

# QUANTENMECHANIK I

J. Fröhlich

HS 2009

## Literatur

N. Straumann, Quantenmechanik, Springer-Verlag, Berlin - Heidelberg - New York, 2002.

G. Baym, Lectures on Quantum Mechanics, Benjamin, New York, 1969.

P. A. M. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics, 4<sup>th</sup> ed., Clarendon Press, Oxford 1958

C. Cohen - Tannoudji, B. Diu, F. Lalöe, Quantenmechanik, Teil 1 & 2, Walter de Gruyter, Berlin - New York, 1999.

A. Bohm, Quantum Mechanics, 2<sup>nd</sup> ed., Springer-Verlag, Berlin - Heidelberg - New York, 1986.

- H. Bethe, R. Jackiw, Intermediate Quantum Mechanics, 3<sup>rd</sup> ed., Benjamin, New York, 1986.
- F. Seheck, Theoretische Physik 2, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 2000.
- S. J. Gustafson, I. M. Sigal, Mathematical Concepts of Quantum Mechanics, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 2003.
- W. Heisenberg, Physikalische Prinzipien der Quantentheorie, Leipzig 1930.
- A. Gennaro, M. Fortunato and G. Parisi, Quantum Mechanics, Cambridge University Press, Cambridge, New York, ..., 2009.
- F. Schwabl, Quantenmechanik, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1992.

Feynman, Leighton, Sands, The Feynman Lectures  
on Physics III.

F. Hund, Geschichte der Quantenmechanik, Hochschul  
taschenbücher.

R. Jost, Quantenmechanik I, II, VMP 1969

T. Kato, Perturbation theory for linear operators,  
Springer 1966.

L. D. Landau und E. M. Lifshitz, Quantum  
Mechanics, Pergamon Press 1977.

A. Messiah, Quantum Mechanics I, II,  
North-Holland 1965

W. Pauli, "Vorlesungen über Wellenmechanik",  
Boringhieri, 1962; "Die allgemeinen Prinzipien  
der Wellenmechanik", Springer-Verlag 1990.

D. Park, Introduction to the Quantum Theory,  
Mc Graw-Hill 1964.

M. Reed and B. Simon, Methods of Modern Mathematical Physics, vol. I - IV.

J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics,  
Benjamin 1985

W. Thirring, Lehrbuch der mathematischen Physik,  
vol III & IV.

B. L. van der Waerden, Group Theory and Quantum Mechanics, Springer 1974

J. von Neumann, Mathematische Grundlagen der  
Quantenmechanik,

H. Weyl, The theory of groups and quantum mechanics, Dover 1931

W. Hunziker, Quantenmechanik I und II,  
Autographie 1995/96



## Ungefährer Inhalt

1. Krise der klassischen Physik - Geburt der Quantentheorie.
2. Grundlagen der Quantenmechanik.
3. Einfache quantenmechanische Systeme.
4. Potentialstreuung
5. Die formale Struktur der Quantenmechanik; Grundlagenprobleme.
6. Quantenmechanischer Drehimpuls, Teilchen mit Spin.
7. (Stationäre) Störungstheorie und Anwendungen.
8. Mehrteilchensysteme: Atome und Moleküle.
9. Zeitabhängige Störungstheorie

10. Die Quantentheorie der Strahlungsvorgänge

11. "Zweite Quantisierung" und Vielkörper-  
theorie; oder

Pfadintegral formulierung der Quanten-  
mechanik, und quasi-klassische Methoden;  
und/oder

Quantenmechanik der Resonanzen.

---

"Anyone who is not shocked by quantum  
theory has not understood it." (N. Bohr)

"If someone tells you they understand  
quantum mechanics then all you've learned  
is that you've met a liar." (R.P. Feynman)

"I cannot define the real problem; therefore  
I suspect there's no real problem; but I'm  
not sure there's no real problem."

(R.P. Feynman)

"C'est cette contradiction qui apparaît dans l'idée de quanta ou d'atomes d'énergie... qui a ôté à la science, à partir de 1900, la signification qu'elle avait eue au cours de quatre siècles sans qu'on ait pu lui en donner aucune autre." (Simone Weil)

"Hier<sup>1</sup> liegt der Schlüssel der Situation, der Schlüssel nicht nur zur Strahlungstheorie, sondern auch zur molekularen<sup>2</sup> Constitution der Materie..." (A. Sommerfeld)

---

<sup>1</sup> in der Quantentheorie

<sup>2</sup> = atomistischen

$$u(\omega, T) \propto \omega^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \omega} u(\omega, T) &= 3\omega^2 f\left(\frac{\omega}{T}\right) + \omega^3 \frac{1}{T} f'\left(\frac{\omega}{T}\right) \\ &= \omega^2 \left[ 3 f(\cdot) + \frac{\omega}{T} f'(\cdot) \right] \\ &\stackrel{!}{=} 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \frac{\omega}{T} = -3 \frac{f(\frac{\omega}{T})}{f'(\frac{\omega}{T})} \quad * \quad \left( \text{Setze } \frac{\omega}{T} =: x, \text{ und löse } *! \right)$$

$$\Rightarrow \frac{\omega}{T} = \frac{1}{2} \quad \text{bei Max.} \quad \swarrow$$

Gravity:

$$\frac{1}{l^2} = \kappa \frac{1}{l} \cdot \frac{1}{l^3}$$

$$G = \kappa T$$

$$\Rightarrow [\kappa] = m^2 = l_p^2 \propto G_N$$

$$\frac{G_N m M}{r} = \text{Energie}$$

$$G_N = \frac{l \text{ Energie}}{\text{Masse}^2} = \frac{l \cdot \frac{\hbar c}{l}}{\left(\frac{\hbar}{cl}\right)^2}$$

$$\Rightarrow l_p^2 = \frac{G_N \hbar}{c^3}!$$

# Historische Einleitung

licht

Materie

Planck & Einstein: Hohlraumstr. (2 Strahlungswerte)  $\left. \begin{array}{l} k, h, c^{-1}, h_3 \end{array} \right\}$   
Photo- und Compton Effekt

Thomson & Rutherford, Hertz.

Klass. Strahlungsformel (Hertz)

Bohr

Ritz-Rydberg

Heisenberg

Schrödinger

13 Wochen

ca. 25 Seiten pro Woche

# 1. Krise der klassischen Physik - Geburt der Quantentheorie (Geschichte 1900-1926)

## 1.1. Die Plancksche Strahlungsformel

Die Geburt der Quantentheorie fällt auf das Ende des Jahres 1900: Max Planck entdeckt auf der Basis experimenteller Daten zur Hohlraumstrahlung von Otto Lummer und Ernst Pringsheim und von Heinrich Rubens und Ferdinand Kurlbaum (alle im Jahr 1900) die korrekte Formel für die spektrale Energiedichte der Hohlraumstrahlung; nämlich

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / kT} - 1} \quad (1.1)$$

oder auch

$$\rho(\nu, T) = 2\pi u(2\pi\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

$$\left( \omega = 2\pi\nu, \quad \frac{\partial}{\partial\omega} = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial\nu}, \quad h = \frac{h}{2\pi} \right).$$

Das Gesetz (1.1), das experimentell glänzend bestätigt ist, interpoliert zwischen zwei Grenzesetzen:

$$(i) \quad \underline{h\omega \ll kT}$$

$$u(\omega, T) \simeq \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT, \quad \text{Rayleigh(-Jeans)}_{1900}$$

und

$$(ii) \quad \underline{h\omega \gg kT}$$

$$u(\omega, T) \simeq \frac{h\omega^3}{\pi^2 c^3} e^{-h\omega/kT}, \quad \text{Wien}_{1896}$$

Das Wiensche Gesetz gab die Messungen von

Paschen, Rubens und Wien im Violettbereich

gut wieder. Experimentell waren Messungen im Infrarotbereich, wo Rayleigh-Jeans gilt, schwieriger. Planck fand (1.1) durch Interpolation zwischen (i) und (ii); (die Arbeit von Rayleigh war ihm wahrscheinlich nicht bekannt).

In der Planckschen Strahlungsformel (1.1) kommen eine damals schon bekannte und zwei damals neue Naturkonstanten, nämlich

$c$ : die Lichtgeschwindigkeit,

$k$ : die Boltzmannsche Konstante,

$h$ : das Plancksche Wirkungsquantum

vor, und Planck bestimmte durch Vergleich von (1.1) mit den experimentellen Daten erstmals  $k$  und  $h$ !



Aus (1.1) ergibt sich durch Integration über  $\omega$  das schon vorher aus Thermodynamik und klassischer Elektrodynamik hergeleitete Stefan - Boltzmannsche Gesetz für die Energiedichte der "schwarzen Strahlung":

$$u(T) = \sigma T^4, \quad (1.2)$$

mit

$$\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{15 (\hbar c)^3} \quad (1.3)$$

Außerdem ist (1.1) mit dem Wienschen Verschiebungsgesetz

$$u(\omega, T) = \omega^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right), \quad (1.4)$$

wo  $f$  eine universelle Funktion ist, vereinbar. Aus (1.4) folgt für die Frequenz  $\omega_*$ , in der  $u$  (für feste Temperatur  $T$ ) maximal wird,

$$\omega_* = b T. \quad (1.5)$$

Die Plancksche Formel sagt für  $b$  den Wert

$$b = x_* \frac{k}{h}, \quad (1.6)$$

wo  $x_* = 2.8214 \dots$  das Maximum der Funktion  $x^3 (e^x - 1)^{-1}$  ist; (die Form von (1.6) folgt allein aus (1.4), aber der Wert von  $x_*$  hängt von  $f$  ab).

Aus den gemessenen Werten von  $\sigma$  und  $b$  fand Planck

$$\left. \begin{aligned} k &= 1.34 \quad (1.3807) \times 10^{-23} \text{ J/K} \\ \frac{k}{h} &= 1.04 \quad (1.05459) \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{sec} \end{aligned} \right\} \quad (1.7)$$

und damit für die Loschmidtsche (Avogadro-  
sche) Zahl

$$N = \frac{R}{k} = 6.17 \quad (6.022) \times 10^{23} / \text{Mol.}$$

(In Klammern stehen die heutigen Werte).

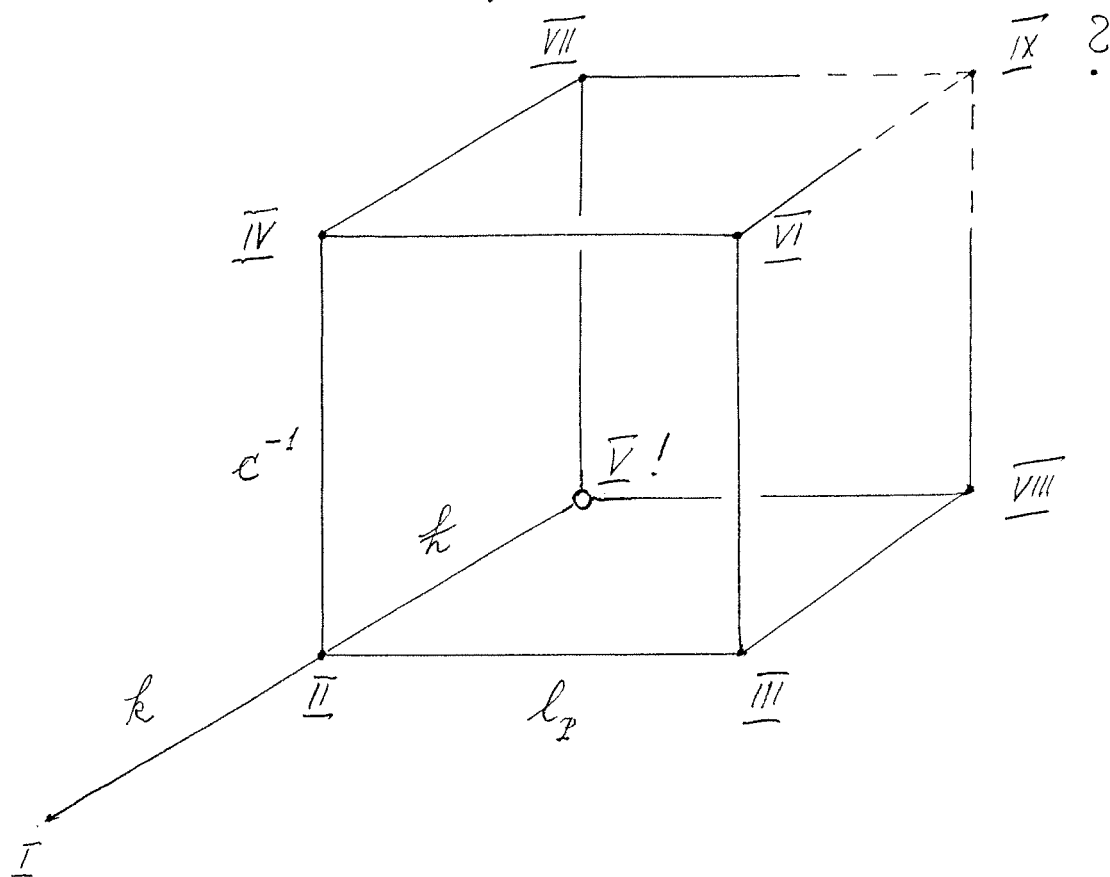
Aus der Faradayschen Konstanten,  $F$ , für Elektrolyten und  $N$  konnte Planck ausserdem die

Elementarladung  $e$  (Ladung eines Elektrons  $= -e$ ,  
und aus der Newtonschen Gravitationskonstanten  
 $G_N$  und  $\hbar$  und  $c$  die Plancklänge  $l_P$  be-  
stimmen:  $e = F/N$ ,  $l_P^2 = G_N \hbar / c^3$ .

Jede der vier Konstanten  $c$ ,  $k$ ,  $\hbar$  und  $l_P$   
steht für eine Revolution im physikalischen  
Weltbild, die im ersten Viertel des 20. Jahr-  
hunderts stattgefunden hat. An allen vier war  
Albert Einstein massgeblich beteiligt. Drei davon  
begannen in seinen berühmten vier Arbeiten aus  
dem Jahre 1905.

- $c$ : spezielle Relativitätstheorie
- $k, e$ : Triumph des Atomismus (über Kontinuums-  
theorien der Materie)
- $\hbar$ : Quantentheorie
- $l_P$ : Gravitationstheorie, Raum-Zeit Dynamik

Planck hat die revolutionären Veränderungen mit seinem Strahlungsgesetz (1.1) wider Willen eingeleitet und vorausgeahnt.



- I Kontinuumsmechanik, Thermodynamik
- II Hamiltonsche Mechanik, statistische Mechanik (Atomismus)
- III Himmelsmechanik, Newtonsches Gravitationsgesetz
- IV klassische, relativistische Feldtheorie, insb. Elektrodynamik

V nichtrelativistische Quantenmechanik

VI ART

VII relativistische Quantenfeldtheorie

VIII "nichtrelativistische Quantengravitation",  
nichtkommutative Riemannsche Geometrie

IX "String- / M-Theorie"

Die dimensionsbehafteten Naturkonstanten

$\hbar$ ,  $c^{-1}$ ,  $\hbar$  und  $l_p$  haben die Bedeutung von

"Deformationsparametern" (in einem ziemlich präzisen, mathematischen Sinn). In sog. natürlichen

Einheiten haben sie alle den Wert 1. Aber es geschieht oft, dass in natürlichen Prozessen "1"

vernachlässigbar klein gegenüber typischen

Zahlenwerten ist, die in solchen Prozessen vorkommen;

etwa  $\hbar \ll R$ , nämlich  $\hbar/R \sim 10^{-23}$ . Das ist der

tieferer Grund dafür, dass Physik als Wissenschaft überhaupt möglich ist.

In dieser Vorlesung geht es uns um Vertex V des "Planckschen (Hyper-) Würfels", die nichtrelativistische Quantenmechanik. Dass diese aus der Untersuchung eines Systems der relativistischen Quantentheorie (oder QFT), nämlich der Hohlraumstrahlung, herausgewachsen ist, ist eine eigentümliche historische Tatsache.

## 1.2. Bemerkungen zur theoretischen Interpretation der Planckschen Strahlungsformel

### (1) Elektrodynamische Grundlagen

Betrachten elektromagnetisches Feld in einem Würfel der Kantenlänge  $L$  mit ideal leitenden

Wänden. Die Maxwell'schen Gleichungen implizieren dann, dass das e.m. Feld äquivalent zu einem System unendlich vieler, ungekoppelter harmonischer Oszillatoren ist, nämlich den zeitlich periodischen, stehenden e.m. Schwingungen im Hohlraum.<sup>\*</sup> Diese lassen sich durch Wellenvektoren  $\vec{k}$  und Polarisationsvektoren  $\vec{E}(\vec{k}, \lambda)$ ,  $\lambda = 1, 2$ , indizieren. Für jeden Wellenvektor  $\vec{k}$  bilden  $\{\vec{E}(\vec{k}, 1), \vec{E}(\vec{k}, 2), \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}\}$  eine Orthonormalbasis von  $\mathbb{R}^3$ . Die Kreisfrequenz einer stehenden Schwingung mit Wellenvektor  $\vec{k}$  (mit Vakuum im Inneren des Hohlraums) ist

$$\omega = c |\vec{k}|. \quad (1.8)$$

Aus den Randbedingungen (ideal leitende Wände) folgt, dass jeder mögliche Wellenvektor,  $\vec{k}$ , einer

---

<sup>\*</sup> sog. Normalschwingungen

stehenden e.m. Schwingung im Hohlraum zur Meng

$$K := \left\{ \frac{\pi}{L} (n_1, n_2, n_3) \mid n_i = 0, 1, 2, \dots, n_1 n_2 + n_2 n_3 + n_3 n_1 > 0 \right\} \quad (1.9)$$

gehört. Die Bewegungsgleichung der Amplitude,

einer stehenden Schwingung mit Wellenvektor  $\vec{k}$

und Polarisation  $\vec{E}(\vec{k}, \lambda) \perp \vec{k}$  ist

$$\ddot{q}(\vec{k}, \lambda; t) + \omega^2(\vec{k}) q(\vec{k}, \lambda; t) = 0, \quad (1.10)$$

mit  $\omega(\vec{k})$  wie in (1.8).

Es bedeute  $N(\omega)$  die Anzahl der Feldoszillatoren (zeitlich periodischen stehenden Schwingungen des e.m. Feldes) zu Wellenvektoren  $\vec{k}$  mit

$|\vec{k}| \leq \frac{\omega}{c}$ . Dann findet man aus (1.9), dass

$$N(\omega) \simeq 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \left( \frac{\omega}{c} \right)^3 \cdot \left( \frac{\pi}{L} \right)^{-3}$$

$\nearrow$   
 2 Osz. pro  
 $\vec{k} \in K$

$\uparrow$   
 K ist ein  
 Oktant

$\uparrow$   
 Volumen der  
 Kugel vom  
 Radius  $\frac{\omega}{c}$

$\nwarrow$   
 Volumen pro  
 $\vec{k} \in K$



Daraus ergibt sich, dass

$$N(\omega) \simeq \frac{1}{3\pi^2} \cdot \frac{\omega^3}{c^3} \cdot L^3. \quad (1.11)$$

Die Anzahl der Feldoszillatoren im Spektralintervall  $[\omega, \omega + \Delta\omega]$  ist daher  $= n(\omega) \Delta\omega$ , wo

$$n(\omega) \simeq \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \cdot V, \quad (1.12)$$

wo  $V (= L^3)$  das Volumen des Hohlraums ist,

unter der Bedingung, dass  $\frac{\omega}{c} \gg \frac{\Delta\omega}{c} \gg \frac{\pi}{L}$ .

Aus der Tatsache, dass die Spur des Energie-Impuls Tensors des e.m. Feldes verschwindet, findet man die Zustandsgleichung für "natürliche Strahlung" (Planck)

$$p(\omega) = \frac{1}{3} u(\omega), \quad (1.13)$$

wo  $p(\omega) \Delta\omega$  den Druck der Hohlraumstrahlung im Spektralintervall  $[\omega, \omega + \Delta\omega]$  bezeichnet.

## (2) Thermodynamische Grundlagen

Aus dem 1. und 2. Hauptsatz der Thermodynamik

folgt man, dass die mittlere Energie eines Feldoszillators mit Wellenvektor  $\vec{k}$  und Polarisation  $\vec{E}(\vec{k}, \lambda)$  für Hohlraumstrahlung der Temperatur  $T$  nur von  $T$  und  $\omega = c|\vec{k}|$ , nicht aber von der Richtung von  $\vec{k}$  und der Polarisation abhängen kann. Wir bezeichnen sie mit  $E(\omega, T)$ . Mit (1.13) folgt dann rein thermodynamisch, dass

$$E(\omega, T) = \omega P\left(\frac{\omega}{T}\right), \quad (1.14)$$

(Wiensches Verschiebungsgesetz). Dabei ist  $P$  eine universelle (von den Einzelheiten des Hohlraums, wie der Beschaffenheit seiner Wände, unabhängige) Funktion des (dimensionsbehafteten) Quotienten  $\frac{\omega}{T}$ . Behandelt man die Feldoszillatoren nach den Regeln der klassischen statistischen Mechanik, so findet man

$$E(\omega, T) = kT \quad (1.15)$$

20

was auf das Rayleigh-Jeans'sche Gesetz (1.1) (i) führt. Das Wiensche Grenzgesetz (1.1) (ii) führt auf

$$E(\omega, T) = \hbar \omega e^{-\hbar \omega / kT} \quad (1.16)$$

Beide Ausdrücke, (1.15) und (1.16), genügen dem Wienschen Verschiebungsgesetz (1.14).

Aus der korrekten Planckschen Formel (1.1) folgt

$$E(\omega, T) = \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / kT} - 1} \quad (1.17)$$

was zwischen (1.15) ( $\hbar \omega \ll kT$ ) und (1.16) ( $\hbar \omega \gg kT$ ) interpoliert und ebenfalls (1.14) genügt.

Wäre das Grenzgesetz von Rayleigh-Jeans für beliebige  $\omega$  gültig, so folgte daraus, dass die Energiedichte der Hohlraumstrahlung

$$U = V \cdot \int_0^{\infty} u(\omega, T) d\omega \quad (1.18)$$

divergent wäre.

### (3) Einsteins Deutung der Planckschen Formel<sup>2.</sup>

In seiner berühmten Arbeit aus dem Jahre 1905 geht Einstein vom Wienschen Grenzzgesetz aus, weil er richtig erkennt, dass dieses die Abweichung von der klassischen Physik kundtut.

