leq \langle\Psi|\Psi\rangle \ , \quad \langle\Psi|\Psi\rangle = 0 \Leftrightarrow \Psi = 0 \ . \tag{A.34}$$

folgt, wie wir jetzt zeigen wollen, schon aus der Grundgleichung (1.1) für die Wahrscheinlichkeit

$$w(i, A, \Psi) = |\, \langle\Lambda_i|\Psi\rangle\, |^2 \ , \tag{A.35}$$

daß bei Messung des Zustands Ψ mit dem Apparat A der i-te Meßwert festgestellt wird.

Hierbei sind nach Definition die Eigenzustände Λ_i diejenigen Zustände, bei denen mit Sicherheit der zugehörige Meßwert a_i auftritt. Also sind verschiedene Λ_i zueinander orthogonal und demnach linear unabhängig (1.5)

$$\langle\Lambda_i|\Lambda_j\rangle = 0 \ , \quad \text{falls } i \neq j \ . \tag{A.36}$$

Für $i = j$ ist das Skalarprodukt der Eigenvektoren reell (1.2b) und vom Betrag 1.

$$\langle\Lambda_i|\Lambda_j\rangle = \eta_{ij} \ , \quad \eta = \mathrm{diag}(1, 1, \ldots, -1, -1, \ldots) \tag{A.37}$$

Im Raum, der von den Eigenzuständen aufgespannt wird, ist das Skalarprodukt daher von der Form

$$\langle\Lambda|\Psi\rangle = (\Lambda|\eta\Psi) \ , \tag{A.38}$$

wobei $(\Lambda|\Psi)$ ein definites Skalarprodukt ist und η die lineare Abbildung, die Λ_i auf $\sum_j \Lambda_j \eta_{ji}$ abbildet.

Die Eigenzustände Λ_i des Meßapparates A sind Eigenzustände der Abbildung η.

Ebenso müssen die Eigenzustände Γ_i jedes anderen Meßapparates C Eigenzustände von η sein, denn bei ihnen treten die zugehörigen Meßwerte c_i mit Sicherheit auf

$$(\Gamma_i|\eta\Gamma_j) = \hat{\eta}_{ij} \ , \quad \eta\Gamma_i = \sum_j \Gamma_j \hat{\eta}_{ji} \ . \tag{A.39}$$

Es ist aber die Superposition $\Gamma = a\Lambda_1 + b\Lambda_2$ für $a\, b \neq 0$ kein Eigenzustand von η, falls die Eigenwerte η_{11} und η_{22} nicht übereinstimmen. Falls keine Superauswahlregeln den Raum der Eigenvektoren möglicher Meßapparate einschränken, falls also alle Superpositionen Γ von Eigenvektoren Λ_i Eigenvektoren möglicher Meßapparate sind, dann hat η in diesem Raum nur gleiche Eigenwerte und das Skalarprodukt ist (positiv oder negativ) definit.

A.6 Baker-Campbell-Hausdorff-Formel

Sei X eine lineare Selbstabbildung eines endlichdimensionalen Vektorraumes $\mathcal{V}$. Sie definiert durch ihren Kommutator eine adjungierte Abbildung ad_X von Matrizen Y (2.32),

$$\mathrm{ad}_X : Y \mapsto [X, Y] \ . \tag{A.40}$$

Die Baker-Campbell-Hausdorff-Formel [9] stellt für genügend kleine X und Y das Produkt $e^X e^Y$ als Exponentialreihe $e^{Z(X,Y)}$ dar, wobei Z ein Element der von X und Y erzeugten Liealgebra ist, nämlich bis auf $X + Y$ eine Potenzreihe in ad_X und ad_Y, angewendet auf $[X, Y]$.

Als Folge gehört zu jeder Darstellung einer Liealgebra die Gruppe, die aus den Produkten der exponentierten Darstellungsmatrizen besteht.

Die durch den Kommutator bewirkte Abbildung ad_X erzeugt die zur invertierbaren Matrix $g = e^X$ adjungierte Transformation $\mathrm{Ad}_g : Y \mapsto gYg^{-1}$ (3.15),

$$e^X \, Y \, e^{-X} = e^{\mathrm{ad}_X} Y \ . \tag{A.41}$$

Denn als Funktion einer reellen Variablen t erfüllen $A(t) = e^{tX} Y e^{-tX}$ und $B(t) = e^{t\,\mathrm{ad}_X} Y$ dieselbe Differentialgleichung erster Ordnung $\frac{d}{dt} A(t) = [X, A(t)]$ und $\frac{d}{dt} B(t) = [X, B(t)]$. Da ihre Anfangswerte $A(0) = B(0) = Y$ übereinstimmen, gilt $A(1) = B(1)$ und folglich

$$\mathrm{Ad}_{(e^X)} = e^{\mathrm{ad}_X} \ . \tag{A.42}$$

Sei $Z(t) = X + tY + \ldots$ eine Kurve im Raum der Matrizen, die für $t = 0$ den Punkt $Z(0) = X$ in Richtung des Tangentialvektors $\frac{dZ}{dt} = Y$ durchläuft. Die Ableitung von $e^{Z(t)}$ für $t = 0$ bezeichnen wir mit

$$\frac{d}{dt}_{|t=0} e^{X+tY} = \Delta(X, Y) \ . \tag{A.43}$$

Sie ist linear in Y, $\Delta(X, a\,Y) = a\,\Delta(X, Y)$ und stimmt für $X = 0$, am Einselement, mit Y überein, $\Delta(0, Y) = Y$.

Bis auf einen Faktor e^X ist $\Delta(X, Y)$ eine Potenzreihe in ad_X angewendet auf Y. Denn für jede natürliche Zahl m gilt

$$e^{X+tY} = (e^{\frac{X}{m} + t\frac{Y}{m}})^m \tag{A.44}$$

und das Differenzieren der m Faktoren ergibt nach der Produktregel

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}_{|t=0} (e^{\frac{X}{m} + t\frac{Y}{m}})^m &= \sum_{k=0}^{m-1} (e^{\frac{X}{m}})^{m-k-1} \Delta(\frac{X}{m}, \frac{Y}{m}) (e^{\frac{X}{m}})^k \\ &= e^{\frac{m-1}{m} X} \frac{1}{m} \sum_{k=0}^{m-1} \left(\mathrm{Ad}_{e^{-\frac{X}{m}}}\right)^k \Delta(\frac{X}{m}, Y) \ . \end{aligned} \tag{A.45}$$

Wegen $\frac{1}{m}\sum_{k=0}^{m-1} q^k = \frac{1-q^m}{m(1-q)}$ und wegen (A.42) strebt für $m \to \infty$ die Summe von Abbildungen gegen

$$\frac{1}{m}\sum_{k=0}^{m-1}\left(\mathrm{Ad}_{e^{-\frac{X}{m}}}\right)^k = \frac{1-e^{-\mathrm{ad}_X}}{m(1-e^{-\mathrm{ad}_{\frac{X}{m}}})} \to \frac{1-e^{-\mathrm{ad}_X}}{\mathrm{ad}_X} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{(n+1)!}(\mathrm{ad}_X)^n \ . \tag{A.46}$$

Die anderen Faktoren in (A.45) gehen für $m \to \infty$ gegen e^X und $\Delta(0, Y) = Y$, und da (A.45) stetig in diesen Faktoren und unbhängig von m ist, gilt

$$\frac{d}{dt}_{|t=0} e^{X+tY} = e^X \frac{1-e^{-\mathrm{ad}_X}}{\mathrm{ad}_X} Y \tag{A.47}$$

oder

$$\frac{d}{dt} e^{Z(t)} = e^Z \frac{1-e^{-\mathrm{ad}_Z}}{\mathrm{ad}_Z}\frac{dZ}{dt} \ . \tag{A.48}$$