Sei  $S(U, V, N)$  die Entropie eines idealen Gases der inneren Energie  $U$  im Volumen  $V$ , das aus  $N$  Teilchen besteht. Der 1. und der 2. Hauptsatz der Thermodynamik geben

$$dS = \frac{1}{T} (dU + p dV - \mu dN) \quad (1.19)$$

d.h.

$$\left( \frac{\partial S}{\partial V} \right)_{U, N} = \frac{p}{T} = \frac{Nk}{V},$$

↑  
Zustandsgl. des idealen Gases

also

$$S(U, V, N) = S(U, V_0, N) + k \log \left( \frac{V}{V_0} \right)^N. \quad (1.20)$$

Dabei ist  $\left( \frac{V}{V_0} \right)^N$  die Wahrscheinlichkeit,  $N$  in  $V_0$  gleichverteilte, unabhängige Teilchen alle im Teilvolumen  $V$  anzutreffen.

Nun folgt aus (1.19) allgemein, dass

$$\left( \frac{\partial S}{\partial U} \right)_{V, N} = \frac{1}{T}$$

Benützen wir diese Formel zur Berechnung der Entropie,  $s$ , eines einzigen Feldoszillators der Kreisfrequenz  $\omega$ , so lautet sie

$$\frac{\partial s}{\partial E} = \frac{1}{T}, \quad \text{wobei}$$

$E = E(\omega, T)$  die innere (mittlere) Energie des Oszillators bezeichnet.

Aus (1.16) folgt nun, dass

$$\frac{\partial s}{\partial E} = \frac{1}{T} \stackrel{(1.16)}{=} - \frac{k}{\frac{E}{k\omega}} \ln \left( \frac{E}{k\omega} \right).$$

Durch Integration nach  $E$  ergibt sich

$$s(E) = -k \frac{E}{k\omega} \left[ \ln \left( \frac{E}{k\omega} \right) - 1 \right] + s_0. \quad (1.21)$$

Die Integrationskonstante  $s_0$  dürfen wir  $= 0$  setzen (3. Hauptsatz).

Für die Entropie aller Feldoszillatoren

im Frequenzintervall  $[\omega, \omega + \Delta\omega]$  findet man

$$\Delta S(U, V; \omega) = S(E) n(\omega) \Delta\omega,$$

mit

$$U = E n(\omega) \Delta\omega,$$

und  $n(\omega)$  wie in (1.12). Mit (1.21) und (1.12) folgt daher

$$\Delta S(U, V; \omega) = -k \frac{U}{\hbar\omega} \left[ \ln \left( \frac{U}{\frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} V \Delta\omega} \right) - 1 \right];$$

also

$$\begin{aligned} \Delta S(U, V; \omega) &= \Delta S(U, V_0; \omega) + k \frac{U}{\hbar\omega} \ln \left( \frac{V}{V_0} \right) \\ &= \Delta S(U, V_0; \omega) + k \ln \left( \frac{V}{V_0} \right) \frac{U}{\hbar\omega} \quad (1.22) \end{aligned}$$

Vergleich von (1.22) mit (1.20) führt Einstein zu folgender Deutung: "Monochromatische Strahlung geringer Dichte (innerhalb des Gültigkeitsbereichs der Wienschen Strahlungsformel) verhält sich in wärmetheoretischer Beziehung so, wie wenn

sie aus voneinander unabhängigen Energiequanten der Grösse  $h\nu$  bestünde."

Einstein interpretiert also  $\frac{U}{h\nu}$  als die Zahl der Photonen mit Energie  $h\nu$ . Die Idee des Lichtquants oder Photons wendet er darauf zur Erklärung der Stokes'schen Regel der Photolumineszenz (Frequenz des erzeugten Lichts  $\leq$  Frequenz des einfallenden Lichts) und auf die Theorie des Photoeffektes (zuerst entdeckt von Heinrich Hertz) an:

$$E_{\max}(e^-) = h\nu - P, \quad (1.23)$$

wo  $P$  die Austrittsarbeit der Elektronen ( $e^-$ ) aus einem Metall bedeutet. Erst die Versuche von Millikan, publiziert 1916, erlaubten es, die Gleichung (1.23) zu bestätigen.

Für die Lichtquantenhypothese und die Erklärung

des Photoeffekts erhielt Einstein 1921 den Nobelpreis.

#### (4) Einstein 1906/07

Die Plancksche Strahlungsformel (1.1) beruht auf der Formel (1.17) für die mittlere Energie,  $E(\omega, T)$ , eines Feldoszillators

$$E(\omega, T) = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$$

Einstein bemerkt nun, dass diese Formel aus der Quantenbedingung

$$E_n = \hbar\omega n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.24)$$

für die möglichen Energiewerte eines Feldoszillators der Frequenz  $\omega$  folgt, wenn man zur Berechnung der mittleren Energie die Boltzmannverteilung

$$p_n = \frac{1}{Z_\beta} e^{-\beta E_n}, \quad \beta = \frac{1}{kT} \quad (1.25)$$

benützt. Hier ist  $p_n$  die Wahrscheinlichkeit des



Oszillatorzustandes mit Energie  $E_n$  bei Temperatur  $T$ . Aus der Bedingung, dass

$$\sum_{n=0}^{\infty} p_n = 1,$$

folgt

$$Z_{\beta} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \quad (1.26)$$

Für die mittlere Energie  $E(\omega, T)$  findet man dann

$$E(\omega, T) = \sum_n E_n p_n = - \frac{\partial \ln Z_{\beta}}{\partial \beta}. \quad (1.27)$$

Für  $E_n$  wie in (1.24) ist (1.26) eine geometrische Reihe, und (1.27) impliziert (1.17)!

Eine (1.24) ähnliche Bedingung hat zuerst Planck für materielle harmonische Oszillatoren benützt.

Nun schlägt Einstein vor, dass (1.24) ganz allgemein für harmonische Oszillatoren der Kreisfrequenz  $\omega$  gelten müsse, und wendet diese Quantenbedingung auf die harmonischen Schwin-

gungen eines aus  $N$  Atomen bestehenden Kristalls an. Er behandelt die  $N$  Atome als voneinander unabhängige, drei dimensionale harmonische Oszillatoren gleicher Kreisfrequenz  $\omega$  und findet für die innere Energie

$$U(T) = 3N E(\omega, T) = 3N \frac{\hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1},$$

und daraus für die spezifische Wärme

$$C_v(T) = \frac{dU(T)}{dT} = 3Nk e^{\beta \hbar \omega} \left( \frac{\beta \hbar \omega}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \right)^2 \quad (1.28)$$

$$\approx \begin{cases} 3Nk, & \text{für } \beta \hbar \omega \ll 1, \\ 3Nk (\beta \hbar \omega)^2 e^{-\beta \hbar \omega}, & \beta \hbar \omega \gg 1. \end{cases}$$

Das klassische Grenzwgesetz ( $\beta \hbar \omega \ll 1$ ) ist das Gesetz von Dulong-Petit. Man findet aber aus (1.28) Abweichungen von Dulong-Petit für kleine Temperaturen ( $\beta \hbar \omega \gg 1$ ); insbesondere

$$C_v(T) \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0, \quad (1.29)$$

in Übereinstimmung mit Nernsts 3. Hauptsatz der Thermodynamik.

Einsteins naive Theorie der spezifischen Wärme von Kristallen wurde 1912 von Peter Debye verbessert. Sie stellt die erste Anwendung der Quantentheorie auf ein materielles System dar.

---

Zusammenfassung. Licht hat zugleich Wellen- und Teilchencharakter. Der Wellencharakter wird in allen Phänomenen der klassischen Elektrodynamik glänzend bestätigt. Der Teilchencharakter der Lichtquanten (Photonen) kommt dagegen im Wien-Planckschen Strahlungsgesetz ( $h\nu \gg kT$ ), im Photoeffekt und in der Compton Streuung klar zum Ausdruck. Die wichtigsten Formeln, die die

Einsteinsche Lichtquantenhypothese wiedergeben, sind:

Energie und Impuls einer elektromagnetischen Welle mit Wellenvektor  $\vec{k}$  kommen in Paketen (Photonen) der Grösse

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad (1.30)$$

mit  $\omega = c|\vec{k}|$ .

Innerhalb einer klassischen, deterministischen Theorie kann man den Wellencharakter des Lichts (Interferenz, Superpositionsprinzip, ...) mit den korpuskularen Eigenschaften des Lichts nicht vereinbaren. Gesucht ist eine neue Theorie, die diese beiden komplementären Aspekte der elektromagnetischen Strahlung vereinigt!

## 1.2. Versagen der klassischen Mechanik und Elektrodynamik in der Physik der Atome.

Experimenteller Nachweis der Existenz des Elektrons.

J. J. Thomson, 1897.

Durch Streuung von  $\alpha$ -Strahlen an Atomen ist Rutherford

auf folgendes Modell des Atoms gestossen

Atom besteht aus Atomkern der Ladung  $Ze$

( $Z = 1$  (H),  $2$  (He),  $3$  (Li),  $4, \dots$ ) und Durchmesser

ca.  $10^{-13} \div 10^{-12}$  cm. Um diesen kreisen  $Z$  als

punktförmig gedachte Elektronen mit Ladung  $-e$

auf Bahnen der Grösse  $\sim 10^{-8}$  cm  $= 1 \text{ \AA}$ ; ( $1 \text{ \AA} = 10^{-8}$  cm

$1 \mu = 10^{-4}$  cm  $\sim$  "Grenze zum Makroskopischen"). Die

Bindung der Elektronen an den Kern ist Folge der

Coulomb - Anziehung zwischen Kern und Elektron.

Auf dieses Modell schloss Rutherford durch exp.

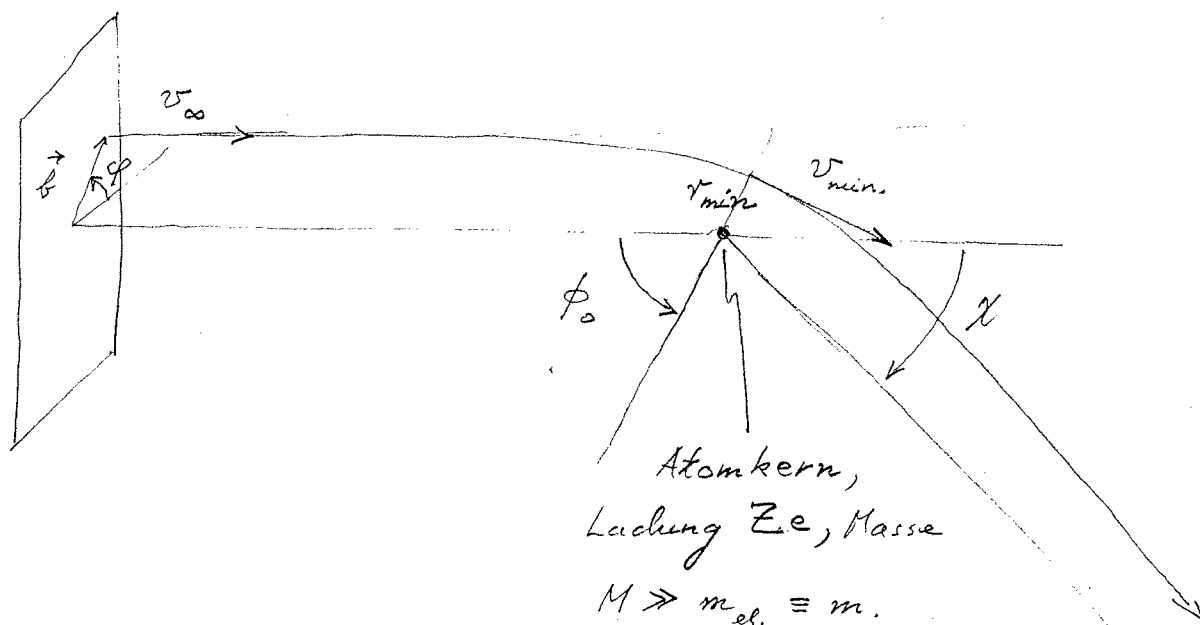
Bestimmung des differentiellen Wirkungsquerschnittes für Streuung von  $\alpha$ -Teilchen (He-Kerne, an Goldatomen). Er fand, dass das klassische Resultat

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{Ze^2}{16\pi E} \right)^2 \frac{1}{\left( \sin \frac{\theta}{2} \right)^4} \quad (*)$$

( $E$ : Energie der einfallenden  $\alpha$ -Teilchen,  $\theta$ : Streuwinkel), experimentell ausserordentlich gut bestätigt ist. Dies muss als "Zufall" angesehen werden, der darauf beruht, dass (\*) auch quantenmechanisch exakt ist.

Probleme mit dem Rutherford'schen Modell des Atoms;

- (1) Atom besteht hauptsächlich aus leerem Raum. Wieso sind dann Atome so hart?
- (2) Die Elektronen in der Atomhülle sind geladene Teilchen, die sich in beschleunigter Bewegung befinden. Nach der Maxwell'schen



Differentieller Wirkungsquerschnitt (berechnet nach der  
Newton'schen Mechanik  $\rightarrow$  Rutherford):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b db d\varphi}{\sin\chi d\chi d\varphi} = \frac{b}{\sin\chi} \left| \frac{d\chi}{db} \right|^{-1}$$

$$\begin{aligned} \frac{\pi}{2} - \frac{\chi}{2} = \phi_0 &= \int_{r_{min.}}^{\infty} \frac{l/r^2}{\sqrt{2m(E - V(r)) - l^2/r^2}} dr \\ &= \int_{r_{min.}}^{\infty} \frac{b/r^2}{\sqrt{1 - b^2/r^2 - (2V(r)/mv_{\infty}^2)}} dr \end{aligned} \quad \Rightarrow \chi = \chi(b)$$

Benutzt  $mv_{\infty} \cdot b = l$ ,  $\frac{mv_{\infty}^2}{2} = E$ ; weiter  $\left. \begin{aligned} mv_{min} r_{min} &= l, & m \frac{v_{min}^2}{2} + V(r_{min.}) &= E. \end{aligned} \right\}$

$$V(r) = - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{Ze^2}{16\pi\epsilon_0 E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\frac{\chi}{2})}}$$

Diese Formel ist auch quantenmechanisch richtig!

Exp.: Streuung von Elektronen an Goldfolien:  $\checkmark$

Theorie müssten sie dauernd e. m. Wellen abstrahlen. Dadurch verlieren sie Energie aus Strahlungsfeld und müssten nach kurzer Zeit in den Kern stürzen.

Was sagt uns die klassische (Hertz'sche) Strahlungsformel dazu? Ein Elektron auf einer Kreisbahn um den Kern mit Kreisfrequenz  $\omega$  strahlt e. m. Strahlung der Frequenz

$$\omega_l = l \omega, \quad l = 1, 2, 3, \dots$$

ab; (Jackson, p. 391-397). Die Strahlungsformel

ist aus der klassischen ED wohl bekannt und sagt, dass die abgestrahlte Leistung proportional zu  $a^2 \omega^4$ ,  $a$  = Radius der Bahn, ist.

Im Atom folgt daraus, dass diese Leistung proportional zu  $\omega^{8/3}$  ist. Klassisch ist jeder Wert von  $\omega$  erlaubt (und würde im Laufe der kurzen Lebensdauer eines Atoms einmal



angenommen). Dies ist im Widerspruch zu spektroskopischen Untersuchungen (Strahlung angeregter Na- oder H-Atome), die schon im 19. Jahrhundert durchgeführt wurden! Diese Untersuchungen ergaben, dass Atome nur Strahlung bestimmter diskreter Frequenzen abgeben können. Aus den vier sichtbaren Linien ( $n_f = 2, n = 3, 4, 5, 6$ ) des Wasserstoffatoms hat J. Balmer (Ann. Physik 25, 80 (1885)) die Formel<sup>\*</sup>

$$\omega_{n_f} = Z^2 R \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n_f < n, \quad (1.31)$$

( $n_f, n-1 = 1, 2, 3, \dots$ ) für die Kreisfrequenz des emittierten Lichts hergeleitet. Dabei ist  $Z$  die Atomzahl der Atomsorte, und  $R$  ist eine Konstante der Dimension  $\text{sec}^{-1}$ , die Rydberg Frequenz. Allgemeiner ergab sich aus spektroskopischen Untersuchungen an strahlenden Atomen das folgende Bild:

<sup>\*</sup> Diese Formel stellt die "Keplerschen Gesetze" der Atomphysik dar.

# Rydberg - Ritz 'sches Kombinationsprinzip (1905).

Wir betrachten eine bestimmte Atomsorte, z. B. Na-Atome. Ein System solcher Atome soll nun bestrahlt werden. Die Frage ist, welche Frequenzen beim Streulicht, d. h. in der von den angeregten Atomen ausgesandten Strahlung, überhaupt vorkommen können. Diese Frage kann experimentell durch spektroskopische Untersuchungen beantwortet werden. Rydberg und Ritz fanden, dass es für jede Atomsorte eine Folge von Energiewerten  $\{E_n\}_{n=1}^{\infty}$  gibt so, dass alle Frequenzen  $\omega$  der ausgesandten Strahlung von der Form

$$\omega = \frac{1}{h} (E_n - E_m), \quad (1.32)$$

$1 \leq m < n = 2, 3, \dots$ , sind. Dabei sind gewisse Paare von Indices  $m$  und  $n$  verboten (Auswahlregeln!) Wenn  $\omega_{nm}$  und  $\omega_{mk}$  gemäss (1.32) erlaubt sind, dann ist auch  $\omega_{nk} = \omega_{nm} + \omega_{mk}$  eine

beobachtete Frequenz; (Gruppoid-Struktur, nicht Gitterstr.).

Die Folge von Energiewerten  $\{E_n\}_{n=1}^{\infty}$  nennt man ein Term schema. Es hat sich herausgestellt, dass die Spektraltermine  $E_n$  von äusseren Feldern abhängen. Dreht man z. B. ein konstantes äusseres Magnetfeld an, so spalten gewisse Terme in Multipletts von Termen auf (Zeeman-Effekt). "Ähnliches" geschieht nach Einschalten eines elektrischen Feldes; (Stark Effekt).

Innerhalb der klassischen Mechanik und Elektrodynamik gibt es keine Erklärung für die Termschemata und Auswahlregeln der Atome.

### Bohr'sche Theorie des Wasserstoffatoms (1913)

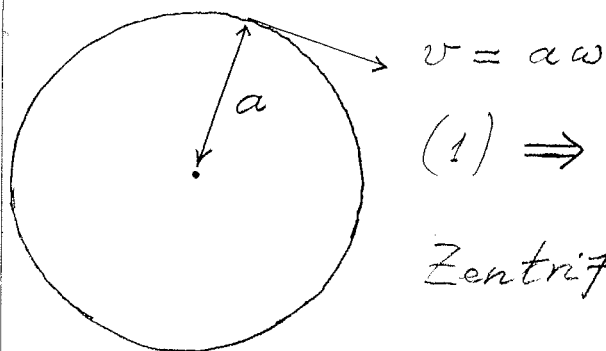
Das (1.31) zugrunde liegende Term schema des Wasserstoffatoms von Balmer wurde von Niels Bohr 1913 mit Hilfe einer Ausdehnung der Planck-Einstein'schen

Quantisierungsbedingung auf Atome erklärt.

### Bohrsche Postulate

(1) Drehimpuls eines Elektrons im Atom  $= n\hbar$ ,  $n=1,2,3,\dots$

Wendet man (1) auf Kreisbahnen an, so folgt sofort, dass die Energieniveaus des H-Atoms diskret sind:



$$(1) \Rightarrow m \omega a^2 = n\hbar, \quad n=1,2,3,\dots$$

Zentrifugalkraft = Coulombkraft  $\Rightarrow$

$$m \omega^2 a = \frac{Z e^2}{a^2}$$

Aus den beiden Gleichungen folgt:

$$a_n = \frac{\hbar^2 n^2}{Z e^2 m} = n^2 a_1, \quad \omega_n = \frac{Z^2 e^4 m}{\hbar^3 n^3} \quad (1.33)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow E_n &= \frac{m}{2} (\omega_n a_n)^2 - \frac{Z e^2}{a_n} \\ &= - \frac{m}{2} \frac{Z^2 e^4}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \\ &\equiv - Z^2 \text{Ryd} \frac{1}{n^2}, \quad n=1,2,3,\dots, \quad (1.34) \end{aligned}$$

mit  $\text{Ryd} = 13.6 \text{ eV}$ ,  $(\hbar = 6.5820 \times 10^{-16} \text{ eV sec})$ .

(2) Springt ein Elektron im Atom vom  $n$ ten auf das  $n_f$ te Energieniveau, so wird dabei Licht (ein Photon) der Kreisfrequenz  $\omega$  ausgestrahlt

wo

$$\hbar\omega = E_n - E_{n_f} \quad (1.35)$$

(1) & (2)  $\Rightarrow$  Balmerische Formel (1.31)!

Allgemein: Bohrs diskrete Energieniveaux sollten die Rydberg-Ritzschen Termschemata reproduzieren. Leider versagt aber die Bohrsche "Theorie" für Mehrelektronen-Atome.

"Erklärung" des ersten Bohrschen Postulats aus der Wellennatur der Materie: L. de Broglie (1923)

Bohrsches Korrespondenzprinzip (1923):

Für grosse "Hauptquantenzahlen",  $n$ , stimmen

Quantentheorie und klassische Theorie überein.

Anwendung auf Ausstrahlung von Atomen: Elek-

tron auf Kreisbahn mit Kreisfrequenz  $\omega$  strahlt Licht der Kreisfrequenzen  $l\omega$  aus, d.h. im Spektrum kommen  $\omega$  und alle höheren Harmonischen vor. Für die  $n^{\text{te}}$  Bohrsche Kreisbahn gilt

$$\omega = \omega_n = \frac{2Z^2}{\hbar n^3} \text{ Ryd}, \quad (1.36)$$

siehe (1.33), (1.34). Aus der Balmerschen Formel (1.31) folgt, dass

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{Z^2}{\hbar} \text{ Ryd} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n^2} \right) \\ &\simeq \frac{Z^2}{\hbar} \text{ Ryd} \frac{1}{n^2} \left[ 1 + 2 \frac{n-n_f}{n} + \dots - 1 \right] \\ &= \frac{2Z^2}{\hbar n^3} \text{ Ryd} \Delta n + \dots \\ &\simeq \Delta n \omega_n, \quad \Delta n = n - n_f = 1, 2, 3, \dots, \end{aligned}$$

für  $n$  gross, d.h.  $\frac{\Delta n}{n} \ll 1$ . Dies ist in Übereinstimmung mit dem Bohrschen Korrespondenzprinzip!

Erfolge der Bohrschen Theorie: Richtiger Wert für <sup>39</sup>

$R$  und  $R_{yd}$ , richtige Grössenordnung für  $a_0$ ;

Erklärung von  $R_{yd}(He^+)$ :  $R_{yd}(H) = 4.00(16)$ ;

Auffindung neuer Linien in Sternspektren; Bestimmung der Kernladungszahl  $Z$  der Elemente (Mosley, ab 1913)  $\Rightarrow$  Aufdeckung von Lücken im periodischen System der Elemente.