Für $Z(t)$, das sich bei Einschalten von Y ergibt,

$$e^{Z(t)} = e^X e^{tY} \ , \tag{A.49}$$

besagt dies

$$e^{-Z(t)}\frac{d}{dt}e^{Z(t)} = \frac{1-e^{-\mathrm{ad}_Z}}{\mathrm{ad}_Z}\frac{dZ}{dt} = Y \ . \tag{A.50}$$

Dabei ist die Reihe in ad_Z invertierbar, wenn X und Y und daher Z genügend klein sind. Der Kehrwert von $\frac{1-e^{-s}}{s}$ ist $\frac{\ln e^s}{1-e^{-s}}$. Also ist

$$\frac{dZ}{dt} = \frac{\ln e^{\mathrm{ad}_Z}}{1-e^{-\mathrm{ad}_Z}} Y = g(e^{\mathrm{ad}_Z})Y \ , \tag{A.51}$$

wobei die Funktion

$$\begin{aligned} g(s) &= \frac{\ln s}{1-s^{-1}} = \frac{s\ln s}{s-1} = \frac{(1+(s-1))\ln(1+(s-1))}{s-1} \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n(n+1)}(s-1)^n \end{aligned} \tag{A.52}$$

im Bereich $|s-1| < 1$ analytisch ist.

Wegen $e^{\mathrm{ad}_Z} = \mathrm{Ad}_{(e^Z)} = \mathrm{Ad}_{e^X e^{tY}} = \mathrm{Ad}_{e^X}\mathrm{Ad}_{e^{tY}} = e^{\mathrm{ad}_X}e^{t\,\mathrm{ad}_Y}$ ist schließlich

$$\frac{dZ}{dt} = \frac{e^{\mathrm{ad}_X}e^{t\,\mathrm{ad}_Y}\ln(e^{\mathrm{ad}_X}e^{t\,\mathrm{ad}_Y})}{e^{\mathrm{ad}_X}e^{t\,\mathrm{ad}_Y}-1} Y \ . \tag{A.53}$$

Integrieren wir dies über t mit $Z(0) = X$, so erhalten wir mit $Z = Z(1)$ die Baker-Campbell-Hausdorff-Formel für Z in $e^Z = e^X e^Y$

$$\begin{aligned} Z &= X + \int_0^1 dt\, \frac{e^{\mathrm{ad}_X}e^{t\,\mathrm{ad}_Y}\ln(e^{\mathrm{ad}_X}e^{t\,\mathrm{ad}_Y})}{e^{\mathrm{ad}_X}e^{t\,\mathrm{ad}_Y}-1} Y \\ &= X + Y + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n(n+1)}\int_0^1 dt\,(e^{\mathrm{ad}_X}e^{t\,\mathrm{ad}_Y}-1)^n Y \ . \end{aligned} \tag{A.54}$$

Hierbei ist $e^{\mathrm{ad}_X} e^{t\,\mathrm{ad}_Y} - 1$ von mindestens linearer Ordnung in ad_X und ad_Y

$$\begin{aligned}&[1+\mathrm{ad}_X+\frac{1}{2}(\mathrm{ad}_X)^2+\dots]\,[1+t\,\mathrm{ad}_Y+\frac{t^2}{2}(\mathrm{ad}_Y)^2+\dots]-1\\ &=\mathrm{ad}_X+t\,\mathrm{ad}_Y+\frac{1}{2}(\mathrm{ad}_X)^2+t\,\mathrm{ad}_X\,\mathrm{ad}_Y+\frac{t^2}{2}(\mathrm{ad}_Y)^2+\dots\end{aligned}\tag{A.55}$$

Durch Ausmultiplizieren von $(e^{\mathrm{ad}_X} e^{t\,\mathrm{ad}_Y} - 1)^n$ ergeben sich Monome mit Faktoren ad_X und k Faktoren $t\,\mathrm{ad}_Y$, $k = 0, 1, \dots$, deren t-Integration einem Koeffizienten $1/(k+1)$ ergibt. Bis auf Terme mit drei und mehr Kommutatoren folgt so

$$Z = X + Y + \frac{1}{2}[X, Y] + \frac{1}{12}[X, [X, Y]] - \frac{1}{12}[Y, [X, Y]] + \dots \tag{A.56}$$

Das Gegenbeispiel

$$\begin{aligned}X = \pi\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\ ,\ Y = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}\ ,\\ e^X = \begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\ ,\ e^Y = \begin{pmatrix}1 & 1\\ 0 & 1\end{pmatrix}\ ,\ e^X e^Y = \begin{pmatrix}-1 & -1\\ 0 & -1\end{pmatrix}\end{aligned}\tag{A.57}$$

zeigt, daß die Baker-Campbell-Hausdorff-Formel wirklich nur für genügend kleine X und Y gilt. Denn in diesem Gegenbeispiel kann $e^X e^Y$ nicht als Exponentialfunktion irgendeiner Matrix

$$Z = \begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}\tag{A.58}$$

geschrieben werden. Denn $\det e^X e^Y = 1 = e^{\mathrm{tr}\, Z}$ erfordert $d = -a$. Dann folgt aber

$$Z^2 = (a^2 + bc)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\ ,\ e^Z = \mathrm{ch}(\sqrt{a^2+bc})\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} + \frac{\mathrm{sh}(\sqrt{a^2+bc})}{\sqrt{a^2+bc}}\, Z\ .\tag{A.59}$$

Damit das $(1, 2)$-Matrixelement von Null verschieden ist, darf der zweite Term nicht verschwinden. Aber nur für $a = d$ hat Z gleiche Hauptdiagonalelemente und wegen $a = -d$ verschwinden $a = d = 0$. Zudem ist $c = 0$, damit das $(2, 1)$ Matrixelement von e^Z verschwindet. Aber dann ist

$$e^Z = \begin{pmatrix}1 & b\\ 0 & 1\end{pmatrix}\tag{A.60}$$

verschieden von $e^X e^Y$.

A.7 Das Schursche Lemma

Eine Menge von linearen Abbildungen K, die einen Vektorraum $\mathcal{V}$ auf sich abbilden und dabei einen echten Unterraum $\mathcal{U}$, $\{0\} \neq \mathcal{U} \neq \mathcal{V}$, auf sich abbilden, heißt reduzibel. Wählt man die Basis für $\mathcal{V}$ so, daß die ersten Basisvektoren $\mathcal{U}$ aufspannen, so haben die zu den reduziblen Abbildungen gehörigen Matrizen einen gemeinsamen Block verschwindender Matrixelemente und sind von der Form

$$K = \begin{pmatrix} * & * \\ 0 & * \end{pmatrix} . \tag{A.61}$$

Eine Menge von linearen Abbildungen K heißt irreduzibel, wenn keine anderen Unterräume als $\{0\}$ und $\mathcal{V}$ von allen Abbildungen K auf sich abgebildet werden.

Ist bekannt, daß eine Menge linearer Abbildungen K nur mit Vielfachen der $\mathbf{1}$ vertauscht, dann ist sie irreduzibel. Denn jeder Projektor auf einen invarianten Unterraum vertauscht mit jedem K und kann, weil er ein Vielfaches der $\mathbf{1}$ und ein Projektor ist, nur $\mathbf{1}$ oder 0 sein. Folglich ist der invariante Unterraum $\mathcal{V}$ oder $\{0\}$.

Wenn eine Abbildung W mit einer Abbildung K vertauscht, wenn also $WK = KW$ gilt, so bildet K für jede Zahl σ den Nullraum von $W - \sigma\mathbf{1}$,

$$\mathcal{N}_\sigma = \{v \in \mathcal{V} : (W - \sigma\mathbf{1})v = 0\} , \tag{A.62}$$

auf sich ab. Denn aus $(W - \sigma\mathbf{1})v = 0$ folgt $0 = K(W - \sigma\mathbf{1})v = (W - \sigma\mathbf{1})(Kv)$.