Sommerfelds Verallgemeinerung der Bohrschen "Theorie"

(1913 - 1917)

Die Quantenbedingung (1.24) (Einstein) und das erste Bohrsche Postulat sind Spezialfälle der Bedingung

$$\oint p dq = n \cdot h, \quad n = (0), 1, 2, \dots \quad (1.37)$$

für die Quantisierung der Bahnen eines Hamiltonschen System von nur einem Freiheitsgrad.

Sommerfeld dehnt die Bedingung auf allgemeine integrable Hamiltonsche Systeme von  $f$  Freiheits-

graden mit Phasenraum  $\Gamma = \mathbb{R}^{2f}$  aus. Nach einem fundamentalen Satz von (Liouville, Jacobi) Arnol'd und Jost verlaufen Trajektorien solcher Systeme auf  $f$ -dimensionalen Tori. Jeden solchen Torus kann man durch  $f$  Winkel

$$\underline{\varphi} = (\varphi_1, \dots, \varphi_f) \quad (1.38)$$

parametrisieren, die untereinander in Involution sind, d.h.

$$\{\varphi_i, \varphi_j\} = 0, \quad \forall i, j. \quad (1.39)$$

Ausserdem kann man  $f$  Funktionen

$$\underline{W} = (W_1, \dots, W_f) \quad (1.40)$$

auf  $\mathbb{R}^{2f}$  konstruieren, die untereinander ebenfalls in Involution sind, so, dass jeder invariante Torus eine Niveaufläche von  $\underline{W}$  ist, und dass

$$\{W_i, \varphi_j\} = \delta_{ij}. \quad (1.41)$$

Man nennt  $\underline{\varphi}$  Winkelvariablen und  $\underline{W}$



Wirkungsvariablen. Die Hamilton Funktion,  $H$ , eines integrablen Systems ist eine Funktion,  $H(\underline{W})$ , der Wirkungsvariablen allein.

Sommerfeld fordert nun (für separable Hamiltonsche Systeme), dass, in Verallgemeinerung von (1.37),

$$W_k = n_k h, \quad n_k \in \mathbb{Z}, \quad (1.42)$$

(resp.  $n_k \in \mathbb{Z}_+$ , falls  $W_k \geq 0$ ),  $k=1, \dots, f$ .

Durch die  $f$  Quantenbedingungen (1.42) werden die "erlaubten Bahnen" und deren Energien,  $E(\underline{n}) = H(\underline{W} = \underline{n} h)$ ,  $\underline{n} = (n_1, \dots, n_f)$ , bestimmt.

Sommerfeld hat diesen Ansatz auf das Keplerproblem angewandt ( $f=3$ ) und damit nicht nur die Bohrschen Energieniveaux reproduziert, sondern auch deren Entartung ( $n^2$  "erlaubte Bahnen" der Energie  $E_n = -Z^2 \text{Ryd} \frac{1}{n^2}$ , korrekt voraus gesagt. Leider hat Sommerfelds

4

Ansatz schon im Falle des He-Atoms versagt.  
Doch hat er für eine heuristische Deutung der  
Atomspektren mit Hilfe von "Quantenzahlen" zur  
Indizierung von Termen eine wichtige Rolle ge-  
spielt.

Wir werden Sommerfelds Behandlung des H-  
Atoms in den Übungen nachvollziehen.

### Einstein (1917)

Neue Herleitung der Planckschen Formel;  
Emission und Absorption von Licht durch Atome  
und Moleküle; spontane Emission (A- und  
B-Koeffizienten, und Beziehung zwischen diesen);  
 $\vec{p} = \hbar \vec{k}$  für Photonen  $\Rightarrow$  Photonen sind "Teilchen":  
 $\rightarrow$  QM II.

### Louis de Broglie (1923)

Wellennatur der Materie:  $\rightarrow$  Kap. 2.

## (Bose und) Einstein (1924)

Bose gibt noch eine weitere Herleitung der Planckschen Formel ("Photonen haben Bose-Statistik"), Angeregt von den Arbeiten von Bose und de Broglie entwickelt Einstein die Theorie des idealen Bose-Gases (von Atomen oder Molekülen), inkl. die Bose-Einstein Kondensation.

## Bohr, Kramers, Slater; Smekal; Kramers, Heisenberg, Pauli, ... (1923/24)

Streuung von Licht an Atomen (Rayleigh Streuung); nicht-kohärente Streustrahlung; Elektronen und Hohlraumstrahlung; ... (Vertiefung von Ideen von Bohr, Einstein und Sommerfeld; z. T. falsch, aber wichtige Vorbereitung für Heisenberg).

## Chronologie des Jahres 1925

Januar: Pauli formuliert das Ausschlussprinzip und eine zweiwertige (Spin-) Quantenzahl für Elektronen im Rahmen der "alten Quantentheorie"; (Anw. z. B. auf anomalen Zeeman Effekt).

W. Thomas und W. Kuhn finden eine Summenregel für die Intensitäten von Spektrallinien, die für die Entdeckung der Matrixmechanik durch Heisenberg eine wichtige Rolle gespielt hat.

Juli: Entdeckung der Matrixmechanik durch W. Heisenberg: "Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen", Zeitschrift für Physik 33 (1925), 879 - 893.

Diese geniale Arbeit wollen wir nun verkürzt nachvollziehen.

Wir gehen, wie Sommerfeld, von einem integrat.

len Hamiltonschen System mit  $f$  Freiheitsgraden aus, für das wir Winkel-,  $\underline{\varphi}$ , und Wirkungsvariablen,  $\underline{W}$ , benützen. Sei  $x$  irgendeine "Observable" des Systems, d.h. eine reelle, stetige Funktion auf dem Phasenraum  $\mathbb{R}^{2f}$ . Das für die folgenden Gedankengänge wichtige Beispiel ist

$x$  = eine Komponente des totalen elektrischen Dipolmomentes des Systems (für den Fall von  $N$  elektrisch geladenen Punktteilchen,  $f = 3N$ ).

$x = x(\underline{\varphi}, \underline{W})$  ist eine periodische Funktion von  $\underline{\varphi} \in \mathbb{T}^f$  und kann daher in eine Fourier-Reihe entwickelt werden:

$$x = \sum_{\underline{n} \in \mathbb{Z}^f} \hat{x}_{\underline{n}}(\underline{W}) e^{i\underline{n} \cdot \underline{\varphi}} \quad (1.43)$$

Die Zeitentwicklung der Observablen  $x$  findet man aus den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{\varphi}_j = \frac{\partial H(\underline{W})}{\partial W_j} \equiv \omega_j(\underline{W}), \quad (1.44)$$

$$\dot{W}_j = \frac{\partial H(\underline{W})}{\partial \varphi_j} = 0, \quad (1.45)$$

für alle  $j = 1, \dots, f$ , mit der Lösung

$$\underline{W} = \underline{W}_0 = \text{const.}, \quad \underline{\varphi} = \underline{\varphi}_0 + \underline{\omega} \cdot t \quad (1.46)$$

Daraus erhält man, dass

$$x(t) = \sum_{\underline{n} \in \mathbb{Z}^f} \hat{x}_{\underline{n}}(\underline{W}_0) e^{i(\underline{n} \cdot \underline{\varphi}_0 + \omega^{(\underline{n})} \cdot t)}, \quad (1.47)$$

$$\text{wo } \omega^{(\underline{n})} = \underline{n} \cdot \underline{\omega}, \quad \underline{\omega} = (\nabla H)(\underline{W} = \underline{W}_0) \quad (1.48)$$

Offenbar ist  $x(t)$  eine quasi-periodische Funktion der Zeit  $t$  mit Frequenzen  $\omega^{(\underline{n})}$  wie in (1.48).

Wenn nun  $x$  die Bedeutung einer Komponente des totalen elektrischen Dipolmomentes hat, so folgt aus den Maxwell'schen Gleichungen — wie von H. Hertz experimentell und theoretisch gezeigt — dass Licht der Kreisfrequenzen  $\omega^{(\underline{n})}$ ,  $\underline{n} \in \mathbb{Z}^f$ , ausgesandt wird. Diese Kreisfrequenzen definieren

eine Darstellung der abelschen Gruppe  $\mathbb{Z}^{\neq}$ :

$$\omega^{(\underline{n})} + \omega^{(\underline{m})} = \omega^{(\underline{n} + \underline{m})}, \quad \underline{n}, \underline{m} \in \mathbb{Z}^{\neq}. \quad (1.49)$$

Die Voraussage (1.49) widerspricht den experimentellen Befunden, so wie sie im Rydberg-Ritz-schen Kombinationsprinzip zusammengefasst sind:

Die (Kreis) Frequenzen des von einem solchen System ausgesandten Lichts stellen ein Gruppoid,  $G$ , und nicht eine abelsche Gruppe dar.  $G$  besteht aus gewissen Paaren,  $(\underline{\mu}, \underline{\nu})$ , von Quantenzahlen,  $\underline{\mu}$  und  $\underline{\nu}$ , des Systems, mit  $(\underline{\mu}, \underline{\nu}), (\underline{\nu}, \underline{\lambda})$  in  $G \Rightarrow (\underline{\mu}, \underline{\lambda}) = (\underline{\mu}, \underline{\nu}) \circ (\underline{\nu}, \underline{\lambda}) \in G$ . Nach Rydberg und Ritz gilt dann, dass

$$\omega_{\underline{\mu} \underline{\lambda}} = \omega_{\underline{\mu} \underline{\nu}} + \omega_{\underline{\nu} \underline{\lambda}}, \quad (1.50)$$

$(\underline{\mu}, \underline{\nu}), (\underline{\nu}, \underline{\lambda}) \in G$ . Die Frequenz-Bedingung von Bohr, Einstein und Sommerfeld sagt nun,

dass

$$\omega_{\underline{\mu} \underline{\nu}} = \omega_{\underline{\mu}} - \omega_{\underline{\nu}}, \quad (1.51)$$

wo  $\underline{\mu}, \underline{\nu}$  die Quantenzahlen "erlaubter Bahnen" des Systems sind. Nach Bohr und Sommerfeld gilt dann, dass

$$\left. \begin{aligned} \hbar \omega_{\underline{\mu}} &= H(\underline{W}_{\underline{\mu}}), \quad \text{wo} \\ \underline{W}_{\underline{\mu}} &= h \underline{\mu}, \quad \underline{\mu} \in \mathbb{Z}^f \end{aligned} \right\} \quad (1.52)$$

Der Ansatz (1.52) ergab zumindest für harmonische Oszillatoren und für das H-Atom die richtigen Term schemata.

Heisenberg's Ansatz vom Juli 1925 kulminierte in der Forderung, dass "Observablen"  $x$  quantenmechanisch nur von Paaren  $(\underline{\mu}, \underline{\nu}) \in \mathcal{G}$  von Quantenzahlen erlaubter Übergänge abhängen dürfen, korrekter von Paaren  $(\underline{\mu}, \underline{\nu})$  von



Quantenzahlen "erlaubter Bahnen". Die Fourierkoeffizienten  $\hat{x}_{\underline{n}}(\underline{W} = h\underline{\mu})$  für Sommerfelds erlaubte Bahnen, resp. Tori, sind durch "Schemen"

$$(x_{\underline{\mu}\underline{\nu}}) \quad (1.53)$$

zu ersetzen. Das Bohrsche Korrespondenzprinzip (siehe (1.36) und folgende Formel) legt dann nahe, dass

$$x_{\underline{\mu}\underline{\mu}+\underline{n}} \simeq \hat{x}_{\underline{n}}(\underline{W} = h\underline{\mu}), \quad (1.54)$$

falls  $0 < |\underline{n}| \ll |\underline{\mu}|$  ist. Da  $x$  reell ist, gilt, dass

$$\hat{x}_{-\underline{n}}(\underline{W}) = \hat{x}_{\underline{n}}(\underline{W})^*$$

wo  $*$  komplexe Konjugation bedeutet; was mit (1.54) die allgemeine "Realitätsbedingung"

$$x_{\underline{\mu}\underline{\nu}}^* = x_{\underline{\nu}\underline{\mu}} \quad (1.55)$$

nahelegt.

Wenn  $x^{(1)}$  und  $x^{(2)}$  zwei Observablen des

klassischen Systems sind, dann gilt natürlich, dass

$$\left( \chi^{(1)} \cdot \chi^{(2)} \right)_{\underline{m}}^{\wedge}(\underline{W}) = \sum_{\underline{m} \in \mathbb{Z}^f} \hat{\chi}^{(1)}_{\underline{n}-\underline{m}}(\underline{W}) \cdot \hat{\chi}^{(2)}_{\underline{m}}(\underline{W}).$$

Heisenberg schlägt nun vor, dieses Konvolutionsprodukt auf der Gruppe  $\mathbb{Z}^f$  durch das Produkt

$$\left( \chi^{(1)} * \chi^{(2)} \right)_{\underline{\mu}\underline{\nu}} = \sum_{\underline{\lambda}} \chi^{(1)}_{\underline{\mu}\underline{\lambda}} \cdot \chi^{(2)}_{\underline{\lambda}\underline{\nu}} \quad (1.56)$$

zu ersetzen, wo  $\underline{\mu}$ ,  $\underline{\lambda}$  und  $\underline{\nu}$  Quantenzahlen "erlaubter Bahnen" sind. Gl. (1.56) ist nichts

anderes als das Matrixprodukt, und (1.56)

definiert eine Darstellung des Gruppoids der Paare von Quantenzahlen erlaubter Bahnen.

Kombiniert man das Rydberg-Ritzsche Kombinationsprinzip (1.50) mit der Bohr-Sommerfeldschen Frequenzbedingung (1.51) und der Hertzschen Theorie der Dipolstrahlung, so gelangt

man zur Ansicht dass, wenn  $x$  eine Komponente des elektrischen Dipolmomentes ist, dann

$$\begin{aligned} x_{\mu\nu}(t) &= x_{\mu\nu} e^{i\omega_{\mu\nu} t} \\ &= e^{i\omega_{\mu} t} x_{\mu\nu} e^{-i\omega_{\nu} t} \end{aligned} \quad (1.57)$$

Reinterpretiert man die klassische Hamiltonfunktion quantenmechanisch als "Diagonalschema", od. Diagonalmatrix,  $(H_{\mu\nu})$ , mit, nach (1.52),

$$H_{\mu\nu} = \hbar \omega_{\mu} \delta_{\mu\nu}, \quad (1.58)$$

dann kann man (1.57) als die Gleichung

$$x_{\mu\nu}(t) = \left( e^{i(Ht)/\hbar} * x * e^{-i(Ht)/\hbar} \right)_{\mu\nu} \quad (1.59)$$

schreiben, und Heisenberg fordert nun (1.59) für beliebige Observablen  $x$ .

Nun möchte aber Heisenberg das Bohr-Sommerfeldsche Bild "erlaubter Bahnen", das in der klassischen Physik wurzelt, aus der

Quantentheorie verbannen und sucht deshalb nach einem Ersatz für Sommerfelds Quantenbedingungen (1.42), (1.52). Diesen findet er in der Thomas-Kuhn'schen Summenregel:

In einem Atom ist eine Komponente,  $x$ , des elektrischen Dipolmomentes dasselbe wie  $-Ne \times \{ \text{entsprechende Komponente des Schwerpunkts der Elektronenkonfiguration} \}$ , wo  $e$  die und  $N = \# \text{ Elektronen.}$  Elementarladung ist, Setzen wir  $X = -\frac{x}{Ne}$ , dann ist  $P = M\dot{X}$  die zu  $X$  kanonisch konjugierte Komponente des Schwerpunktim-pulses, wo  $M$  die Gesamtmasse der Elektronen ist. Die Thomas-Kuhn'sche Summenregel besagt nun, dass

$$[X, P]_{\mu\mu} := (X * P)_{\mu\mu} - (P * X)_{\mu\mu} = i\hbar \quad (1.60)$$

Diese Summenregel soll nun heuristisch begründet werden. Mit (1.55), (1.56) und (1.57) findet man, wenn man  $P$  wieder durch  $M\dot{X}$  ersetzt, dass

$$\begin{aligned} [X, P]_{\mu\mu} &= (X * M\dot{X})_{\mu\mu} - (M\dot{X} * X)_{\mu\mu} \\ &= 2iM \sum_{\underline{\nu}} |X_{\mu\underline{\nu}}|^2 \omega_{\underline{\nu}\mu}. \end{aligned} \quad (1.61)$$

Im Bereich  $0 < |\underline{\mu} - \underline{\nu}| \ll |\underline{\mu}|$  kann man Bohr's Korrespondenzprinzip benützen:

$$\begin{aligned} X_{\mu\underline{\nu}} &\simeq \hat{X}_{\underline{\mu}-\underline{\nu}}(\underline{W} = \hbar\underline{\mu}), \quad \omega_{\underline{\nu}\mu} \simeq (\underline{\nu} - \underline{\mu}) \cdot \underline{\omega}, \\ \text{mit} \quad \underline{\omega} &\simeq (\nabla H)(\underline{W} = \hbar\underline{\mu}). \end{aligned} \quad (1.62)$$

Würden diese Gleichungen exakt gelten, so fände man mit (1.61) sofort

$$[X, P]_{\mu\mu} = 0,$$

wie nicht anders zu erwarten ist. Denn wenn

(1.62) exakt wäre, so folgte

$$[X, P]_{\mu\mu} = \left( X \cdot M\dot{X} \right)_{\underline{n}=0}^{\wedge} - \left( M\dot{X} \cdot X \right)_{\underline{n}=0}^{\wedge} = 0.$$

Die Thomas - Kuhn'sche Summenregel erfasst also

gerade die Abweichung des \* Produkts der Quantenmechanik vom kommutativen Produkt von Funktionen auf dem Phasenraum des klassischen Systems.

Wir berechnen nun die R.S. von (1.61) heuri-  
stisch für das Wasserstoffatom; (noch einfacher  
ist der von Heisenberg betrachtete harmonische  
Oszillator - siehe Übungen). Dazu benützen  
wir das Bohrsche Modell des Wasserstoffatoms,  
das das richtige Termschema liefert, und die  
Frequenzbedingung (1.51), um die Korrektur-  
terme in der zweiten Gl. von (1.62), d.h. die  
Abweichung von der klassischen Strahlungs-  
theorie zu bestimmen. Wir berücksichtigen  
nur Kreisbahnen und die Hauptquanten-  
zahl  $n$ . Für eine Kreisbahn gilt, dass

$$\hat{X}_k (L = \hbar n) = \frac{1}{2} \delta_{k, \pm 1} \xi_n, \quad (1.63)$$

wo  $\xi_n \propto$  Radius der Kreisbahn.

Aus dem Bohrschen Modell und dem Korrespondenzprinzip folgt nun für  $|n| \gg 1$ , dass

$$|X_{nn\pm 1}|^2 \simeq |\hat{X}_{\pm 1}(L = \hbar n)|^2 = \frac{1}{4} |\xi_n|^2 \quad (1.64)$$

mit

$$|\xi_n|^2 \simeq \frac{2}{3} \frac{a_n^2}{Z}, \quad a_n = n^2 a_1, \quad a_1 = \frac{\hbar^2}{e^2 M};$$

( $a_1$  ist der Bohr Radius des H-Atoms, und  $Z$  ist die Atomzahl, d.h.  $Ze$  ist die Kernladung). Weiter ist, siehe (1.32), (1.34), (1.36),

$$\begin{aligned} \omega_{n+k, n} &= \frac{Z^2}{\hbar} \text{Ryd} \left( \frac{1}{(n+k)^2} - \frac{1}{n^2} \right) \\ &= \frac{Z^2}{\hbar} \text{Ryd} \frac{1}{n^2} \left( \frac{1}{1 + 2\frac{k}{n} + \left(\frac{k}{n}\right)^2} - 1 \right) \\ &= -2 \frac{Z^2}{\hbar} \text{Ryd} \frac{k}{n^3} + 3 \frac{Z^2}{\hbar} \text{Ryd} \frac{k^2}{n^4} + \dots, \end{aligned} \quad (1.65)$$

mit

$$\text{Ryd} = \frac{M}{2} \frac{e^4}{\hbar^2}.$$

Wegen (1.63) besteht die Summe auf der R.S. von (1.61) aus nur gerade zwei Termen, zu  $k = \pm 1$ .

Setzt man dann (1.64) und (1.65), für  $k = \pm 1$ , auf der R.S. von (1.61) ein, so findet man:

$$\begin{aligned}
[X, P]_{nn} &= 2iM \sum_k |X_{nn+k}|^2 \omega_{n+k, n} \\
&\simeq 2iM \frac{Z^2}{\hbar} \cdot 2 \frac{M}{2} \frac{e^4}{\hbar^2} \frac{1}{2 \cdot 3} \frac{\hbar^4}{Z^2 e^4 M^2} n^4 \frac{3}{n^4} \\
&= i\hbar ;
\end{aligned}$$

wie wir in den Übungen auch für den harmonischen Oszillator bestätigen werden.

September: Born und Jordan erkennen in Heisen-

bergs Schemen Matrizen und entwickeln die mathematischen Grundlagen der "Matrizenmechanik".

Reellen Funktionen auf dem Phasenraum eines mechanischen Systems werden systematisch Hermiteische Matrizen zugeordnet. Für Hamilton Funktionen

der Form  $H(p, x) = \frac{p^2}{2M} + V(x)$  argumentieren

Born und Jordan mit Heisenberg, dass die

quantenmechanischen gleich wie die klassischen

Bewegungsgleichungen lauten sollen:

$$\begin{aligned}
\dot{X} &= \frac{i}{\hbar} [H, X] \stackrel{!}{=} \frac{1}{M} P \\
&\uparrow \quad \hbar \\
(1.58), (1.59)
\end{aligned}$$



und

$$\dot{P} = \frac{i}{\hbar} [H, P] \stackrel{!}{=} - \frac{\partial V}{\partial X}$$

Daraus folgt dann, dass

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} [H, [X, P]] &= [\dot{X}, P] + [X, \dot{P}] \\ &= \left[ \frac{P}{M}, P \right] - \left[ X, \frac{\partial V}{\partial X}(X) \right] = 0, \end{aligned}$$

wo  $[A, B] := A * B - B * A$  (Kommutator von A und B).

Andererseits gilt, dass

$$\frac{i}{\hbar} [H, [X, P]]_{\underline{\mu} \underline{\nu}} = i (\omega_{\underline{\mu}} - \omega_{\underline{\nu}}) [X, P]_{\underline{\mu} \underline{\nu}}.$$

Unter der Annahme, dass  $\omega_{\underline{\mu}} \neq \omega_{\underline{\nu}}$ , für  $\underline{\mu} \neq \underline{\nu}$ , folgt dann, dass

$$[X, P]_{\underline{\mu} \underline{\nu}} = 0, \quad \text{für } \underline{\mu} \neq \underline{\nu}.$$

Zusammen mit der Thomas - Kubischen Summenregel folgt nun, dass

$$[X, P] = i\hbar \mathbb{I}, \quad (1.66)$$

d. h. die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen.

Natürlich sind die Born - Jordanschen Argumente etwas zirkulär; aber (1.66) hat sich bewährt!