Ist die Menge von linearen Abbildungen K, die mit W vertauschen, irreduzibel und hat W einen Eigenvektor zu einem Eigenwert λ, dann ist der zugehörige Nullraum $\mathcal{N}_\lambda$ ein invarianter Unterraum und mindestens eindimensional, und folglich ist $\mathcal{N}_\lambda = \mathcal{V}$, das heißt $W = \lambda\mathbf{1}$. Demnach gilt das (Issai Schur, 1875-1941)

Schursche Lemma: *Wenn eine lineare Selbstabbildung* W *eines Vektorraumes einen Eigenvektor hat und mit einer irreduziblen Menge von linearen Selbstabbildungen* K *vertauscht, dann ist* $W = \lambda\mathbf{1}$ *ein Vielfaches der Eins.*

Die Bedingung, einen Eigenvektor zu haben, ist für jede lineare Selbstabbildung eines komplexen, endlichdimensionalen Vektorraumes erfüllt, ebenso für alle symmetrischen, reellen Matrizen.

Sei eine Menge von linearen Selbstabbildungen K eines Vektorraum $\mathcal{V}$ irreduzibel und gebe es eine lineare Abbildung W von $\mathcal{V}$ in einen Vektorraum $\mathcal{W}$. Wenn jedes K durch W mit einer linearen Selbstabbildung K' von $\mathcal{W}$ verflochten ist,

$$K'W = WK , \tag{A.63}$$

und die Menge dieser K' ebenfalls irreduzibel ist, dann ist W entweder invertierbar und K und K' sind einander äquivalent, $K' = WKW^{-1}$, oder $W = 0$ verschwindet.

Denn das Bild $W\mathcal{V}$ ist ein invarianter Unterraum der Abbildungen K' und der Nullraum von W ist ein invarianter Unterraum der Abbildungen K. Falls nun W nicht verschwindet, so ist, weil die Menge der K' irreduzibel ist, $W\mathcal{V} = \mathcal{W}$, und der Nullraum von W ist nicht $\mathcal{V}$, sondern $\{0\}$, da die Menge der K irreduzibel ist. Also ist W invertierbar, oder W verschwindet.

A.8 Das Hopfbündel

Jede Untergruppe $H \subset G$ einer Gruppe G zerlegt sie in Mengen von Linksnebenklassen gH, $g \in G$, die entweder übereinstimmen, $gH = g'H \Leftrightarrow \exists h \in H : \; g' = gh$, oder elementefremd sind,

$$gH \cap g'H \neq gH \Leftrightarrow gH \cap g'H = \emptyset \ . \tag{A.64}$$

Dies zeigt, daß G ein Bündel über der Basismannigfaltigkeit $G/H = \{gH : g \in G\}$ ist mit Fasern, die diffeomorph zu H sind. Mit anderen Worten: es gibt eine Projektion $\pi : G \to G/H, g \mapsto gH$ des Bündels auf die Basismannigfaltigkeit G/H und das Urbild jedes Punktes von G/H ist diffeomorph zu H, $\pi^{-1}(gH) \sim H$.

Betrachten wir beispielsweise die Gruppe $G = \mathrm{SU}(2)$, also die Menge der unitären 2×2-Matrizen, deren Determinanten den speziellen Wert 1 haben. Sie haben die Form

$$\mathrm{SU}(2) = \left\{ \begin{pmatrix} z + is & -x + iy \\ x + iy & z - is \end{pmatrix} : (s, x, y, z) \in S^3 \subset \mathbb{R}^4, s^2 + x^2 + y^2 + z^2 = 1 \right\} . \tag{A.65}$$

Da die komplexen Zahlen $z + is$ und $x + iy$ die Komponenten des Bildes des ersten Basisvektors sind und die Matrix unitär ist, hat er Einheitslänge. Das Bild des zweiten Basisvektors steht darauf senkrecht, seine Komponenten sind also ein Vielfaches von $\bigl(-(x+iy)^*, (z+is)^*\bigr)$. Dieses Vielfache ist durch den Wert der Determinante festgelegt.

Die Mannigfaltigkeit $\mathrm{SU}(2)$ kann also als die dreidimensionale Kugeloberfläche S^3 angesehen werden. Für ihre Punkte (s, x, y, z) verwenden wir stereographische Koordinaten (u, v, w) (Südkoordinaten für alle Punkte außer dem Nordpol $(0, 0, 0, 1)$) und (u', v', w') (Nordkoordinaten für alle Punkte außer dem Südpol $(0, 0, 0, -1)$),

$$\begin{aligned} u &= \frac{s}{1 - z} \ , \quad v = \frac{x}{1 - z} \ , \quad w = \frac{y}{1 - z} \ , \\ u' &= \frac{s}{1 + z} \ , \quad v' = \frac{x}{1 + z} \ , \quad w' = \frac{y}{1 + z} \ . \end{aligned} \tag{A.66}$$

Außerhalb der Pole hängen sie durch Inversion am Einheitskreis zusammen,

$$\begin{aligned} u' &= \frac{u}{u^2 + v^2 + w^2} \ , \quad v' = \frac{v}{u^2 + v^2 + w^2} \ , \quad w' = \frac{w}{u^2 + v^2 + w^2} \ , \\ u &= \frac{u'}{u'^2 + v'^2 + w'^2} \ , \quad v = \frac{v'}{u'^2 + v'^2 + w'^2} \ , \quad w = \frac{w'}{u'^2 + v'^2 + w'^2} \ . \end{aligned} \tag{A.67}$$

Die Gruppe $G = \mathrm{SU}(2)$ enthält die Untergruppe $H = \mathrm{U}(1)$

$$\mathrm{U}(1) = \left\{ h : h = \begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \ , \ \varphi \in [0, 2\pi) \right\} \subset \mathrm{SU}(2) \ , \tag{A.68}$$

einen Kreis S^1 auf S^3. In stereographischen Koordinaten ist er zur Geraden entartet

$$(u, v, w)(\sin\varphi, 0, 0, \cos\varphi) = (\frac{\sin\varphi}{1 - \cos\varphi}, 0, 0) = (\cot\frac{\varphi}{2}, 0, 0) \ . \tag{A.69}$$

Er wird durch Linksmultiplikation mit $g \in G$ – das ist wegen $\mathrm{SU}(2) \subset \mathrm{SO}(4)$ eine Drehung von $\mathbb{R}^4$ – wieder auf einen Kreis, die Linksnebenklasse gH, abgebildet.

Die Menge der Linksnebenklassen SU(2)/U(1) ist die Mannigfaltigkeit S^2, denn mit $c = \sqrt{z^2+s^2}$, $0 \leq c \leq 1$, und $s = \sqrt{1-c^2}$ und mit einer Phase α läßt sich jede Nebenklasse als

$$g_{c,\alpha}H = \left\{ \begin{pmatrix} c & -se^{-i\alpha} \\ se^{i\alpha} & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \ , \ \varphi \in [0, 2\pi) \right\} \tag{A.70}$$

schreiben. Der Kreis $g_{c,\alpha}H$ besteht aus Punkten mit den stereographischen Koordinaten

$$(u, v, w)(g_{c,\alpha}H) = \left\{ \Big(\frac{c \sin\varphi}{1 - c\cos\varphi}, \frac{s\cos(\varphi+\alpha)}{1 - c\cos\varphi}, \frac{s\sin(\varphi+\alpha)}{1-c\cos\varphi} \Big) \ , \ 0 \leq \varphi < 2\pi \right\} . \tag{A.71}$$

Insbesondere gehört $c = 1$ zum α-unabhängigen Kreis (A.69) und ebenso unabhängig von α besteht $g_{0,\alpha}H$ aus den Punkten

$$(u, v, w)(g_{0,\alpha}H) = \left\{ \big(0, \cos(\varphi+\alpha), \sin(\varphi+\alpha)\big) \ , \ 0 \leq \varphi < 2\pi \right\} . \tag{A.72}$$

Die Projektion $\pi : G \to G/H$, $g \mapsto gH$, die jeden Punkt g von $G \sim S^3$ auf den Kreis abbildet, in dem er liegt, verleiht S^3 die Struktur eines Bündels über der Basismannigfaltigkeit $S^2 \sim SU(2)/U(1)$. Die Urbilder $\pi^{-1}(k)$ jedes Punktes $k \in S^2$, die Faser über k, sind jeweils ein Kreis S^1.