Oktober: Goudsmit und Uhlenbeck deuten Paulis neue zweiwertige Quantenzahl als Spin (Eigendrehimpuls) des Elektrons und drücken das magnetische Moment des Elektrons durch seinen Spin aus.

Anfangs November: Unabhängig von Born und Jordan entwickelt Dirac aus dem Heisenbergschen Ansatz die definitive Form der nichtrelativistischen Quantenmechanik.

Phasenraumgeometrie  $\longrightarrow$  "Quantengeometrie" (B-J,  
reelle Funktion auf  $\longrightarrow$  hermitesche Quadrat-  
Phasenraum matrix

$$\{F, G\} \longrightarrow \frac{i}{\hbar} [F, G] \quad (\text{Dirac})$$

$$\dot{F} = \{H, F\} \longrightarrow \dot{F} = \frac{i}{\hbar} [H, F]$$

Transformationstheorie:  $F \sim T F T^{-1} =: \tilde{F}$ ;  
damit  $\tilde{F}$  wieder hermitesch  $\Rightarrow T$  unitär!

Mitte November: Born, Heisenberg und Jordan\*  
 geben unabhängig von Dirac eine umfassende  
 Darstellung der neuen Theorie. Hermitesche  
 Matrizen wirken auf Hilbertraum; Auftreten  
 kontinuierlicher Spektren, Störungstheorie,  
 Theorie des quantenmechanischen Drehimpulses  
 auf der Grundlage der Vertauschungsrelationen

$$[L_x, L_y] = \frac{\hbar}{i} L_z + \text{zyklisch.}$$

Quantisierung der schwingenden Saite.

Aufgaben: Anwendungen (z.B. H-Atom-Pauli  
 1926; ...); mathematische Grundlagen;  
Interpretation der QM.

\*

sog. "Dreimännerarbeit"

# Die Wellenmechanik

(Schrödingers "annus mirabilis" 1926)

Ausgangspunkt für die Entwicklung der Wellenmechanik ist die Analogie

$$\begin{array}{ccc} \text{Strahlenoptik} & \sim & \text{Hamiltonsche Mechanik} \\ \downarrow & & \downarrow \\ \text{Wellenoptik} & \sim & \text{"Wellenmechanik" ?} \end{array}$$

Strahlenoptik und Hamiltonsche Mechanik können in der Form von Variationsprinzipien formuliert werden:

$$\delta \int n(x(s)) ds = 0 \quad (\text{Fermat}) \quad (1.67,$$

$$\delta \int \sqrt{E - V(x(s))} ds = 0 \quad (\text{Euler - Maupertuis}) \quad (1.68)$$

Gl. (1.67) charakterisiert den geometrischen Ort von Lichtstrahlen in einem Medium mit Brechungsindex  $n(x)$ , (1.68) den Ort mechanischer Bahnen eines Teilchens im Potential  $V(x)$  mit Gesamtenergie  $E$ .

Es folgt ein kurzer Abriss der Optik.

## (1) Strahlenoptik.

In (1.67), (1.68) bedeutet  $s$  die Bogenlänge eines Strahls resp. einer Bahn. Es empfiehlt sich jedoch, den Strahl oder die Bahn durch einen beliebigen Kurvenparameter  $t$  zu parametrisieren, mit  $ds = |\dot{x}(t)| dt$ . Ausserdem soll hier zuerst eine Hamiltonsche Behandlung der Strahlenoptik auseinandergesetzt werden: Als Hamilton Funktion benützen wir

$$H(p, x) = \frac{1}{2} (p^2 - k^2(x)), \quad (1.69)$$

und die Bahnen sollen auf der Energiefläche

$$H(p, x) = 0 \quad (1.70)$$

verlaufen. Dabei ist  $k(x) := n(x) \frac{\omega}{c}$ . Aus

(1.69) folgen die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{x} = p, \quad \dot{p} = -k' \quad (1.71)$$

mit dem Integral

$$H(p, x) = H(\dot{x}, x) = 0,$$

siehe (1.70). Nun benützen wir wieder die Bogenlänge,  $s$ , als Strahlparameter:

$$\dot{s} = \underbrace{|\dot{x}|}_{(1.71)} = \underbrace{|p|}_{(1.70)} = k(x) \quad (1.72)$$

Daraus folgt für eine Funktion  $F$  der Bogenlänge:

$$\dot{F} = \dot{s} \frac{dF}{ds} = k \frac{dF}{ds} \quad (1.73)$$

Aus (1.71) erhält man, dass  $\ddot{x} = k \nabla k$ , und mit (1.73) daher:

$$k \frac{d}{ds} \left( k \frac{dx}{ds} \right) = k \nabla k, \quad \text{oder}$$

$$\frac{d}{ds} \left( k(x) \frac{dx}{ds} \right) = \nabla k(x), \quad (1.74)$$

d.h. die Strahlengleichung. Sie ist die Euler-

Lagrange Gleichung zum Fermatschen Funktional

$$\int_{s(x_1)}^{s(x_2)} k(x(s)) ds, \quad \left( k = n \frac{\omega}{c} \right). \quad (1.75)$$

Dies zeigt man wie folgt: Wir parametrisieren einen Lichtstrahl durch einen Kurvenparameter  $t \in [0, 1]$ , mit  $x(0) = x_1$  und  $x(1) = x_2$  fest. Es gilt, dass

$$ds = |\dot{x}(t)| dt, \quad |\dot{x}(t)| = \sqrt{\dot{x}(t) \cdot \dot{x}(t)}.$$

Fermat verlangt, dass

$$\delta(1.75) = \delta \int_0^1 k(x(t)) |\dot{x}(t)| dt \stackrel{!}{=} 0. \quad (1.76)$$

Daraus folgt (Euler-Lagrange Gl.), dass

$$\frac{d}{dt} \left( k \frac{\dot{x}}{|\dot{x}|} \right) - \nabla k \cdot |\dot{x}| = 0,$$

oder

$$|\dot{x}| \frac{d}{ds} \left( k \frac{1}{|\dot{x}|} |\dot{x}| \frac{dx}{ds} \right) = \nabla k \cdot |\dot{x}|,$$

d.h.

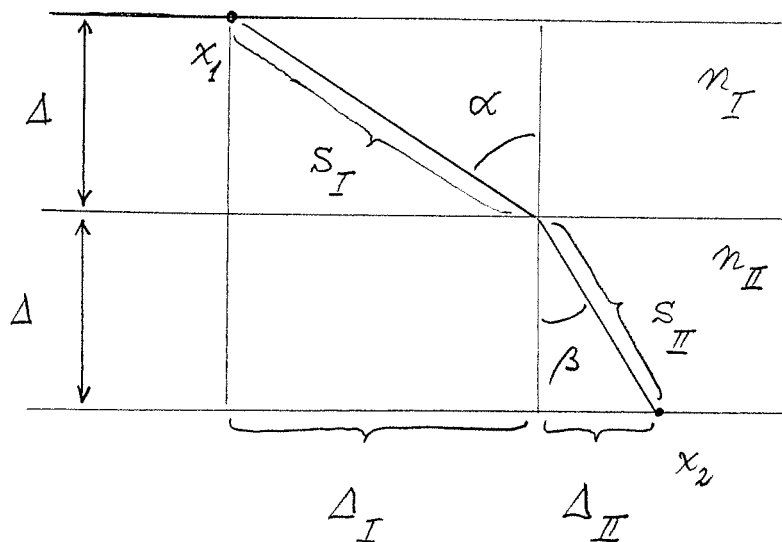
$$\frac{d}{ds} \left( k \frac{dx}{ds} \right) = \nabla k,$$

und das ist die Strahlengleichung (1.74).

Bemerkung. Das Fermatsche Prinzip,  $\delta(1.75) = 0$ ,

ist die infinitesimale Formulierung des Snelliusschen

Brechungsgesetzes.



Im Fermatschen Prinzip sind die Endpunkte des Lichtstrahls,  $x_1$  und  $x_2$ , fest. Wenn  $\Delta$  fest ist, so folgt also, dass

$$\Delta_1 + \Delta_2 = \Delta \tan \alpha + \Delta \tan \beta = \text{const.},$$

d.h.

$$\tan \alpha + \tan \beta =: a = \text{const.} \quad (1.77)$$

Fermats Prinzip verlangt,  $n_I s_I + n_{II} s_{II}$  zu minimisieren unter der Nebenbedingung (1.77); d.h.

$$\left. \frac{d}{d\alpha} (n_I s_I + n_{II} s_{II}) \right|_{(1.77)} = 0 \quad (1.78)$$

Die Figur zeigt, dass

$$s_I = \frac{\Delta}{\cos \alpha}, \quad s_{II} = \frac{\Delta}{\cos \beta}$$

Daher folgt aus (1.78):

$$\Delta \left( n_I \cdot \frac{\sin \alpha}{\cos^2 \alpha} + n_{II} \frac{\sin \beta}{\cos^2 \beta} \cdot \frac{d\beta}{d\alpha} \right) = 0, \quad (1.79)$$

wo  $\frac{d\beta}{d\alpha}$  aus der Nebenbedingung (1.77) folgt:

$$\frac{d}{d\alpha} (1.77) = 0 \Rightarrow \frac{1}{\cos^2 \alpha} + \frac{1}{\cos^2 \beta} \cdot \frac{d\beta}{d\alpha} = 0$$

In (1.79) eingesetzt, folgt:

$$\Delta \left( n_I \frac{\sin \alpha}{\cos^2 \alpha} - n_{II} \frac{\sin \beta}{\cos^2 \alpha} \right) = 0, \quad \text{d.h.}$$



$$n_I \sin \alpha = n_{II} \sin \beta,$$

und das ist das Snelliussche Gesetz.

Nun untersuchen wir die verkürzte Hamilton-Jacobi Gleichung zur Hamilton Funktion (1.69) und  $E=0$  (Nebenbedingung (1.70)!):

$$H(\nabla S, x) = 0 \Rightarrow |\nabla S| = k \quad (1.80)$$

Das ist die Eikonalgleichung. Da

$$\nabla S = p = \dot{x},$$

sind die Lichtstrahlen offenbar die Orthogonaltrajektorien zu den Niveauflächen der Funktion  $S$ , die aus der Eikonalgleichung zu bestimmen ist.

Nun reproduzieren wir den Übergang von der Strahlen - zur

## (2) Wellenoptik

Es sei

$$\psi(x, t) = u_\omega(x) e^{-i\omega t}, \quad (1.81)$$

wo  $\text{Re } \psi$  eine Komponente des elektrischen oder

magnetischen Feldes einer monochromatischen Welle sei. Die Funktion  $\psi$  erfüllt die Wellengleichung

$$\left( \frac{n^2(x)}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \psi = 0. \quad (1.82)$$

Setzt man den Ansatz (1.81) in (1.82) ein, so folgt die Helmholtzgleichung:

$$(\Delta + k^2(x)) u_\omega(x) = 0. \quad (1.83)$$

Zur Lösung von (1.83) machen wir den Ansatz

$$u(x) = A(x) e^{iS(x)}, \quad A, S \text{ reell.} \quad (1.84)$$

Einsetzen in (1.83) und Zerlegen in Real- und Imaginärteil ergibt dann:

$$(\nabla S)^2 = k^2 + \frac{\Delta A}{A}, \quad \frac{\nabla A}{A} \cdot \nabla S = -\frac{1}{2} \Delta S \quad (1.85)$$

Die Strahlenoptik erscheint im Grenzfall, wo

$$\left| \frac{\Delta A}{A} \right| \ll k^2, \quad (1.86)$$

also

$$(\nabla S)^2 \simeq k^2,$$

was der Eikonalgleichung entspricht.

### (3) Übergang von der Hamiltonschen Mechanik zur Wellenmechanik.

So wie die Strahlenoptik in der Eikonalgleichung (1.80) und der Gleichung  $\dot{x} = p = \nabla S$  zusammengefasst ist, so lässt sich die Hamiltonsche Mechanik eines Punktteilchens in einem zeitunabhängigen Potentialfeld  $V(x)$  durch die verkürzte Hamilton-Jacobi Gleichung

$$H(\nabla S, x) = \frac{1}{2m} (\nabla S)^2(x) + V(x) = E \quad (1.87)$$

ausdrücken, mit

$$m \dot{x} = p = \nabla S. \quad (1.88)$$

Der Zusammenhang zwischen dem Prinzip von Euler-Hauptweis (1.68) und (1.87), (1.88) entspricht demjenigen zwischen dem Fermatschen Prinzip und der Eikonalgleichung (1.80).

So wie die Eikonalgleichung eine Approximation

zur Wellenoptik ist, siehe (1.82)-(1.86), so soll die Hamilton-Jacobi Gleichung (1.87) nach Schrödinger als "Eikonalapproximation" zu einer Wellengleichung für die de Broglieschen Materiewellen aufgefasst werden!

Nach de Broglie ist der Wellenvektor,  $k$ , der Materiewelle eines Teilchens mit Impuls  $p$  durch

$$k = \frac{p}{\hbar} \quad (1.89)$$

gegeben, und deren Kreisfrequenz  $\omega$  durch

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad (E = H(p, x)). \quad (1.90)$$

Für  $H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$  folgt, mit (1.87), (1.88)

und (1.89), dass

$$|k| = \frac{|p|}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(E - V(x))}}{\hbar} \stackrel{(1.87)}{=} \frac{|\nabla S|}{\hbar} \quad (1.91)$$

Diese Gleichung entspricht der Eikonalgleichung

(1.80), wenn man  $S_{\text{Optik}} \sim \frac{S_{\text{Mechanik}}}{\hbar}$  setzt.

6

Der Helmholtzgleichung (1.83) muss dann offenbar die Gleichung

$$(\Delta + k^2(x)) u_\omega(x) = 0 \quad (1.92)$$

Für eine Wellenfunktion  $\psi(x,t) = u_\omega(x) e^{-i\omega t}$ ,

die die Materiewelle eines Teilchens im äusseren

Potential  $V(x)$  beschreibt, entsprechen; und dabei ist

$$k^2(x) \stackrel{(1.91)}{=} \frac{|pS|^2}{\hbar^2} \stackrel{(1.87)}{=} \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \quad (1.93)$$

Die Gleichungen (1.92) und (1.93) sind äquivalent zur zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x)\right) u_\omega(x) = E u_\omega(x), \quad (1.94)$$

mit  $E = \hbar\omega$ . Setzt man den Ansatz

$$u_\omega(x) = A(x) e^{iS(x)/\hbar} \quad (1.95)$$

in die Gleichung (1.94) ein, dann folgt im Grenzfall, wo  $|dA/A| \ll k^2 = \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$ ,

wieder die Hamilton-Jacobi Gleichung (1.87)! <sup>70</sup>

Wenn  $u_\omega$  (1.94) erfüllt, mit  $\omega = \frac{E}{\hbar}$ , dann erfüllt  $\psi(x, t) = u_\omega(x) e^{-i\omega t}$  die Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi, \quad (1.96)$$

und das ist die zeitabhängige Schrödingergleichung. Da diese linear und homogen ist, kann die allgemeine Lösung von (1.96) als Superposition der speziellen Lösungen  $\psi = u_\omega e^{-i\omega t}$ , wo  $u_\omega$  (1.94) erfüllt, dargestellt werden.

Wir studieren kurz den Spezialfall von (1.96), wo  $V \equiv 0$ , nämlich die Schrödingergleichung für ein kräftefreies Teilchen in  $n$  Dimensionen.

Wir fassen (1.96) als ein Aufangswertproblem auf, mit  $\psi(x, 0) = \psi_0(x)$  vorgegeben. Wir lösen dieses Anfangswertproblem zunächst für

$\psi_0(x) = \delta(x-x_0)$ , ( $n$ -dim. Diracsche  $\delta$ -Funktion).

Offenbar gilt, dass

$$\delta(x-x_0) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int e^{ik \cdot (x-x_0)} d^n k. \quad (1.97)$$

Für die Lösung,  $\psi(x, t)$ , von (1.96) mit  $V \equiv 0$  zur Anfangsbedingung  $\psi(x, 0) = \delta(x-x_0)$  machen

wir nun den Ansatz

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int e^{i[k \cdot (x-x_0) - \omega(k) \cdot t]} d^n k. \quad (1.98)$$

Eingesetzt in (1.96) finden wir, dass

$$\omega(k) = \hbar \frac{k^2}{2m} \quad (1.99)$$

sein soll. Nun berechnen wir (1.98) mit Hilfe von quadratischer Ergänzung und Gaußscher Integration:  $y := x - x_0$ ,

$$\hbar \cdot y - \frac{\hbar k^2}{2m} t = - \underbrace{\left( \hbar k - \frac{m}{t} y \right)^2}_{=: \varrho} \frac{t}{2m\hbar} + \frac{m}{2t\hbar} y^2$$

Dann

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} e^{\frac{im}{2t\hbar}(x-x_0)^2} \int_{\mathbb{C}} e^{-\frac{it}{2m\hbar}q^2} d^n q.$$

Setzt man  $q = (1-i\varepsilon)t$ ,  $\varepsilon > 0$ , so konvergiert das Gaußsche Integral, und wir finden (für  $\varepsilon \rightarrow 0$ ,

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{(2\pi i \frac{t}{\hbar})^{n/2}} \left(\frac{m}{t}\right)^{n/2} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2t} (x-x_0)^2} \\ &=: K^{(n)}(x-x_0, t). \end{aligned} \quad (1.100)$$

Die allgemeine Lösung des Anfangswertproblems (1.96), ergibt sich aus (1.100) durch Superposition:

$$\psi_0(x) = \int \delta(x-x_0) \psi_0(x_0) d^n x_0$$

$$\Rightarrow \psi(x, t) = \int_{\mathbb{R}^n} K^{(n)}(x-x_0, t) \psi_0(x_0) d^n x_0. \quad (1.101)$$

Falls  $|\psi_0(x)|$  integrierbar in  $x$  ist, so folgt

aus (1.101) und (1.100) die Abschätzung

$$|\psi(x, t)| \leq \text{const. } t^{-n/2},$$

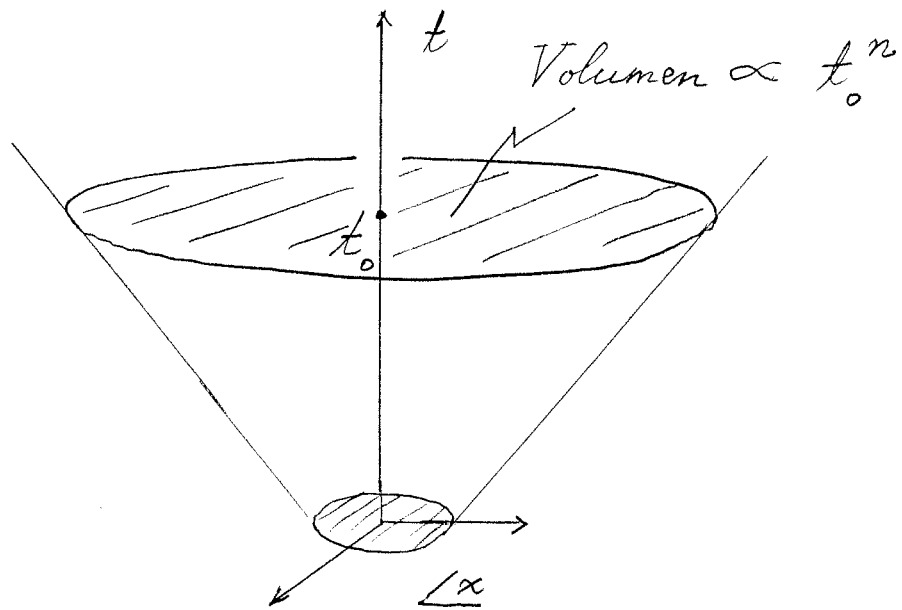
und

$$w(x, t) = |\psi(x, t)|^2 \leq \text{const. } t^{-n} \quad (1.102)$$



7.

Diese Abschätzungen zeigen, dass das Wellenpaket  $\psi(x, t)$  so zerfließt, wie man es im  $n$ -dimensionalen Raum erwarten würde, wenn man  $\psi(x, t)$  als Verteilung des Orts,  $x$ , des Teilchens interpretiert.



### Wellenmechanik von Systemen (Schrödinger 1926)

Schrödinger formuliert nun die Wellenmechanik systematisch für Lagrangesche Systeme mit Lagrange Funktion

$$L(x, \dot{x}) = T(x, \dot{x}) - U(x), \quad (1.103)$$

wo  $x = (x^1, \dots, x^f)$  beliebige (lokale) Koordinaten eines Konfigurationsraums  $K$  sind, der durch

eine "beliebige", glatte  $f$ -dimensionale Mannigfaltigkeit beschrieben wird; (Standardbeispiel:  $K = \mathbb{R}^f$ ,  
 Der Phasenraum,  $\Gamma$ , des Systems entspricht dann dem Kotangentialbündel,  $T^*K$ , von  $K$ . Schrödinger nimmt an,  $V(x)$  sei eine glatte (der Einfachheit halber nach unten beschränkte) Funktion, und  $T(x, \dot{x})$  sei eine positiv-definite quadratische Form in  $\dot{x} = (\dot{x}^1, \dots, \dot{x}^f)$ :

$$T(x, \dot{x}) = \frac{1}{2} g_{kl}(x) \dot{x}^k \dot{x}^l, \quad (1.104)$$

wo  $(g_{kl}(x))$  eine Riemannsche Metrik auf  $K$  definiert. Bei einem Koordinatenwechsel

$$\tilde{x}^k = \tilde{x}^k(x^1, \dots, x^f), \quad k = 1, \dots, f,$$

findet man, dass

$$\dot{\tilde{x}}^k = \frac{\partial \tilde{x}^k}{\partial x^l} \dot{x}^l, \quad \tilde{g}_{mn}(\tilde{x}) = g_{kl}(x) \frac{\partial x^k}{\partial \tilde{x}^m} \cdot \frac{\partial x^l}{\partial \tilde{x}^n}.$$

Die kanonischen Impulse sind durch

---

\* Wir verwenden die Einsteinsche Summationskonvention.

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^k} = g_{kl} \dot{x}^l \Rightarrow \dot{x}^l = g^{lm} p_m \quad (1.105)$$

gegeben, wo  $(g^{lm})$  die Inverse von  $(g_{jk})$  ist.

Die Hamilton Funktion ist nach (1.103), (1.104)

$$H(p, x) = \frac{1}{2} g^{kl}(x) p_k p_l + U(x) \equiv \frac{1}{2} (p, p) + U(x). \quad (1.106)$$

Die Impulse transformieren unter einem Koordinatenwechsel gemäss

$$\tilde{p}_k = p_m \frac{\partial x^m}{\partial \tilde{x}^k},$$

wo  $(\tilde{p}_1, \dots, \tilde{p}_f)$  kanonisch konjugiert zu  $(\tilde{x}^1, \dots, \tilde{x}^f)$

sind. Man sieht dann, dass  $\frac{1}{2} (p, p) = \frac{1}{2} (\tilde{p}, \tilde{p})$

koordinatenunabhängig ist. Die Impulse trans-

formieren offenbar wie die Komponenten des Gradienten einer Funktion. Wenn  $S$  eine Funktion auf  $K$  ist, so ist dann

$$(\nabla S, \nabla S) := \frac{1}{2} g^{kl}(x) \frac{\partial S}{\partial x^k}(x) \frac{\partial S}{\partial x^l}(x)$$

koordinatenunabhängig.

Die verkürzte Hamilton-Jacobi Gleichung für die

Wirkungsfunktion  $S$  lautet

$$H(\nabla S, x) = \frac{1}{2} (\nabla S, \nabla S) + U(x) = E, \quad (1.107)$$

mit  $p = \nabla S$ , oder  $\dot{x}^l = g^{lm}(x) \frac{\partial S}{\partial x^m}(x)$ .

Der Laplace - Beltrami Operator,  $\Delta$ : Da  $T$  positiv-

definit sein soll, muss  $(g_{kl}(x))$  eine strikte positive Matrix sein,  $\forall x \in K$ . Daraus folgt, dass

$$g(x) = \det(g_{kl}(x)) > 0, \quad \forall x \in K.$$

Aus den Transformationsformeln für  $(g_{kl})$  folgt, dass

$$\tilde{g}(\tilde{x}) = g(x) \det \left( \frac{\partial x^k}{\partial \tilde{x}^m} \right)^2$$

Diese Gleichung zeigt, dass

$$d\text{vol}(x) := \sqrt{g(x)} \, d^k x \quad (1.108)$$

ein koordinatenunabhängiges Volumenmass auf  $K$  definiert. Seien  $u$  und  $v$  zwei glatte

Funktionen auf  $K$  von kompaktem Träger. Wir definieren den Laplace (-Beltrami) Operator,  $\Delta$ ,

koordinatenunabhängig durch die Gleichung

$$\int_K \text{dvol} \ u \ (\Delta v) := - \int_K \text{dvol} \ (\nabla u, \nabla v) \quad (1.109)$$

Im Koordinaten

$$\begin{aligned} \int_K \sqrt{g} \, d^f x \ u(\Delta v) &:= - \int_K \sqrt{g} \, d^f x \ g^{kl} \frac{\partial u}{\partial x^k} \cdot \frac{\partial v}{\partial x^l} \\ &= \int_K \sqrt{g} \, d^f x \ u \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^k} \left( \sqrt{g} \ g^{kl} \frac{\partial v}{\partial x^l} \right), \end{aligned}$$

und wir haben partiell integriert. Da  $u$  beliebig ist, folgt

$$\Delta v = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^k} \left( \sqrt{g} \ g^{kl} \frac{\partial v}{\partial x^l} \right) \quad (1.110)$$

Übung. Man benütze (1.109) oder (1.110), um die Identitäten

$$\Delta(uv) = u(\Delta v) + 2(\nabla u, \nabla v) + (\Delta u)v$$

und

$$e^{-u}(\Delta e^u) = \Delta u + (\nabla u, \nabla u) \quad (1.111)$$

zu beweisen.

Schrödinger quantisiert das hier betrachtete Hamiltonsche System, indem er die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \Delta + U(x)\right) u(x) = E u(x) \quad (1.112)$$

ansetzt. Mit

$$u(x) = A(x) e^{iS(x)/\hbar} \quad (1.113)$$

findet man dann mit (1.111) die Gleichungen

$$\frac{1}{2} (\nabla S, \nabla S) + U(x) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\Delta A}{A} = E,$$

$$\left(\text{und } \frac{\nabla A}{A} \cdot \nabla S = -\frac{1}{2} \Delta S, \nearrow (1.85)\right).$$

Wenn  $\hbar \rightarrow 0$ , geht die erste Gleichung in die Hamilton-Jacobi Gleichung über. Eine Lösung von (1.112) beschreibt eine monochromatische Welle

$$\psi(x, t) = u(x) e^{-i\omega t},$$

mit Kreisfrequenz  $\omega = E/\hbar$ . Damit findet man die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2} \Delta + U\right) \psi \quad (1.114)$$

Essentiell ist die Beobachtung, dass die Schrödingerschen Wellenfunktionen auf dem  $f$ -dimen-

sionalen Konfigurationsraum des Systems definiert  
sind, und nicht auf dem physikalischen Raum  $E^3$ . Die Koordinaten  $x^j$  brauchen keine Ortskoordinaten zu sein, sondern könnten z. B. Amplituden von Normalschwingungen des elektromagnetischen Feldes in einem Hohlraum sein.

### Beispiele

#### 1. N-Teilchensystem.

$$L = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N m_k (\dot{\vec{x}}_k)^2 - U(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N),$$

mit  $K = \mathbb{R}^{3N}$ . Dies führt auf die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( - \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_j} \Delta_j + U \right) \psi,$$

wo

$$\Delta_j = \sum_{l=1}^3 \frac{\partial^2}{(\partial x_j^l)^2}.$$

Allgemeiner: Teilchen im äusseren elektromagnetischen Feld mit Vektorpotential  $\vec{A}(\vec{x}, t)$  (z. B. in der Coulomb Eichung  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ ); Führt auf

die Schrödinger Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; t) = \left( \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_j} (-i\vec{\nabla}_j - \frac{e_j}{\hbar c} \vec{A}(\vec{x}_j, t)) \right. \\ \left. + \sum_{j=1}^N e_j \phi(\vec{x}_j, t) + U(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \right) \psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; t). \quad (1.115)$$

(Wird in den Übungen studiert!)

Diese Beispiele führen auf die Substitutionsregel

$$p_j \longmapsto \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j} \quad (1.116)$$

## 2. Punktteilchen auf Einheitskugel

Polarkoordinaten im physikalischen Raum

$$\vec{x} = r (\sin\vartheta \cos\varphi, \sin\vartheta \sin\varphi, \cos\vartheta)$$

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\vartheta^2 + r^2 \sin^2\vartheta d\varphi^2$$

$$\Rightarrow (g_{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \sin^2\vartheta \end{pmatrix}, \quad \sqrt{g} = r^2 \sin\vartheta.$$

$$(g^{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^{-2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{r^2 \sin^2\vartheta} \end{pmatrix}$$



Mit (1.110)

$$\Delta = \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial r} \cdot \right) + \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \cdot \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} \cdot \right) \right]$$

$$= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Lambda, \quad \text{wo}$$

$$\Lambda = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \cdot \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

(Laplace - Beltrami Operator auf Einheitskugel).

$$L = T = \frac{\oplus}{2} |\dot{\vec{n}}|^2 = \frac{\oplus}{2} (\dot{\vartheta}^2 + \sin^2 \vartheta \dot{\varphi}^2)$$

Dies führt auf die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2 \oplus} \Lambda \psi \quad (1.117)$$

Anwendung: 2-atomige Moleküle (e.g. spezifische Wärme).

Härteres Beispiel: Allg. starrer Körper; (evtl. Übungen).

Alle diese Beispiele wurden schon von Schrödinger im Jahre 1926 durchexerziert!

## 2. Einige mathematische Grundlagen der Quantenmechanik

In der von Heisenberg, (Born, Jordan und Dirac) entdeckten Form der Quantenmechanik wird gefordert, dass reellen Funktionen auf dem Phasenraum eines klassischen Systems quantenmechanisch hermitesche Quadrat-  
matrizen zugeordnet seien. Quadratische Matrizen beschreiben lineare Transformationen eines  
Vektorraums (linearen Raums), dessen Dimension der Zahl der Spalten, resp. Zeilen der Matrizen, (d.h. der Anzahl möglicher Quantenzahlen "erlaubter Zu-  
stände") entspricht. Wir nennen diesen Vektorraum  $V$ .<sup>\*)</sup> Wir haben auch gesehen, dass zwei quantenmechanische Beschreibungen äquivalent  
sind, falls die "Observablen" (hermitesche Matrizen),

<sup>\*)</sup> Es ist natürlich,  $V$  als Vektorraum über  $\mathbb{C}$  aufzufassen.

$F_1$ , der Beschreibung 1 ähnlich zu den "Observablen",  
 $F_2$ , der Beschreibung 2 sind. Damit sowohl  $F_1$   
als auch  $F_2$  hermitesch sind, muss die Ähnlich-  
keits transformation,  $T$ , die  $F_1$  in  $F_2$  überführt,

$$F_2 = T F_1 T^{-1},$$

proportional zu einer unitären Matrix sein. Denn

$$\begin{aligned} \overline{(F_2)_{nm}} &= \sum_{l,k} \overline{T_{nl}} \overline{(F_1)_{lk}} \overline{T_{km}^{-1}} \\ &= \sum_{l,k} \overline{T_{km}^{-1}} (F_1)_{kl} \overline{T_{nl}} \quad (F_1 \text{ hermitesch}) \\ &\stackrel{!}{=} (F_2)_{mn} \quad (F_2 \text{ hermitesch}) \\ &= \sum_{k,l} T_{mk} (F_1)_{kl} T_{ln}^{-1}, \end{aligned}$$

für beliebige hermitesche Matrizen  $F_1$ . Daraus folgt

nun, dass

$$T_{lk}^{-1} = \overline{T_{kl}}, \quad \forall (kl),$$

d.h.  $T$  ist eine unitäre Matrix, bis auf einen Zahlenfakto

Die Begriffe "hermitesche Matrix" und "unitäre  
Matrix" erfordern, dass der komplexe Vektorraum  $\mathcal{V}$

mit einem Skalarprodukt versehen sein soll. Fasst

man  $\mathcal{V}$  als linearen Raum von Folgen,  $u = (u_n)_{n=0}^{\infty}$ ,

$v = (v_n)_{n=0}^{\infty}$ , ... komplexer Zahlen auf, so operiert

eine Matrix  $F = (F_{nm})_{n,m=0,1,2,\dots}$  auf den Vektor

$u \in \mathcal{V}$  wie folgt:

$$(Fu)_n = \sum_{m=0}^{\infty} F_{nm} u_m. \quad (2.1)$$

Ein natürliches Skalarprodukt,  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ , auf  $\mathcal{V}$  ist durch

$$\langle u, v \rangle := \sum_{n=0}^{\infty} \overline{u_n} v_n \quad (2.2)$$

gegeben. Für eine beliebige Matrix  $F$  auf  $\mathcal{V}$

gilt dann, dass

$$\langle u, Fv \rangle = \langle F^* u, v \rangle, \quad (2.3)$$

wo  $F^*$  die zu  $F$  adjungierte Matrix ist, d.h.

$$(F^*)_{nm} = \overline{F_{mn}}. \quad (2.4)$$

Ist  $F$  hermitesch, dann gilt offenbar, dass

$$F^* = F; \quad (2.5)$$

jedenfalls formal. (Die Einzelheiten sind subtiler,

was schon Born, Heisenberg und Jordan bekannt war!

Allgemein gilt nun, dass  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  antilinear im ersten und linear im zweiten Argument ist, dass

das Skalarprodukt positiv-definit ist, ( $\langle u, u \rangle = 0$

$\Rightarrow u = 0, \forall u$ ), und dass  $\langle u, v \rangle = \overline{\langle v, u \rangle}$ ;

wie man leicht der Definition (2.2) entnimmt.

Eine Norm,  $\|(\cdot)\|$ , auf  $V$  ist durch

$$\|u\| := \sqrt{\langle u, u \rangle}, \quad u \in V \quad (2.6)$$

definiert. Aus diesen Definitionen und Eigenschaften lassen sich die folgenden Konsequenzen herleiten:

(i) Schwarzsche Ungleichung

$$|\langle u, v \rangle| \leq \|u\| \cdot \|v\| \quad (2.7)$$

(Beweis wie im endlich-dimensionalen Fall.)

(ii) Dreiecksungleichung

$$|\|u\| - \|v\|| \leq \|u + v\| \leq \|u\| + \|v\|. \quad (2.8)$$

(iii) Wenn  $F = F^*$  eine hermitesche Matrix auf  $V$  ist, dann ist der "Erwartungswert" von  $F$

in einem Vektor  $u \in V$ ,  $\langle u, Fu \rangle$ , reell:

$$\langle u, Fu \rangle = \langle F^* u, u \rangle \underset{\substack{\uparrow \\ F \text{ hermitesch}}}{=} \langle Fu, u \rangle \underset{\substack{\uparrow \\ \langle \cdot, \cdot \rangle \text{ ein Skalarprod.}}}{=} \overline{\langle u, Fu \rangle}. \quad (2.9)$$

Wenn nun  $V$  ein (i.a.  $\infty$  dimensionaler) komplexer Vektorraum mit Skalarprodukt  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  ist, dann

kann man  $V$  stets zu einem Hilbertraum,  $\mathcal{H}$ , vervoll-

ständigen: Es sei  $\{u^{(n)}\}_{n=0}^{\infty}$  eine unendliche Folge

von Vektoren in  $V$ . Wir sagen,  $\{u^{(n)}\}_{n=0}^{\infty}$  sei eine

Cauchy Folge in der starken Topologie von  $V$ , falls

es für jedes  $\varepsilon > 0$  eine Zahl  $N = N(\varepsilon) < \infty$  gibt so,

dass

$$\|u^{(n)} - u^{(m)}\| < \varepsilon, \quad \forall n, m > N. \quad (2.10)$$

Nun gibt es i.a. keine Gewähr, dass eine Cauchy

Folge  $\{u^{(n)}\}$  gegen einen Vektor  $u \in V$  konver-

giert. Wir können aber eine Äquivalenzklasse von

Cauchy Folgen mit einem Vektor identifizieren, den

wir einfach zu  $V$  hinzufügen, falls die Cauchy

Folgen nicht ohnehin einen gemeinsamen Grenzwert in  $V$  haben. Auf diese Weise erreicht man, dass alle Cauchy Folgen konvergieren. Der lineare Raum,  $\mathcal{H} = \overline{V}$ , der auf diese Weise als Vervollständigung von  $V$  entsteht, ist ein Hilbertraum, nämlich ein Vektorraum mit Skalarprodukt, der in der durch das Skalarprodukt definierten Norm, siehe (2.6), vollständig ist; (d.h. alle Cauchy Folgen konvergieren gegen einen Grenzvektor in  $\mathcal{H}$ ). Man sagt,  $\mathcal{H}$  sei separabel, falls es eine abzählbar-unendliche Menge  $\{u^{(n)}\}$  von Vektoren in  $\mathcal{H}$  gibt so, dass jeder Vektor  $u \in \mathcal{H}$  ein Häufungspunkt von  $\{u^{(n)}\}$  ist. Wir werden in dieser Vorlesung so-  
sagen immer nur separable Hilberträume antreffen. Jeder separable Hilbertraum ist isomorph zum Raum,  $\ell_2$ , unendlicher Folgen,  $u = (u_n)_{n=0}^{\infty}$ , komplexe Zahlen mit der Eigenschaft, dass

$$\|u\| = \left( \sum_{n=0}^{\infty} |u_n|^2 \right)^{1/2} < \infty \quad (2.11)$$

In einem separablen Hilbertraum  $\mathcal{H}$  gibt es eine abzählbare Basis  $\{\psi_k\}_{k=0}^{\infty}$  von Vektoren  $\psi_k \in \mathcal{H}$ ; d.h. für jeden Vektor  $\psi \in \mathcal{H}$  können komplexe Zahlen  $c_0, c_1, c_2, \dots$  gefunden werden so, dass

$$\psi = s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n c_k \psi_k. \quad (2.12)$$

Mit Hilfe des Gram-Schmidt'schen Orthogonalisierungsverfahrens kann man aus der Basis  $\{\psi_k\}_{k=0}^{\infty}$  ein vollständiges Orthonormalsystem (VONS),  $\{\varphi_k\}_{k=0}^{\infty}$ , konstruieren:

$$\varphi_1 := \frac{\psi_1}{\|\psi_1\|}, \quad u_2 = \psi_2 - \langle \varphi_1, \psi_2 \rangle \varphi_1,$$

$$\varphi_2 := \frac{u_2}{\|u_2\|}, \quad \dots, \quad u_n = \psi_n - \sum_{k=1}^{n-1} \langle \varphi_k, \psi_n \rangle \varphi_k,$$

$$\varphi_n := \frac{u_n}{\|u_n\|}, \quad \text{etc.}$$

Es ist klar, dass  $\|\varphi_n\| = 1, \forall n$ , und per Induktion zeigt man, dass  $\langle \varphi_n, \varphi_m \rangle = 0, \forall n \neq m$ .



Jeder Vektor  $\psi \in \mathcal{H}$  kann nun nach dem VONS  $\{\varphi_k\}_{k=0}^{\infty}$  entwickelt werden:

$$\psi = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \varphi_k, \text{ mit } c_k = \langle \varphi_k, \psi \rangle, \text{ und} \quad (2.13)$$

$$\|\psi\|^2 = \sum_{k=0}^{\infty} |c_k|^2; \text{ allgemeiner} \quad (2.14)$$

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \bar{c}_k d_k, \text{ wo } d_k = \langle \varphi_k, \varphi \rangle.$$

Der Isomorphismus  $\mathcal{H} \cong \ell_2$  wird also offensichtlich, wenn man in  $\mathcal{H}$  ein VONS konstruiert.

Nun schauen wir uns das konkrete Beispiel eines  $N$ -Teilchensystems an; wie in (1.15), (1.16). Wir suchen einen Hilbertraum  $\mathcal{H}$  von Schrödingerwellen-

funktionen,  $\psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$ , mit der Eigenschaft, dass wir die Operatoren

$$q_j^\alpha := x_j^\alpha, \quad p_{j,\alpha} := \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j^\alpha}, \quad \alpha = 1, \dots, 3, j = 1, \dots, N, \quad (2.13)$$

sind

$$H := \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_j} \left( -i \vec{\nabla}_j - \frac{e_j}{\hbar c} \vec{A}(\vec{x}_j) \right)^2 + \sum_{j=1}^N e_j \phi(\vec{x}_j) + U(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \quad (2.14)$$

(unter geeigneten Annahmen über  $\vec{A}$ ,  $\phi$  und  $U$ )

wenigstens formal als Hermitesche (besser: selbstadjungierte) Operatoren auf  $\mathcal{H}$  auffassen können.

Ein solcher Hilbertraum ist

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= L^2(\mathbb{R}^{3N}) \\ &= \left\{ \psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \mid \int \prod_{j=1}^N \pi d^3x_j \, |\psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)|^2 < \infty \right\}\end{aligned}\quad (2.15)$$

Allgemein definieren wir die Räume

$$L^p(\mathbb{R}^f) \equiv L^p(\mathbb{R}^f, d^fx) := \left\{ \psi(x), x \in \mathbb{R}^f \mid \|\psi\|_p < \infty \right\}, \quad (2.16)$$

wo

$$\|\psi\|_p := \left( \int d^fx \, |\psi(x)|^p \right)^{1/p}, \quad 1 \leq p < \infty,$$

$d^fx$  = Lebesgue Mass auf  $\mathbb{R}^f$ .

Nur für  $p=2$  ist  $L^p(\mathbb{R}^f, d^fx) = L^2(\mathbb{R}^f)$

ein Hilbertraum mit dem Skalarprodukt

$$\langle \psi, \varphi \rangle := \int d^fx \, \overline{\psi(x)} \varphi(x), \quad (2.17)$$

und

$$\|\psi\|_2 = \|\psi\| = (\langle \psi, \psi \rangle)^{1/2}.$$

Wir erinnern uns an die Fouriertransformation:

Für  $\psi \in L^p(\mathbb{R}^f)$ ,  $1 \leq p < \infty$ , definieren wir

$$\hat{\psi}(p) := \frac{1}{(2\pi\hbar)^{f/2}} \int d^fx \, e^{i(p \cdot x)/\hbar} \psi(x), \quad (2.18)$$

mit  $p \cdot x = \sum_{j=1}^f p_j x^j$ . Es gilt dann, dass

$$\hat{\psi} \in L^q(\mathbb{R}^f), \text{ mit } \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1. \quad (2.19)$$

Dabei ist  $L^\infty(\mathbb{R}^f)$  ( $q = \infty$ , wenn  $p = 1$ ) der Raum der (fast überall endlichen) beschränkten Funktionen

mit

$$\|\psi\|_\infty := \sup_{x \in \mathbb{R}^f} |\psi(x)|. \quad (2.20)$$

Zwei Ungleichungen sind nützlich:

### (1) Höldersche Ungleichung

$$\left| \int \bar{\psi} \varphi \, d^f x \right| \leq \|\psi \varphi\|_1 \leq \|\psi\|_p \|\varphi\|_q, \quad (2.21)$$

falls  $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ . Die Höldersche Ungleichung verallgemeinert die Schwarzsche Ungleichung:

Für  $p = q = 2$  besagt (2.21), dass

$$|\langle \psi, \varphi \rangle| \leq \|\psi\|_2 \cdot \|\varphi\|_2. \quad (2.22)$$

### (2) Hausdorff - Young Ungleichung

Für  $1 < p < 2$ ,  $\psi \in L^p \cap L^1$ , gilt, dass

$$\|\hat{\psi}\|_2 \leq C \|\psi\|_p, \quad \frac{1}{2} + \frac{1}{p} = 1, \quad (2.23)$$

wo  $C$  eine von  $f$  und  $p$  abhängige Konstante

ist. Die Fouriertransformation hat eine Inverse:

Falls  $\psi \in L^p(\mathbb{R}^f)$ ,  $1 \leq p < \infty$ , dann ist

$$\psi^\vee(x) := \frac{1}{(2\pi\hbar)^{f/2}} \int d^f p \, e^{-i(p \cdot x)/\hbar} \psi(p) \quad (2.24)$$

in  $L^q(\mathbb{R}^f)$ , mit  $\frac{1}{q} + \frac{1}{p} = 1$ , und es gilt

ebenfalls (2.23). Offenbar bilden die Fouriertrans-

formation  $\hat{\phantom{x}}$  und die inverse Fouriertransformation  $\vee$

den Hilbertraum  $L^2(\mathbb{R}^f)$  in und auf sich selbst

ab, und die Konstante  $C$  in (2.23) hat den Wert

$C=1$ . Dies wollen wir heuristisch nachvollziehen:

$$\begin{aligned} \langle \psi, \varphi \rangle &= \int d^f x \, \overline{\psi(x)} \varphi(x) \\ &\stackrel{(2.18), (2.24)}{=} \int d^f x \left( \frac{1}{(2\pi\hbar)^{f/2}} \int d^f p \, e^{-i(p \cdot x)/\hbar} \hat{\psi}(p) \right) \times \\ &\quad \times \left( \frac{1}{(2\pi\hbar)^{f/2}} \int d^f p' \, e^{-i(p' \cdot x)/\hbar} \hat{\varphi}(p') \right) \\ &= \iint d^f p \, d^f p' \, \overline{\hat{\psi}(p)} \hat{\varphi}(p') \times \\ &\quad \times \frac{1}{(2\pi\hbar)^f} \int d^f x \, e^{i(p-p') \cdot x / \hbar} \end{aligned}$$

Nun erinnert man sich daran, dass

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^f} \int d^f x \, e^{\pm i p \cdot x / \hbar} = \delta^{(f)}(p), \quad (2.25)$$

wo  $\delta^{(f)}$  die Diracsche  $\delta$ -Funktion (-Distribution) mit Träger im Nullpunkt ist. Setzt man (2.25) in die vorherige Gleichung ein, so findet man

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \langle \hat{\psi}, \hat{\varphi} \rangle = \langle \check{\psi}, \check{\varphi} \rangle, \quad (2.26)$$

d.h. die Fouriertransformation  $\hat{\phantom{x}}$  und ihre Inverse  $\check{\phantom{x}}$  sind unitär auf  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^f)$ , (nämlich, sie erhalten das Skalarprodukt).