Abbildung A.1: S^1-Fasern von S^3 [13]

Aber dieses S^1-Bündel über S^2, das Hopf-Bündel, ist kein Produkt $S^2 \times S^1$. Denn das Produkt ist anders als S^3 nicht einfach zusammenhängend, enthält also geschlossene Wege, die sich nicht auf einen Punkt zusammenziehen lassen.

Jeder dieser Kreise $\pi^{-1}(k)$ umwindet wie in Abbildung (A.1) in stereographischer Projektion dargestellt, jeden anderen Kreis $\pi^{-1}(k')$ einmal. Es schneidet ja (A.71) für $0 < c < 1$ die $u = 0$-Ebene in

$$\Big(0, \frac{s\cos\alpha}{1-c}, \frac{s\sin\alpha}{1-c}\Big) \text{ und } \Big(0, \frac{-s\cos\alpha}{1+c}, \frac{-s\sin\alpha}{1+c}\Big) \tag{A.73}$$

einmal außerhalb und einmal innerhalb ($(1-c)^2 < s^2 < (1+c)^2$) des Kreises (A.72), umwindet ihn also einmal. Gleiches gilt für jedes andere Paar von Kreisen, denn durch Linksmultiplikation kann man das Paar auf den Kreis (A.72) und einen Kreis (A.71) abbilden, ohne an dieser Windungszahl etwas zu ändern.

Literaturverzeichnis

[1] Alain Aspect, Jean Dalibard and Gérard Roger, Experimental Test of Bell's Inequalities Using Time-Varying Analyzers, Phys. Rev. Lett. 49 (1982) 1804 – 1807

[2] John S. Bell, On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox, Physics 1 (1964) 195
John S. Bell, Speakable and unspeakable in quantum mechanics, Cambridge University Press, Cambridge, 1987

[3] N. N. Bogoliubov and D. V. Shirkov, Introduction to the Theory of Quantized Fields, John Wiley, New York, 1959

[4] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, Table of Integrals, Series and Products, Academic Press, New York, 1965

[5] John F. Clausner, Michael A. Horne, Abner Shimony and Richard A. Holt, Proposed experiment to test local hidden-variable theories, Phys. Rev. Lett 23 (1969) 880 – 884

[6] Norbert Dragon, Geometrie der Relativitätstheorie,
`http://www.itp.uni-hannover.de/~dragon`

[7] Norbert Dragon, Stichworte und Ergänzungen zu Mathematische Methoden der Physik, `http://www.itp.uni-hannover.de/~dragon`

[8] A. Galindo and P. Pascual, Quantum Mechanics I and II, Springer Verlag, Heidelberg, 1990

[9] Brian C. Hall, Lie Groups, Lie Algebras, and Representations, Springer Verlag, New York, 2003

[10] George W. Mackey, Induced Representations of Groups and Quantum Mechanics, W. A. Benjamin Inc., New York, 1968

[11] Asher Peres, Quantum Theory: Concepts and Methods, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1998

[12] M. Reed and B. Simon, Analysis of Operators, Academic Press, New York, 1978

[13] http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Hopfkeyrings.jpg

[14] J. von Neumann, Die Eindeutigkeit der Schrödingerschen Operatoren, Mathematische Annalen (1931) 104: 570 – 578

[15] Steven Weinberg, The Quantum Theory of Fields Volume 1, Cambridge University Press, Cambridge, 1995

Index