Die Faltung zweier Funktionen  $\psi$  und  $\varphi$  auf  $\mathbb{R}^f$  ist durch

$$(\psi * \varphi)(x) := \int d^f y \, \psi(x-y) \varphi(y) \quad (2.27)$$

definiert.

Eigenschaften der Fouriertransformation

(1)  $\hat{\phantom{x}} : L^p(\mathbb{R}^f) \rightarrow L^q(\mathbb{R}^f)$ ,  $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ ;  
siehe (2.23).

(2)  $\hat{\phantom{x}}$  ist unitär auf  $L^2(\mathbb{R}^f)$ ; siehe (2.26).

$$(3) \quad (\psi \cdot \varphi)^{\wedge}(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} (\hat{\psi} * \hat{\varphi})(p)$$

$$(4) \quad \overline{\hat{\psi}(p)} = (\overline{\psi})^{\wedge}(-p)$$

$$(5) \quad \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} \psi \right)^{\wedge}(p) = p_j \hat{\psi}(p)$$

$$(6) \quad (x^j \psi)^{\wedge}(p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} \hat{\psi}(p).$$

Die Gleichungen (5) und (6) legen die folgende Interpretation nahe: Wenn  $\psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$  eine Schrödingersche Wellenfunktion auf dem Konfigurationsraum  $\mathbb{R}^{3N}$  ( $f = 3N$ ) eines  $N$ -Teilchensystems ist, dann ist  $\hat{\psi}(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$  die entsprechende Wellenfunktion auf dem Impulsraum des Systems. Da die Fouriertransformation  $\hat{\phantom{x}}$  unitär auf dem Hilbertraum  $L^2(\mathbb{R}^{3N}, \prod_{j=1}^N d^3x_j)$  ist, führen die beiden Darstellungen, mit Gln. (5) und (6), auf äquivalente Quantisierungen; (BHT, Dirac). Im Rahmen der Wellenmechanik wurde die Impulsraumdarstellung

von Pauli eingeführt.

Studierenden, die sich mit den mathematischen Grundlagen der oben zusammengefassten Tatsachen vertraut machen wollen, empfehle ich das hervorragende

Buch E. H. Lieb, M. Loss, "Analysis", Graduate Studies in Mathematics, Vol. 14, AMS, Providence, R.I., 1997

Allgemein sei auf das Standard Werk

M. Reed, B. Simon, "Methods of Modern Mathematical Physics", Vol. 1 & 2, Academic Press, New York - London, 1973.

verwiesen; insb. auch was das nun folgende Material anbetrifft.

Nach dieser Exkursion in die Theorie des Hilbert-  
raums kehren wir nun zu den fundamentalen

Objekten der Quantenmechanik, den (Hermiteschen)

Quadratmatrizen zurück. Da jeder separable Hilbert-

raum  $\mathcal{H}$  isomorph zu  $\ell_2$  ist, können wir nun

statt von Quadratmatrizen auf  $\ell_2$  allgemeiner von

linearen Operatoren (oder linearen Transformationen) auf einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  sprechen.

### Lineare Operatoren.

Eine Abbildung  $A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  ist ein linearer Operator auf  $\mathcal{H}$ , falls  $\forall z_1, \dots, z_k \in \mathbb{C}, \forall \psi_1, \dots, \psi_k \in \mathcal{H}, k=1,2,3,\dots$

$$A\left(\sum_{j=1}^k z_j \psi_j\right) = \sum_{j=1}^k z_j A\psi_j \quad (2.28)$$

Die Norm,  $\|A\|$ , eines linearen Operators,  $A$ , auf  $\mathcal{H}$  wird durch

$$\|A\| := \sup_{0 \neq \psi \in \mathcal{H}} \frac{\|A\psi\|}{\|\psi\|} \quad (2.29)$$

definiert. Ein Operator  $A$  heisst beschränkt, falls  $\|A\| < \infty$ . Viele mathematische Subtilitäten der Quantenmechanik kommen davon her, dass es auf unendlich dimensionalen Hilberträumen lineare Operatoren gibt, die unbeschränkt sind, d.h. deren Norm unendlich ist. Wenn  $A$  ein unbeschränkter,



linearer Operator auf einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ist, so definieren wir den (Definitions-) Bereich,  $\mathcal{D}(A)$ , von  $A$  durch

$$\mathcal{D}(A) = \{ \psi \in \mathcal{H} \mid \|A\psi\| < \infty \}. \quad (2.30)$$

Wir werden i.a. nur lineare Operatoren,  $A$ , studieren, deren Bereich  $\mathcal{D}(A)$  dicht in  $\mathcal{H}$  liegt; (eine Teilmenge  $\mathcal{D} \subset \mathcal{H}$  ist dicht in  $\mathcal{H}$ , falls jeder Vektor  $u \in \mathcal{H}$  als starker Limes einer Folge  $\{u^{(n)}\} \subset \mathcal{D}$  erhalten werden kann).

Wenn  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$  zwei Hilberträume sind, so bedeutet

$$\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 = \{ (u_1, u_2) \mid u_1 \in \mathcal{H}_1, u_2 \in \mathcal{H}_2 \} \quad (2.31)$$

ihre "direkte Summe";  $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$  ist wieder ein Hilbertraum, mit dem Skalarprodukt

$$\langle (u_1, u_2), (v_1, v_2) \rangle = \langle u_1, v_1 \rangle + \langle u_2, v_2 \rangle \quad (2.32)$$

Ein Operator  $A$  heisst abgeschlossen, falls

der Graph

$$\mathcal{G}(A) := \{ (u, Au) \in \mathcal{H} \oplus \mathcal{H} \mid u \in \mathcal{D}(A) \} \quad (2.33)$$

ein abgeschlossener (linearer) Unterraum von  $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$  ist.

Wenn  $A$  ein linearer Operator auf  $\mathcal{H}$  ist, so definiert man den zu  $A$  adjungierten Operator,  $A^* \equiv A^\dagger$ , durch die Gleichung

$$\langle A^* u, v \rangle := \langle u, Av \rangle, \quad v \in \mathcal{D}(A). \quad (2.34)$$

Genauer: Ein Vektor  $u \in \mathcal{H}$  gehört zum (Definitions-) Bereich von  $A^*$ , falls sich das (in  $v$ ) lineare Funktional

$$l(v) := \langle u, Av \rangle, \quad v \in \mathcal{D}(A),$$

stetig von  $\mathcal{D}(A)$  auf ganz  $\mathcal{H}$  fortsetzen lässt. Der Satz von Riesz garantiert dann, dass es einen Vektor  $w \in \mathcal{H}$  gibt so, dass  $l(v) = \langle w, v \rangle$ . Der Vektor  $w$  hängt linear von  $u$  ab. Man kann also

$$w = A^* u$$

schreiben, wo  $A^*$  ein linearer Operator ist.

Ein linearer Operator  $A$  ist symmetrisch (oder hermitesch), falls  $\mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{D}(A^*)$  und für alle  $u, v$  in  $\mathcal{D}(A)$

$$\langle u, Av \rangle = \langle A^*u, v \rangle \stackrel{!}{=} \langle Au, v \rangle \quad (2.35)$$

Ein Operator  $A$  ist selbstadjungiert, falls  $\mathcal{D}(A^*) = \mathcal{D}(A)$  und

$$A^* = A \text{ auf } \mathcal{D}(A). \quad (2.36)$$

Jeder selbstadjungierte Operator ist symmetrisch; aber die Umkehrung gilt nicht. (Sie ist richtig für beschränkte Operatoren, aber i.a. falsch für unbeschränkte Operatoren.) Ein fundamentales Kriterium für die Selbstadjungiertheit eines Operators  $A$  ist der folgende Satz.

Satz ( $\rightarrow$  Reed & Simon, Vol. 1)

Es sei  $A$  ein symmetrischer Operator auf  $\mathcal{H}$ . Die folgenden drei Aussagen sind äquivalent:

(1)  $A$  ist selbstadjungiert

(2)  $A$  ist abgeschlossen und die Gleichungen

$$A^*u = \pm iu, \quad u \in \mathcal{H}$$

haben nur die triviale Lösung  $u=0$ .

(3) Das Bild von  $A \pm i$  ist der gesamte Hilbertraum  $\mathcal{H}$ .

Ein linearer Operator  $P$  auf  $\mathcal{H}$  ist ein orthogonaler Projektor, falls

$$P = P^* \quad \text{und} \quad P^2 = P. \quad (2.37)$$

Es sei  $\mathcal{M} := \{P\psi \mid \psi \in \mathcal{D}(P) \subseteq \mathcal{H}\}$  das Bild von  $P$ . Man verifiziert leicht, dass  $P|_{\mathcal{M}} = \mathbb{1}|_{\mathcal{M}}$ , und

dass  $P|_{\mathcal{M}^\perp} = 0$ , wo  $\mathcal{M}^\perp := \{u \mid \langle u, v \rangle = 0, \forall v \in \mathcal{M}\}$ .

Da  $\mathcal{H} = \mathcal{M} \oplus \mathcal{M}^\perp$ , folgt, dass  $P$  ein beschränkter Operator ist mit  $\|P\| = 1$ , ausser wenn  $P=0$ .

Definition. Ein projektorwertiges Mass ist eine Familie von orthogonalen Projektoren  $P_\Delta$ , wo  $\Delta$  eine beliebige messbare Teilmenge der reellen Zahlengerade ist, mit den Eigenschaften:

$$(a) \quad P_\Delta^2 = P_\Delta, \quad P_\Delta^* = P_\Delta, \quad \forall \Delta.$$

$$(b) \quad P_{\Delta=\emptyset} = 0, \quad P_{\Delta=\mathbb{R}} = \mathbb{1}.$$

$$(c) \quad \text{Falls } \Delta = \bigcup \Delta_n, \quad \text{wo } \Delta_n \cap \Delta_m = \emptyset,$$

für  $n \neq m$ , dann ist

$$P_{\Delta} = s\text{-}\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N P_{\Delta_n}$$

$$(d) \quad P_{\Delta_1} P_{\Delta_2} = P_{\Delta_1 \cap \Delta_2}.$$

Für jeden Vektor  $\varphi \in \mathcal{H}$  mit  $\|\varphi\| = 1$  ist dann

$$\Delta \mapsto \langle \varphi, P_{\Delta} \varphi \rangle$$

ein Wahrscheinlichkeitsmass auf  $\mathbb{R}$ . Wir bezeichnen

dieses Mass mit  $d\langle \varphi, P_{\lambda} \varphi \rangle$ ,  $\lambda \in \mathbb{R}$ ; dabei ist

$$P_{\lambda} = P_{(-\infty, \lambda]}.$$

### Satz (Spektraltheorem)

Jeder selbstadjungierte Operator  $A$  auf einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  bestimmt ein projektorwertiges Mass

$\{P_{\Delta}\}$ , die sog. spektralen Projektoren, mit der Eigenschaft, dass

$$A = \int_{\mathbb{R}} \lambda \, dP_{\lambda} \quad (2.38)$$

Wenn nun  $g$  eine stetige (es genügt: messbare) reellwertige Funktion auf  $\mathbb{R}$  ist, dann ist

$$g(A) = \int_{\mathbb{R}} g(\lambda) \, dP_{\lambda}. \quad (2.39)$$

Wenn  $g_1$  und  $g_2$  zwei beschränkte solche Funktionen

sind, dann vertauschen  $g_1(A)$  und  $g_2(A)$  miteinander, und der Operator  $B := g_1(A) + i g_2(A)$  ist auf ganz  $\mathcal{H}$  definiert und vertauscht mit seinem Adjungierten  $B^* = g_1(A) - i g_2(A)$ ; (d.h.  $B$  ist ein "normaler Operator"). Als Anwendung wähle man  $g_1 = \cos(t \cdot)$ ,  $g_2 = \sin(t \cdot)$ , woraus folgt, dass  $e^{itA}$ ,  $t \in \mathbb{R}$ , definiert ist, wenn  $A$  selbstadjungiert ist. Wenn  $g_1$  und  $g_2$  zwei stetige, beschränkte (komplexwertige) Funktionen auf  $\mathbb{R}$  sind, dann gilt, dass

$$(g_1 \cdot g_2)(A) = g_1(A) \cdot g_2(A),$$

und

$$g_1(A)^* = \overline{g_1}(A). \quad (2.40)$$

All dies folgt leicht aus dem Spektralthorem;

Definition Ein Operator  $U: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  heisst isometrisch, falls

$$\langle U\psi, U\varphi \rangle = \langle \psi, \varphi \rangle, \quad \forall \psi, \varphi \in \mathcal{H}. \quad (2.41)$$

Ein isometrischer Operator,  $U$ , heisst unitär, falls das Bild von  $U$  aus ganz  $\mathcal{H}$  besteht.

Wie sofort aus (2.41) folgt, ist  $\|U\| = 1$ , wenn  $U$  isometrisch ist. Dann ist auch der adjungierte Operator  $U^*$  beschränkt, mit  $\|U^*\| = 1$ . Es ist also  $U^*U$  wohldefiniert, und

$$\langle \varphi, U^*U\psi \rangle = \langle U\varphi, U\psi \rangle = \langle \varphi, \psi \rangle,$$

$\forall \varphi, \psi$  in  $\mathcal{H}$ ; woraus folgt, dass

$$U^*U = \mathbb{I}. \quad (2.42)$$

Der Operator  $UU^*$  ist dagegen ein orthogonaler Projektor:

$$(UU^*)^* = (U^*)^* U^* = UU^*, \text{ und}$$

$$(UU^*)(UU^*) = U(U^*U)U^* = UU^*.$$

Sein Bild ist das Bild von  $U$  (und er verschwindet auf dem orthogonalen Komplement davon). Wenn nun  $U$  unitär ist, dann gilt offenbar, dass auch

$$UU^* = \mathbb{I} \quad (2.43)$$

Aus dem Spektralthorem und den nachfolgenden Bemerkungen folgt nun ein fundamentales Resultat von M. H. Stone:

Satz (1) Es sei  $A$  ein selbstadjungierter Operator auf einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$ . Wir definieren

$$U(t) := e^{-itA}. \quad (2.44)$$

Dann gilt:

(a)  $U(t)$  ist unitär,  $\forall t \in \mathbb{R}$ , und

$$U(t)U(s) = U(t+s), \quad \forall t, s \in \mathbb{R}.$$

(b)  $U(t)$  ist stark stetig in  $t$ .

(c) Für alle  $\psi \in \mathcal{D}(A)$  gilt, dass

$$\frac{i}{t} (U(t)\psi - \psi) \xrightarrow[t \rightarrow 0]{s} A\psi;$$

allgemeiner

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(t)\psi = A U(t)\psi.$$

(d) Wenn

$$s\text{-}\lim_{t \rightarrow 0} \frac{i}{t} (U(t)\psi - \psi) \text{ existiert, dann}$$

ist  $\psi \in \mathcal{D}(A)$ .

(2) Wenn  $\{U(t) \mid t \in \mathbb{R}\}$  die Eigenschaften (a) und (b) hat (man sagt,  $\{U(t)\}$  sei eine stark stetige, einparametrische unitäre Gruppe auf  $\mathcal{H}$ ), dann gibt es einen selbstadjungierten Operator  $A$  auf  $\mathcal{H}$  so, dass

$$U(t) = e^{-itA}.$$



Bemerkung. Wenn  $A_1, \dots, A_n$   $n$  selbstadjungierte

Operatoren auf  $\mathcal{H}$  sind, deren spektrale Projektoren alle miteinander vertauschen, dann definieren die Operatoren

$$U(t_1, \dots, t_n) := \exp -i \left( \sum_{j=1}^n t_j A_j \right)$$

eine stark stetige,  $n$ -parametrische unitäre Gruppe auf  $\mathcal{H}$ , und es gilt eine natürliche Verallgemeinerung des Stone'schen Satzes.

"Moral". Mit Familien  $A_1, A_2, \dots, A_n$ ,  $n \geq 1$ , von

selbstadjungierten Operatoren, deren spektrale Projektoren mit einander vertauschen, darf man so manipulieren, wie man es sich von endlichen, symmetrischen Matrizen, die mit einander vertauschen, her gewöhnt ist.

Eigenwerte, absolut stetiges und singular stetiges Spektrum selbstadjungierter Operatoren.

Es sei  $d\mu(\lambda)$  ein Borelsches Wahrscheinlichkeitsmass auf der Zahlengeraden  $\mathbb{R}$ . Dann gilt

es eine Menge,  $\{\lambda_n\}_{n=1}^N$ , reeller Zahlen und positive Zahlen  $\{p_n\}_{n=1}^N$ ,  $0 \leq N \leq \infty$ , eine nicht-negative Funktion  $m(\lambda) \in L^1(\mathbb{R}, d\lambda)$ , und ein singulär-stetiges Mass  $d\sigma(\lambda)$  auf  $\mathbb{R}$  (d.h.  $d\sigma(\lambda)$  und  $d\lambda$  haben nicht die gleichen Nullmengen) so, dass

$$0 \leq \sum_{n=1}^N p_n + \int_{\mathbb{R}} m(\lambda) d\lambda \leq 1,$$

und

$$d\mu(\lambda) = \sum_{n=1}^N p_n \delta(\lambda - \lambda_n) d\lambda + m(\lambda) d\lambda + d\sigma(\lambda). \quad (2.44)$$

Das ist der Lebesguesche Zerlegungssatz für Masse

Wenn nun  $\{P_\lambda \mid \lambda \in \mathbb{R}\}$  die Spektralschar (d.h. ein projektorwertiges Mass, wie oben definiert) eines selbstadjungierten Operators  $A$  auf  $\mathcal{H}$  ist, dann sind die Masse

$$d\langle \varphi, P_\lambda \varphi \rangle, \quad \varphi \in \mathcal{H}, \quad \|\varphi\| = 1,$$

Borelsche Wahrscheinlichkeitsmasse, für die der Lebesguesche Zerlegungssatz zutrifft. Wenn  $\mathcal{H}$  separabel ist, so folgt daraus die folgende

Aussage: Wenn  $A$  ein selbstadjungierter Operator

auf  $\mathcal{H}$  ist, dann gibt es eine Familie  $\{P_n\}_{n=1}^N$ ,  
 $0 \leq N \leq \infty$ , von orthogonalen Projektoren, mit  
 $P_n P_m = 0$ , für  $n \neq m$ , und  $\sum_{n=1}^N P_n \leq \mathbb{I}$ , reelle  
 Zahlen  $\{\lambda_n\}_{n=1}^N$ ,

und Spektralprojektoren  $P_\lambda^{ac}, P_\lambda^{sc}$  so, dass

$$A = \sum_{n=1}^N \lambda_n P_n + \int_{\mathbb{R}} \lambda (dP_\lambda^{ac} + dP_\lambda^{sc}), \quad (2.45)$$

mit

$$0 \leq \frac{d\langle \varphi, P_\lambda^{ac} \varphi \rangle}{d\lambda} \in L^1(\mathbb{R}, d\lambda),$$

$d\langle \varphi, P_\lambda^{sc} \varphi \rangle$  ist singulär stetig,

$\forall \varphi \in \mathcal{H}$ , und die Bilder der Projektoren

$\sum_{n=1}^N P_n$ ,  $P_{\mathbb{R}}^{ac}$  und  $P_{\mathbb{R}}^{sc}$  sind zueinander orthogonal.

Die Zahlen  $\{\lambda_n\}_{n=1}^N$  heißen Eigenwerte von

$A$ ; man sagt,  $\lambda_n$  sei  $k$ -fach entartet, wenn

die Dimension des Bildes von  $P_n$  gerade  $= k$  ist.

Eine Zahl  $\lambda$  im Träger von  $dP_\lambda^{ac}$  heisst ein  
verallgemeinerter Eigenwert von  $A$ . Für Operatoren,

die in quantenmechanischen Rechnungen wichtig sind,  
ist i.a.  $dP_x^{sc} = 0$ ; (kein singular-stetiges Spektrum,

### Charakterisierung quantenmechanischer Systeme mit endlich vielen Freiheitsgraden.

Ein klassisches Hamiltonsches System kann durch Angabe seines Phasenraums  $T$  und einer Hamilton Funktion auf  $T$ , die über die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen die Dynamik des Systems bestimmt, charakterisiert werden. Allgemein ist  $T$  eine symplektische Mannigfaltigkeit, versehen mit einer symplektischen 2-Form  $\omega$ , die geschlossen ist, d.h.  $d\omega = 0$ . Statt vom Phasenraum  $T$  zu reden, kann man ebenso gut von der kommutativen Algebra,  $C_0^\infty(T)$ , der glatten, beschränkten Funktionen auf  $T$  reden, die die ganze Geometrie von  $T$  beschreibt. Die Algebra  $C_0^\infty(T)$  ist mit der Struktur einer Poissonklammer,  $\{\cdot, \cdot\}$ , versehen,

die sie zu einer Lie Algebra macht. Die Dynamik des Systems kann durch die Liouville Gleichung

$$\dot{f} = \{h, f\}, \quad f \in C_0^\infty(T), \quad (2.46)$$

bestimmt werden; wo  $h$  die Hamilton Funktion des Systems ist; (hier wird angenommen, dass die Funktionen  $f \in C_0^\infty(T)$  nicht explizit von der Zeit abhängen). Allgemeine Zustände des Systems sind Wahrscheinlichkeitsmasse auf dem Phasenraum  $T$ , d. h. normierte, positive lineare Funktionale auf der Algebra  $C_0^\infty(T)$ .

Die quantenmechanische Umdeutung des Begriffssystems der Hamiltonschen Mechanik, so wie sie von Born, Heisenberg, Jordan und Dirac vorgeschlagen wurde, besteht darin, den Funktionen  $f \in C_0^\infty(T)$  beschränkte lineare Operatoren,  $F$ , auf einem separablen Hilbert-

raum,  $\mathcal{H}$ , zuzuordnen, und diese Zuordnung, "Quant", soll folgende Eigenschaften haben:

(a) Quant ist linear: Für  $f, g \in C_0^\infty(T)$ ,  $z, w \in \mathbb{C}$ , soll der Funktion  $zf + wg$  der Operator  $zF + wG$ , mit " $F = \text{Quant}(f)$ ", zugeordnet werden.

(b) Wenn  $f \in C_0^\infty(T)$  der Operator  $F$  zugeordnet ist, dann soll  $\bar{f} \equiv f^*$  der adjungierte Operator  $F^*$  zugeordnet werden; insbesondere soll einer reellen Funktion  $f = \bar{f}$  ein selbstadjungierter Operator  $F = F^*$  entsprechen.

Offenbar ist das Bild von  $C_0^\infty(T)$  unter Quant ein linearer Raum,  $\mathcal{F}_T$ , beschränkter linearer Operatoren auf einem (separablen) Hilbertraum  $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_T$ . So wie  $C_0^\infty(T)$  eine Lie Algebra ist, mit Lieklammer = Poissonklammer, so soll  $\mathcal{F}_T$  die Struktur einer Lie Algebra erhalten:

(c) Die Poissonklammer,  $\{f, g\}$ , zweier Funktionen  $f$  und  $g$ , wird durch den Kommutator,

$$\frac{i}{\hbar} [F, G], \quad (2.47)$$

der  $f$  und  $g$  entsprechenden Operatoren  $F, G$  ersetzt; (man kann so  $\mathcal{F}_T$  zu einer Lie Algebra erweitern),

Der Raum  $\mathcal{F}_T$  ist unter Adjunktion,  $F \rightarrow F^*$ , abgeschlossen, nicht aber, i.a., unter Produktbildung. Wenn man mit Elementen von  $\mathcal{F}_T$  auch ihre Produkte in die Betrachtung einbezieht, so entsteht aus  $\mathcal{F}_T$  eine sog. \*Algebra,  $\mathcal{A}_T$ , beschränkter linearer Operatoren auf  $\mathcal{H}$ ; nämlich

$$\mathcal{A}_T := \left\{ F \mid F = \sum_j F_1^{j_1} \dots F_{n_j}^{j_{n_j}}, F_k^{j_k} \in \mathcal{F}_T \right\}. \quad (2.48)$$

Eine \*Algebra ist ein komplexer Vektorraum mit der Eigenschaft, dass mit zwei Elementen auch deren Adjungierte und deren Produkt Elemente des Raums sind. Die Algebra  $\mathcal{A}_T$  ist normiert.

Die Norm,  $\|F\|$ , eines Operators  $F \in A_T$  ist die Operatornorm von  $F$ .

Die nichtkommutative Algebra  $A_T$  ersetzt quantenmechanisch die kommutative Algebra  $C_0^\infty(\Gamma)$ , resp. den Phasenraum  $\Gamma$ , und beschreibt die Kinematik des Systems. So wie  $\Gamma$ , resp.  $C_0^\infty(\Gamma)$ , ein Beispiel einer symplektischen Geometrie definiert, so definiert die Algebra  $A_T$  eine Art von "Quantengeometrie" (Born & Jordan), oder "nichtkommutativer Geometrie" (Connes); (für  $f < \infty$  allerdings immer dieselbe!).

In Analogie zur klassischen Mechanik können wir Zustände des Systems als normierte, positive lineare Funktionale auf der Algebra  $A_T$  auffassen.

Zu diesen gehören die Einheitsstrahlen im Hilbertraum  $\mathcal{H}_T \equiv \mathcal{H}$ : Für  $0 \neq \psi \in \mathcal{H}$  ist  $\psi/\|\psi\|$  ein Einheitsvektor, und

$$[\psi] = \left\{ \varphi \mid \varphi = \frac{e^{i\theta} \psi}{\|\psi\|}, \theta \in \mathbb{R} \right\} \quad (2.49)$$



der zugehörige Einheitsstrahl. Für  $0 \neq \varphi \in \mathcal{H}$  definieren wir den Erwartungswert eines Operators  $A \in \mathcal{A}_\mathcal{H}$  in  $[\varphi]$  durch

$$\langle A \rangle_{[\varphi]} := \frac{\langle \varphi, A \varphi \rangle}{\langle \varphi, \varphi \rangle}. \quad (2.50)$$

Der Erwartungswert hat die folgenden Eigenschaften:

(a)  $\langle 1 \rangle_{[\varphi]} = 1$ , d.h.  $\langle (\cdot) \rangle_{[\varphi]}$  ist normiert.

(b) Wenn  $A = A^*$  ein positiver Operator auf  $\mathcal{H}$  ist, so ist

$$\langle A \rangle_{[\varphi]} \geq 0, \text{ d.h. } \langle (\cdot) \rangle_{[\varphi]} \text{ ist } \underline{\text{positiv}}.$$

(c) Wenn  $A$  und  $B$  lineare Operatoren auf  $\mathcal{H}$  und  $z, w$  komplexe Zahlen sind, so gilt

$$\langle zA + wB \rangle_{[\varphi]} = z \langle A \rangle_{[\varphi]} + w \langle B \rangle_{[\varphi]},$$

d.h.  $\langle (\cdot) \rangle_{[\varphi]}$  ist linear

(d)  $\langle (\cdot) \rangle_{[\varphi]}$  hängt nur vom Strahl,  $[\varphi]$ , durch  $\varphi$  ab.

Die Zustände auf  $A_T$  bilden eine konvexe Menge:

Wenn  $\omega_1$  und  $\omega_2$  zwei Zustände auf  $A_T$  sind, d. h. normierte, positive, lineare Funktionale auf  $A_T$  (mit den Eigenschaften (a) – (c) von oben), und  $0 \leq \lambda \leq 1$ , dann ist auch  $\lambda \omega_1 + (1-\lambda) \omega_2$  ein Zustand auf  $A_T$ . Zustände,  $\omega$ , der speziellen Form

$$\omega(A) = \langle A \rangle_{[\psi]}, \quad 0 \neq \psi \in \mathcal{H}, \quad (2.51)$$

bilden aber keine konvexe Menge, sondern einen  $\infty$  dimensionalen projektiven Raum

$$CP^\infty := \{[\psi] \mid \psi \in \mathcal{H}, \psi \sim \psi' \Leftrightarrow \psi = z\psi', 0 \neq z \in \mathbb{C}\}, \quad (2.52)$$

(eine topologisch nicht-triviale Kähler Mannigfaltigkeit). Man nennt die Zustände der Form (2.51)

"reine Zustände". Wie später beschrieben, können

für Systeme mit endlich vielen Freiheitsgraden

( $T$  endlich dimensional) üblicherweise alle Zustände des Systems als konvexe Kombinationen reiner Zustände dargestellt werden.

Warnung: Es gibt i.a. keine eindeutige Quantisierungsvorschrift, "Quant"! Betrachten wir ein freies Teilchen im physikalischen Raum  $\mathbb{R}^3$  mit Hamiltonfunktion  $h(\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m}$  in kartesischen Koordinaten. Klassisch ist  $h$  äquivalent zu

$$h' = \frac{1}{2m} \frac{1}{\sqrt{|\vec{x}|}} \vec{p} |\vec{x}| \vec{p} \frac{1}{\sqrt{|\vec{x}|}}$$

Quantenmechanisch fordern wir die Heisenberg-schen Vertauschungsrelationen:

$$[x^\alpha, p_\beta] = i\hbar \delta_\beta^\alpha \mathbb{1}, \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3.$$

Diese können in der oben beschriebenen Schrödinger

Darstellung

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= L^2(\mathbb{R}^3, d^3x), \quad x^\alpha \xrightarrow{\text{Quant}} \text{Mult } x^\alpha, \\ p_\alpha &\xrightarrow{\text{Quant}} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^\alpha} \end{aligned} \quad (2.52)$$

realisiert werden. Dann finden wir, dass

$$h(\vec{p}) \mapsto -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta,$$

aber

$$h'(\vec{p}, \vec{x}) \mapsto -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{3\hbar^2}{8m} \frac{1}{|\vec{x}|^2}$$

Hamilton Funktionen der Form (1.106), d.h.

$$h(p, x) = \frac{1}{2} (p, p) + U(x)$$

können mit der dort angegebenen Methode, die man Schrödinger verdankt, in beliebigen krummlinigen Koordinaten auf dem Konfigurationsraum  $K$  eindeutig quantisiert werden:

$$\mathcal{H} = L^2(K, \sqrt{g} d^f x), \quad (2.53)$$

$$h \mapsto H = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + U.$$

Nun behält allerdings die Hamiltonsche Mechanik unter beliebigen kanonischen ( $\equiv$  symplektischen)

Transformationen  $\varphi$

$$(P, X) = \varphi(p, x)$$

ihre Form. Gemäss Heisenberg und Dirac kann man nun in zwei Weisen quantisieren:

$$[x^\alpha, p_\beta] = i\hbar \delta_\beta^\alpha \mathbb{1}, \quad (2.54)$$

resp.

$$[X^\alpha, P_\beta] = i\hbar \delta_\beta^\alpha \mathbb{1}.$$

Wendet man die Quantisierungen (2.54) auf ein und dieselbe Hamilton Funktion an, so erhält man i.a. unitär inäquivalente Hamilton Operatoren!

Ausnahme:  $\Gamma = \mathbb{R}^{2f}$ ,  $\varphi$  eine lineare symplektische Transformation. Dann vermittelt eine unitäre Transformation zwischen den beiden Quantisierungen (2.54).

### Dynamik: Heisenberg- und Schrödinger Bild

Wie eben diskutiert, ordnet eine Wahl von "Quant" einer klassischen Hamilton Funktion  $h$  auf dem Phasenraum  $\Gamma$  einen selbstadjungierten Operator  $H = H^*$  auf einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  zu. Heisenberg fordert, die Liouville Gleichung (2.46) sei durch die sog. Heisenberg Gleichung zu ersetzen:

Die Zeitentwicklung eines Operators  $F \in A_r$ ,

$F = F_{t=0} \mapsto F_t, t \in \mathbb{R}$  (Zeit), findet man

durch Lösen der Gleichung

$$\dot{F}_t = \frac{i}{\hbar} [H, F_t]. \quad (2.55)$$

Die Gl. (2.55) kann wie folgt gelöst werden: Zu-

nächst bemerken wir, dass alle Operatoren in

(2.55) lineare Operatoren auf  $\mathcal{H}$  sind, und es wurde

oben angenommen, dass  $H = H^*$  selbstadjungiert

sei. Der Satz von Stone garantiert dann, dass  $H$  eine

einparametrische unitäre Gruppe,  $U(t) = e^{-i(tH)/\hbar}$ ,

$t \in \mathbb{R}$ , auf  $\mathcal{H}$  erzeugt. Nun setzen wir

$$F_t := e^{i(tH)/\hbar} F e^{-i(tH)/\hbar} \quad (2.56)$$

Nimmt man von beiden Seiten von (2.56) einen

"Erwartungswert",  $\langle (\cdot) \rangle_{[\psi]}$  in einem Vektor

$\psi \in \mathcal{D}(H)$ , so kann man beide Seiten nach

der Zeit  $t$  differenzieren und findet:

$$\begin{aligned}\langle \dot{F}_t \rangle_{[\psi]} &= \frac{i}{\hbar} \langle [H, F_t] \rangle_{[\psi]} \\ &= \frac{i}{\hbar} \frac{\langle H\psi, F_t \psi \rangle - \langle \psi, F_t H\psi \rangle}{\langle \psi, \psi \rangle},\end{aligned}$$

d.h. (2.55) ist im Sinne von Erwartungswerten erfüllt.

Für Heisenberg sind die Operatoren,  $F_t$ , zeitabhängig, wogegen die Zustände  $\langle (\cdot) \rangle_{[\psi]}$ ,

$\psi \in \mathcal{H}$ , zeitunabhängig sind. Nun bemerke

man jedoch, dass

$$\begin{aligned}\langle F_t \rangle_{[\psi]} &\stackrel{(2.50)}{=} \frac{\langle \psi, F_t \psi \rangle}{\langle \psi, \psi \rangle} = \frac{\langle \psi, e^{i(tH)/\hbar} F e^{-i(tH)/\hbar} \psi \rangle}{\langle \psi, \psi \rangle} \\ &= \frac{\langle \psi_t, F \psi_t \rangle}{\langle \psi_t, \psi_t \rangle},\end{aligned}\tag{2.57}$$

wo

$$\psi_t = e^{-i(tH)/\hbar} \psi,\tag{2.58}$$

und, da  $e^{-i(tH)/\hbar}$  unitär ist,  $\forall t \in \mathbb{R}$ ,

$$\langle \psi_t, \psi_t \rangle = \langle \psi, \psi \rangle, \quad \forall \psi \in \mathcal{H}.\tag{2.59}$$

Schrödinger geht davon aus, dass die Operatoren

$F \in A_T$  zeitunabhängig sind, die (reinen) Zustände sich aber gemäß

$$\psi = \psi_{t=0} \mapsto \psi_t = e^{-i(tH)/\hbar} \psi, \quad (2.60)$$

$\psi \in \mathcal{H}$ , sich in der Zeit entwickeln. Für  $\psi \in \mathcal{D}(H)$ ,

erfüllt  $\psi_t$  die Differentialgleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = H \psi_t, \quad (2.61)$$

die man zeitabhängige Schrödingergleichung nennt.

Nun erinnern wir an das Spektraltheorem (2.38):

Wenn  $H = H^*$  selbstadjungiert ist, dann gibt es ein projektorwertiges Mass  $\{P_\Delta\}$  so, dass

$$H = \int_{\mathbb{R}} E \, dP_E \quad (2.62)$$

Man nennt den Träger von  $dP_E$  das (Energie-) Spektrum,  $\sigma(H)$ , von  $H$ . Die Menge der

Eigenwerte  $\{E_n\}_{n=0}^N$  nennt man das Punkt-



spektrum,  $\sigma_{pp}(H)$ , von  $H$ , und  $\sigma(H) \setminus \{E_n\}_{n=0}^N$

heißt kontinuierliches Spektrum,  $\sigma_c(H)$ . Die Gleichung

$$Hu = Eu, \quad E \in \mathbb{R}, \quad (2.63)$$

hat in vielen Beispielen von Hamilton Operatoren  $H$  für alle  $E \in \mathbb{R}$  eine Lösung,  $u_E$ ; aber nur für  $E \in \sigma_{pp}(H)$  ist  $u_E \in \mathcal{H}$ , und nur für  $E \in \sigma(H)$  kann man aus den Lösungen  $u_E$  durch Superposition Wellenpakete bilden, die zu  $\mathcal{H}$  gehören. Man nennt (2.63) die zeitunabhängige Schrödingergleichung.

Heisenbergsche und Weylsche Vertauschungsrelationen.

Nun kehren wir zu den Beispielen von (2.13)–(2.16) zurück: Konfigurationsraum  $K = \mathbb{R}^f$ ,

Phasenraum  $\Gamma = \mathbb{R}^{2f}$ . Unsere Quantisierung,

"Quant", ist durch

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^f, d^f x),$$

$$x^j \mapsto \text{Multiplikation mit } x^j,$$

$$p_j \mapsto \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j}, \quad j = 1, \dots, f,$$

gegeben.

$$\left. \begin{array}{l} \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^f, d^f x) \\ x^j \mapsto \text{Multiplikation mit } x^j \\ p_j \mapsto \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j}, \quad j = 1, \dots, f \end{array} \right\} \quad (2.64)$$

Offensichtlich sind die Operatoren  $x^j$ ,

$$(x^j \psi)(x) = x^j \psi(x), \quad \psi \in \mathcal{H},$$

selbstadjungiert und vertauschen alle miteinander. Sie erzeugen die  $f$ -parametrische unitäre

Gruppe 
$$U(b) := \exp i \left( \sum_{j=1}^f b_j x^j \right), \quad (2.65)$$

$b \in \mathbb{R}^f$ . Genauso sind die Operatoren  $p_j$ ,

$$(p_j \psi)(x) := \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x^j}(x)$$

selbstadjungiert und vertauschen alle miteinander. Sie erzeugen die  $f$ -parametrische unitäre

Gruppe  $\{V(a) \mid a \in \mathbb{R}^f\}$ , wo

$$(V(a) \psi)(x) := \psi(x + \hbar a). \quad (2.66)$$

Nun verifiziert man problemlos, dass

$$U(b) V(a) = e^{-i \hbar (a, b)} V(a) U(b), \quad (2.67)$$

mit  $(a, b) = \sum_{j=1}^f a^j b_j$ . Man nennt diese Vertauschungsrelationen die Weylschen Relationen.

Sie sind formal äquivalent zu den Heisenberg-  
schen Vertauschungsrelationen:

$$[x^k, p_l] = i\hbar \delta_l^k \mathbb{1}. \quad (2.68)$$

Für die Weylschen Relationen hat von Neu-  
mann einen Eindeigkeitssatz bewiesen:

Satz. Sei  $\mathcal{H}$  ein separabler Hilbertraum,  
und seien  $\{U(b) | b \in \mathbb{R}^f\}$ ,  $\{V(a) | a \in \mathbb{R}^f\}$  zwei  
 $f$ -parametrische, stetige unitäre Gruppen auf  
 $\mathcal{H}$  mit der Eigenschaft, dass die Weylschen  
Relationen (2.67) gelten. Dann gibt es einen  
unitären Isomorphismus,  $T$ , mit

$$T\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^f, d^f x) \otimes \mathcal{M}, \quad (2.69)$$

wo  $\mathcal{M}$  ein endlich dimensionaler oder separabler  
Hilbertraum ist, und

$$TU(b)T^{-1} = \exp i \left( \sum_j b_j x^j \right) \otimes \mathbb{1},$$

$$TV(a)T^{-1} = (\text{Transl. um } -\hbar a) \otimes \mathbb{1},$$

d.h.  $TU(b)T^{-1}$  und  $TV(a)T^{-1}$  wirken auf den Faktor  $L^2(\mathbb{R}^f, d^f x)$  in (2.69) wie in (2.65) und (2.66) angegeben, und auf den Faktor  $\mathcal{M}$  in (2.69) wirken sie "trivial", nämlich wie die Einheitsmatrix

Offenbar gibt es also in der Quantisierung Hamiltonscher Systeme mit Phasenraum  $T = \mathbb{R}^{2f}$  keine Meinungsverschiedenheiten, wenn man kanonische Vertauschungsrelationen der Form (2.67) fordert.

### Übungen.

(1) Ausgehend von (2.64) verifiziere man die Gln. (2.65) – (2.67).

(2) Man zeige, dass  $\sigma(x^j) = \sigma_c(x^j) = \mathbb{R}$ ,

$$\sigma_{pp}(x^j) = \emptyset, \quad \sigma(p_j) = \sigma_c(p_j) = \mathbb{R}, \quad \sigma_{pp}(p_j) = \emptyset$$

Man benütze dieses Resultat, um zu zeigen, dass

die Operatoren  $x = \varphi$ ,  $p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ ,  $\varphi \in [0, 2\pi]$

nicht beide selbstadjungiert auf  $L^2([0, 2\pi], d\varphi)$  sein können.

(3) Man überzeuge sich davon, dass man die Definition des Tensorprodukts  $\otimes$  zweier Hilberträume noch kennt.

---

## Anhang. Grenzübergang zur klassischen Mechanik;

### Bohmsche Mechanik

Wir kehren hier zur Wellenmechanik von Systemen, z. B.  $N$ -Teilchensystemen zurück; siehe (1.114), (1.115).

Die Schrödingergleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial \psi_t}{\partial t} = H(\underline{q}, \frac{\hbar}{i} \nabla_{\underline{q}}, t) \psi_t, \quad (A1)$$

$\underline{q} = (\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \in \mathbb{R}^f$ , mit  $H$  wie in (1.115). Die kinetische

Energie ist z. B. durch

$$T(\underline{p}) = \frac{1}{2} (\underline{p}, T \underline{p}) \quad (A2)$$

gegeben, wo  $T$  eine positive  $f \times f$  Matrix ist;

$$T \stackrel{\text{z.B.}}{=} \begin{pmatrix} m_1^{-1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & m_f^{-1} \end{pmatrix}. \quad \text{Für die Lösung von (A1) machen}$$

wir den Ansatz (im Ortsraum)

$$\psi_t(\underline{q}) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\underline{q}; t)\right), \quad (\text{A3})$$

wo  $S$  die Dimension einer Wirkung hat, gerade wie die generierenden Funktionen kanonischer Transformationen. Wir machen für  $S$  einen Potenzreihenansatz:

$$S = S^{(0)} + \frac{\hbar}{i} S^{(1)} + O(\hbar^2), \quad (\text{A4})$$

und setzen (A3) und (A4) in (A1) ein. Dann ordnen wir beide Seiten von (A1) nach Potenzen von  $\hbar$  und finden

$$\underline{\hbar^0}: \quad \frac{\partial S^{(0)}}{\partial t}(\underline{q}; t) + H_{cl}\left(\underline{q}, \frac{\partial S^{(0)}}{\partial \underline{q}}(\underline{q}; t), t\right) = 0 \quad (\text{A5})$$

Dies ist die Hamilton-Jacobi Gl. für  $S^{(0)}$ .

$$\underline{\hbar^1}: \quad \frac{\partial S^{(1)}}{\partial t}(\underline{q}; t) = - \left( \frac{\partial}{\partial \underline{q}} S^{(0)}, T \frac{\partial}{\partial \underline{q}} S^{(1)} \right)(\underline{q}, t) - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial \underline{q}}, T \frac{\partial}{\partial \underline{q}} \right) S^{(0)}. \quad (\text{A6})$$

Gl. (A.6) ist eine lineare Gl. für  $S^{(1)}$ , gegeben  $S^{(0)}$ .

Sei nun  $S^{(0)} = S^{(0)}(\underline{q}, \underline{P}; t)$  eine bestimmte Lösung der Hamilton-Jacobi Gl. (A.5). Dann finden wir die zu  $\underline{q}$  konjugierten klassischen Impulse,  $\underline{p}$ , aus der Gleichung

$$\underline{p} = \frac{\partial S^{(0)}}{\partial \underline{q}}(\underline{q}, \underline{P}; t); \quad (A7)$$

sind die Zeitabhängigkeit der klassischen Lagekoordinaten  $\underline{q} = \underline{q}(t)$  kann aus den Bewegungsgln.

$$\begin{aligned} \underline{\dot{q}}(t) &= \frac{\partial H_{cl}}{\partial \underline{p}}(\underline{q}(t), \underline{p}(t); t) \\ &= \frac{\partial H_{cl}}{\partial \underline{p}}(\underline{q}(t), \frac{\partial S^{(0)}}{\partial \underline{q}}(\underline{q}(t), \underline{P}; t); t) \end{aligned} \quad (A8)$$

bestimmt werden. Setzen wir die Lösung von (A8) in (A7) ein, so finden wir schliesslich  $\underline{p}(t)$ . Die Kurve  $(\underline{q}(t), \underline{p}(t))$  im klassischen Phasenraum erfüllt automatisch die Hamilton'schen Bewegungsgln.!

Im Beispiel (A1), (A2) gilt, dass

$$\begin{aligned} \underline{\dot{q}}(t) &= \frac{\partial H_{cl}}{\partial \underline{p}}(\underline{q}(t), \underline{p}(t); t) \\ &= T \underline{p}(t) \stackrel{(A7)}{=} T \frac{\partial}{\partial \underline{q}} S^{(0)}(\underline{q}(t), \underline{P}; t) \end{aligned} \quad (A9)$$

Wir setzen nun

$$\rho := e^{2S^{(1)}}, \quad \underline{J} = \underline{\dot{q}} \cdot \rho. \quad (A10)$$

Aus (A6) und (A.10) folgt dann die Kontinuitätsgl.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \underline{q}} \cdot \underline{J} = 0. \quad (A11)$$

Denn wegen (A10)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 2 \frac{\partial S^{(1)}}{\partial t} e^{2S^{(1)}}$$

$$\stackrel{(A6)}{=} - \left[ 2 \left( \frac{\partial S^{(0)}}{\partial \underline{q}}, T \frac{\partial S^{(1)}}{\partial \underline{q}} \right) + \left( \frac{\partial}{\partial \underline{q}}, T \frac{\partial}{\partial \underline{q}} \right) S^{(0)} \right] e^{2S^{(1)}}$$

$$\stackrel{(A.10)}{=} - \frac{\partial}{\partial \underline{q}} \cdot \underline{J}, \quad \text{wenn man (A9) benutzt!}$$

Für ein klassisch-mechanisches System sind die Lösungen,  $S^{(0)}$ , von (A5) reell. Aus (A6) folgt dann, dass auch  $S^{(1)}$  reell ist. Dies impliziert wegen (A.11) dass  $\rho \geq 0$  ist. Aus (A3), (A4) und (A.10) folgt auch, dass

$$\rho(\underline{q}, t) = |\psi_t(\underline{q})|^2 + O(\hbar).$$

Bis zur Ordnung  $\hbar$  finden wir also, dass die

$$\text{Wellenfunktion } \psi = \exp\left(\frac{i}{\hbar} S^{(0)} + S^{(1)} + O(\hbar)\right)$$



ein statistisches Ensemble von Systemen mit Konfigurationsraumsdichte  $\rho = e^{2S^{(1)}} \approx |\psi|^2$  beschreibt, deren Bahnen  $\underline{q}(t) \equiv \underline{\Phi}_t(\underline{q})$ ,  $\underline{q} = \underline{q}(0)$ , die klassischen Bewegungsgln. erfüllen. Es bleibt uns zu zeigen, dass, wenn  $\tilde{\rho}_t(\underline{q}) \equiv \tilde{\rho}(\underline{q}, t)$  durch

$$\tilde{\rho}_t(\underline{\Phi}_t(\underline{q})) \left| \frac{\partial \underline{\Phi}_t(\underline{q})}{\partial \underline{q}} \right| = \rho_0(\underline{q}) \quad (\text{A.12})$$

und

$$\tilde{S}^{(1)}(\underline{q}, t) = \frac{1}{2} \ln \tilde{\rho}_t(\underline{q}) \quad (\text{A.13})$$

gesetzt werden, wo  $\underline{q}(t) = \underline{\Phi}_t(\underline{q})$  die klassischen Bewegungsgln.

$$\dot{\underline{q}}(t) = T \frac{\partial}{\partial \underline{q}} S^{(0)}(\underline{q}(t), \underline{p}; t) =: \underline{X}_t(\underline{q}(t)) \quad (\text{A.14})$$

löst, dann ist  $\tilde{S}^{(1)}(\underline{q}, t)$  eine Lösung von (A6)!

(  $\left| \frac{\partial \underline{w}(\underline{q})}{\partial \underline{q}} \right|$  ist die Jacobi-Determinante der Abbildung

$\underline{q} \mapsto \underline{w}(\underline{q})$ , und  $\underline{X}_t$  ist das dem Fluss  $\underline{\Phi}_t$  erzeugende Vektorfeld.) Aus (A.13) folgt nämlich, dass

$$\frac{d}{dt} \left( \tilde{\rho}_t(\underline{\Phi}_t(\underline{q})) \left| \frac{\partial \underline{\Phi}_t(\underline{q})}{\partial \underline{q}} \right| \right) = 0. \quad (\text{A.15})$$

Also, mit  $\underline{Q} = \underline{\Phi}_t(\underline{z}) \equiv \underline{z}(t)$  und (A14), A6

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{p}_t}{\partial t}(\underline{Q}) + \underline{X}_t(\underline{Q}) \frac{\partial \tilde{p}_t(\underline{Q})}{\partial \underline{Q}} + \tilde{p}_t(\underline{Q}) \frac{d}{dt} \left| \frac{\partial \underline{Q}}{\partial \underline{z}} \right| \\ = \frac{\partial \tilde{p}_t}{\partial t}(\underline{Q}) + \underline{X}_t(\underline{Q}) \frac{\partial \tilde{p}_t(\underline{Q})}{\partial \underline{Q}} + \frac{\partial \underline{X}_t(\underline{Q})}{\partial \underline{Q}} \tilde{p}_t(\underline{Q}) = 0 \end{aligned}$$

Setzen wir  $\tilde{p}_t(\underline{Q}) = e^{2\tilde{S}^{(1)}(\underline{Q}, t)}$  ein, so folgt

$$\left[ 2 \frac{\partial \tilde{S}^{(1)}}{\partial t}(\underline{Q}, t) + 2 \underline{X}_t(\underline{Q}) \frac{\partial \tilde{S}^{(1)}}{\partial \underline{Q}}(\underline{Q}, t) + \frac{\partial \underline{X}_t(\underline{Q})}{\partial \underline{Q}} \right] e^{2\tilde{S}^{(1)}(\underline{Q})} = 0$$

Division durch  $2 e^{2\tilde{S}^{(1)}(\underline{Q}, t)}$ , Einsetzen von (A.14)

und Variablenumbenennung,  $\underline{Q} \rightarrow \underline{z}$ , zeigt, dass  $\tilde{S}^{(1)}$  (A6) erfüllt, was zu beweisen war.

In unserer Näherung,  $O(\hbar)$ , ist es also legitim

$$w(\underline{z}) := |\psi(\underline{z})|^2 \approx p(\underline{z}, t) \quad (\text{A16})$$

als Wahrscheinlichkeitsdichte auf dem Konfigura-

tionsraum für ein Ensemble klassisch-mechanischer, insbesondere deterministischer, Systeme aufzufassen.

Wir werden sehen, dass diese Interpretation auch in beliebigen Ordnungen von  $\hbar$  gültig bleibt, falls wir

bereit sind, die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen  
durch modifizierte, aber deterministische Bewegungs-  
gleichungen, die Bohm'schen, zu ersetzen. (Diese  
 Beobachtung geht offenbar auf Madelung und de  
 Broglie zurück und wurde von David Bohm genauer studiert,

### Stromerhaltungssatz in der Quantenmechanik

Wir betrachten ein  $N$ -Teilchensystem mit  
 dem Hamiltonoperator

$$H_N = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2m_j} \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_j - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}_j) \right)^2 + V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \quad (A17,$$

auf  $\mathcal{H}_N = L^2(\mathbb{R}^{3N}, \prod d^3x_j).$

Sei  $\psi_t(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \equiv \psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; t)$  eine Lösung der  
 Schrödinger Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = H_N \psi_t.$$

Wir definieren die Dichte

$$\rho_t(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \equiv w(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; t) = |\psi_t(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)|^2 \quad (A18,$$

und die Stromdichte  $\underline{J} = (\vec{J}_1, \dots, \vec{J}_N)$ , wo

$$\vec{J}_j(\underline{x}; t) = \frac{1}{2m_j} \left[ \psi_t^* \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_j - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}_j) \right) \psi_t - \left\{ \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_j + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}_j) \right) \psi_t^* \right\} \psi_t \right] \quad (A19)$$

Satz. Es gilt die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_t + \sum_{j=1}^N \vec{\nabla}_j \cdot \vec{J}_j = 0. \quad (A20)$$

Beweis.

$$\begin{aligned} (1) \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho &= \frac{i}{\hbar} \left\{ \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t \right)^* \psi_t - \psi_t^* \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t \right) \right\} \\ &= \frac{i}{\hbar} \left\{ (H \psi_t)^* \psi_t - \psi_t^* (H \psi_t) \right\} \\ &= \frac{i}{\hbar} \left\{ \left( \sum_{j=1}^N \frac{1}{2m_j} \left( -\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_j - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}_j) \right)^2 \psi_t^* \right) \psi_t \right. \\ &\quad \left. - \psi_t^* \sum_{j=1}^N \frac{1}{2m_j} \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_j - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}_j) \right)^2 \psi_t \right\} \end{aligned}$$

(Terme  $\propto V$  kürzen sich weg)

$$\begin{aligned} &= \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \frac{1}{2m_j} \left[ \left( -\hbar^2 \Delta_j + \frac{\hbar e}{ic} \{ \vec{\nabla}_j, \vec{A}(\vec{x}_j) \} \right) \psi_t^* \right] \psi_t \\ &\quad - \psi_t^* \left( -\hbar^2 \Delta_j - \frac{\hbar e}{ic} \{ \vec{\nabla}_j, \vec{A}(\vec{x}_j) \} \right) \psi_t \quad (A21) \end{aligned}$$

wo der Antikommutator durch

$$\{A, B\} := AB + BA$$

definiert ist; die Terme  $\propto \vec{A}^2$  kürzen sich gegenseitig weg. — Andererseits findet man

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \vec{p}_j \cdot \vec{J}_j &= \sum_{j=1}^N \frac{1}{2m_j} \left[ \vec{p}_j \psi_t^* \left( \frac{\hbar}{i} \vec{p}_j - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}_j) \right) \psi_t \right. \\ &\quad + \psi_t^* \left( \frac{\hbar}{i} \Delta_j - \frac{e}{c} \vec{p}_j \cdot \vec{A}(\vec{x}_j) \right) \psi_t \\ &\quad - \left( \frac{\hbar}{i} \Delta_j + \frac{e}{c} \vec{p}_j \cdot \vec{A}(\vec{x}_j) \right) \psi_t^* \psi_t \\ &\quad \left. - \left( \frac{\hbar}{i} \vec{p}_j + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}_j) \right) \psi_t^* \vec{p}_j \psi_t \right] \\ &= \sum_{j=1}^N \frac{1}{2m_j} \left[ \psi_t^* \left( \frac{\hbar}{i} \Delta_j - \frac{e}{c} \{ \vec{p}_j, \vec{A}(\vec{x}_j) \} \right) \psi_t \right. \\ &\quad \left. - \left\{ \left( \frac{\hbar}{i} \Delta_j + \frac{e}{c} \{ \vec{p}_j, \vec{A}(\vec{x}_j) \} \right) \psi_t^* \right\} \psi_t \right] \quad (A22) \end{aligned}$$

Der Beweis des Satzes folgt unmittelbar aus Vergleich von (A22) mit (A21)!

Man kann  $\underline{J}$  als Wahrscheinlichkeitsstromdichte auf dem Konfigurationsraum des klassischen  $N$ -Teilchen Systemes auffassen.

Wir schreiben nun die Lagekoordinaten wieder als

$\underline{q} = (q_1, \dots, q_f)$  und die kanonisch konjugierten Impulse als  $\underline{p} = (p_1, \dots, p_f)$ . Von nun an werden wir jedoch  $q_j$  als Operator der Multiplikation von  $\psi \in \mathcal{H}_f \equiv L^2(\mathbb{R}^f, \prod_1^f dq_j)$  mit  $q_j$  und  $p_j$  als Differentiationsoperator,  $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j}$ , auffassen.

### Ehrenfests Theorem.

Es sei  $\langle A \rangle_\psi := \langle \psi, A \psi \rangle$ . Es gelten dann die Gleichungen

$$\frac{d}{dt} \langle q_j \rangle_\psi = \left\langle \frac{\partial H}{\partial p_j} \left( \underline{q}, \underline{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \underline{q}} \right) \right\rangle_\psi \quad (A23)$$

$$\frac{d}{dt} \langle p_j \rangle_\psi = \left\langle - \frac{\partial H}{\partial q_j} \left( \underline{q}, \underline{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \underline{q}} \right) \right\rangle_\psi$$

d.h. für die Erwartungswerte gelten die "klassischen Bewegungsgln."

Für den in (A17) definierten Hamilton Operator finden wir, dass

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{x}_k \rangle_\psi = \frac{i}{\hbar} \langle [H, \vec{x}_k] \rangle_\psi = \frac{1}{m_k} \left\langle \vec{p}_k - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}_k) \right\rangle_\psi$$

$$= \int \vec{J}_k \frac{1}{\pi} \prod_{j=1}^N d^3x_j, \quad (A24) \quad A11$$

und

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \vec{x}_k \rangle_\psi = m \int \frac{\partial \vec{J}_k}{\partial t} \frac{1}{\pi} \prod_{j=1}^N d^3x_j \quad (A25)$$

Nun setzen wir wieder  $(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) =: (q_1, \dots, q_f)$ .

Aus (A19), der Schrödingergleichung und (A.17) findet man nun, nach respektablen Rechnungen,

$$m \frac{\partial J_k}{\partial t} = - \sum_{l=1}^f \frac{\partial T_{kl}}{\partial q_l} + \left[ - \frac{\partial V}{\partial q_k} - \frac{e}{c} \frac{\partial A_k}{\partial t} \right] J_k + \frac{e}{c} \sum_l \left\{ \frac{\partial A_l}{\partial q_k} - \frac{\partial A_k}{\partial q_l} \right\} J_l, \quad (A.26)$$

wo  $(T_{kl})$  der Spannungstensor ist; er ist durch

folgenden Ausdruck gegeben:

$$T_{kl} = \frac{\hbar^2}{4m} \left\{ \left[ -\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial q_l \partial q_k} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial q_l \partial q_k} + \frac{\partial \psi}{\partial q_l} \frac{\partial \psi^*}{\partial q_k} + \frac{\partial \psi^*}{\partial q_l} \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right] + \frac{2ie}{\hbar c} \left[ A_k \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial q_l} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial q_l} \right) + A_l \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial q_k} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial q_k} \right) \right] + \frac{4e^2}{\hbar^2 c^2} A_k A_l \psi^* \psi \right\} \quad (A27)$$

$\frac{1}{c} \frac{\partial A_k}{\partial t}$  = "k-Komponente" des elektrischen Feldes;

$$\frac{\partial A_e}{\partial q_k} - \frac{\partial A_k}{\partial q_e} = \text{"kl-Komponente des magnetischen Feldes"}$$

Aus (A25) und (A26) folgen für die Erwartungswerte die klassischen Bewegungsgln.:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \vec{x}_j \rangle_\psi = \left\langle - \frac{\partial V}{\partial \vec{x}_j}(\vec{x}_j) + e \vec{E}(\vec{x}_j) \right\rangle_\psi + \frac{e}{c} \int \vec{J}_j(\vec{x}_j) \wedge \vec{B}(\vec{x}_j) d^3x_j,$$

denn

$$\sum_e \int \frac{\partial T_{ke}}{\partial q_e} \frac{1}{\pi} dq_i = 0, \quad (\text{Gauss'scher Satz}).$$

### Aperçu der Bohrschen Mechanik

Ausgangspunkt. Zustand eines Teilchens zur

Zeit  $t$  durch Ort,  $\vec{x}(t)$ , im physikalischen Raum bestimmt. Für  $N$ -Teilchensystem ist Zustand zur Zeit  $t$  durch

$$\underline{q}(t) := (\vec{x}_1(t), \dots, \vec{x}_N(t)) \in \mathbb{R}^f, \quad (\text{A28})$$

( $f = 3N$ ) bestimmt. Der Zustand  $\underline{q}(t)$  er-



füllt eine Bewegungsgleichung

$$\underline{\dot{q}}(t) = \underline{v}(\underline{q}(t), t), \quad (\text{A29})$$

wo  $\underline{v} \in T\mathbb{R}^f$  ein i.a. zeitabhängiges Vektorfeld ist. Damit die Theorie prädiktiv wird, müssen wir  $\underline{v}$  bestimmen können. Wie oben definieren wir

$$\underline{J} = (\vec{J}_1, \dots, \vec{J}_N), \text{ mit}$$

$$\begin{aligned} \vec{J}_k(\underline{q}, t) &= \frac{1}{2m_k} \left[ \psi_t^* \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_k - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}_k, t) \right) \psi_t \right. \\ &\quad \left. - \left\{ \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_k + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}_k, t) \right) \psi_t^* \right\} \psi_t \right] \\ &= \frac{1}{m_k} \operatorname{Im}(\psi_t^* \vec{\nabla}_k \psi_t), \end{aligned}$$

oder

$$\underline{J}(\underline{q}, t) = T \operatorname{Im}(\psi_t^* \nabla \psi_t)(\underline{q}) \quad (\text{A30})$$

Nun setzen wir (etwas formal)

$$\underline{v}(\underline{q}, t) := \frac{\underline{J}(\underline{q}, t)}{\rho(\underline{q}, t)}, \quad (\text{A31})$$

$$\rho(\underline{q}, t) := |\psi_t(\underline{q})|^2 \quad (A.32)$$

Für die Wellenfunktion  $\psi_t$  fordern wir die Schrödingergleichung (1.115), d.h.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t(\underline{q}) = H(\underline{q}, \frac{\hbar}{i} \underline{\nabla}_{\underline{q}}, t) \psi_t(\underline{q}). \quad (A.33)$$

Wie oben gezeigt, folgt aus (A.33), dass

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\underline{q}, t) + (\underline{\nabla} \cdot \underline{J})(\underline{q}, t) = 0,$$

oder, mit (A.31),

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\underline{q}, t) + \underline{\nabla} \cdot (\underline{v}(\underline{q}, t) \rho(\underline{q}, t)) = 0. \quad (A.34)$$

Eine Lösung der Schrödingergleichung (A.33) bestimmt über (A.31) ein i.a. zeitabhängiges Vektorfeld  $\underline{v}(\underline{q}, t)$ . Über die Bewegungsgleichung (A.29) bestimmt  $\underline{v}$  einen Fluss,  $\Phi_t$ , auf dem Konfigurationsraum. Nun kehren wir zu den Betrachtungen (A.12) – (A.16) zurück: Wir gehen von einer sta-

statischen Verteilung der  $N$  Teilchen zur Zeit  $t=0$

aus, die durch

$$\rho_0(\underline{q}) = |\psi_0(\underline{q})|^2 \quad (A35)$$

gegeben ist. Wir lösen die Schrödingergleichung

(A.33) zur Anfangsbedingung  $\psi_{t=0}(\underline{q}) = \psi_0(\underline{q})$ .

• Über (A30), (A31) bestimmen wir aus  $\psi_t(\underline{q})$

$\underline{v}(\underline{q}, t)$  und über (A29) den Fluss  $\underline{\Phi}_t$ :

$$\underline{\Phi}_t(\underline{q}) = \underline{q}(t),$$

wo  $\underline{q}(t)$  (A29) löst, mit  $\underline{q}(t=0) = \underline{q}$ .

• Nun definieren wir eine nicht-negative Dichte,

$\tilde{\rho}_t(\underline{q})$ , auf dem Konfigurationsraum des Systems

indem wir

$$\tilde{\rho}_t(\underline{\Phi}_t(\underline{q})) \left| \frac{\partial \underline{\Phi}_t(\underline{q})}{\partial \underline{q}} \right| := \rho_0(\underline{q}) \quad (A36)$$

setzen, d. h.

$$\tilde{\rho}_t(\underline{q}) := \rho_0(\Phi_t^{-1}(\underline{q})) \left| \frac{\partial \Phi_t^{-1}(\underline{q})}{\partial \underline{q}} \right|. \quad (\text{A.37})$$

Dann gilt, dass

$$\int \tilde{\rho}_t(\underline{q}) d^f \underline{q} = \int \rho_0(\underline{q}) d^f \underline{q}, \quad \forall t$$

(Variablentransformation  $\underline{q} \rightarrow \Phi_t(\underline{q})$  auf der L.S.,  
und (A.36)!), und, mit (A.37),

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}_t(\underline{q}) &= -\underline{v}(\underline{q}, t) \cdot \underline{\nabla} \tilde{\rho}_t(\underline{q}) \\ &\quad - \tilde{\rho}_t(\underline{q}) \underline{\nabla} \cdot \underline{v}(\underline{q}, t), \end{aligned}$$

d.h. es folgt die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}_t(\underline{q}) + \underline{\nabla} \cdot (\underline{v}(\underline{q}, t) \tilde{\rho}_t(\underline{q})) = 0, \quad (\text{A.38})$$

wie in (A.34). Da  $\tilde{\rho}_0(\underline{q}) = \rho(\underline{q}, 0)$ , folgt dann

$$\tilde{\rho}_t(\underline{q}) = \rho(\underline{q}, t),$$

d.h.

$$\rho(\underline{q}, t) = |\psi_t(\underline{q})|^2 \quad (\text{A.39})$$

ist die statistische Verteilung der  $N$  Teilchen

zur Zeit  $t$  mit der Anfangsbedingung

$$\rho(\underline{q}, t=0) = \tilde{\rho}_0(\underline{q}) = |\psi_0(\underline{q})|^2. \quad \text{Das ist im}$$

Einklang mit der Bornschen Interpretation der Wellenfunktion.

Nach Bohm sind Wellenfunktion und Schrödingergleichung nur dafür zuständig, über (A30), (A31) und (A29) eine Bewegungsgleichung für ein System von klassischen Teilchen zu liefern, (Wellenfunktion als "Führungswelle" für klassische Punktteilchen). Ich halte diese "Interpretation der Quantenmechanik" aber für verfehlt und Borns Interpretation der Wellenfunktion für eine gute Heuristik, eher denn für fundamental.

---

### 3. Einfache quantenmechanische Systeme

#### 3.1. Der harmonische Oszillator

Siehe Anhang B.

#### 3.2. Das Zweikörperproblem

Ausführliche Version in Anhang C. Hier folgt eine Kurzversion (nach W. Hunziker).

Wir studieren ein klassisch-mechanisches System, das aus zwei Teilchen im physikalischen Raum  $\mathbb{E}^3$  besteht, die über ein sphärisch-symmetrisches Zweikörperpotential  $V$  miteinander wechselwirken.

Die Hamiltonfunktion ist

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + V(|x_1 - x_2|), \quad (3.1)$$

$x_j, p_j \in \mathbb{R}^3$ ,  $(p_1, p_2, x_1, x_2) \in \mathbb{R}^{12}$ . Indem man

die Bewegung in Schwerpunkts - und Relativ-bewegung separiert, sieht man, dass das System

integrabel ist.

Schwerpunkts- und Relativbewegung.

$$X = \frac{1}{M} (m_1 x_1 + m_2 x_2), \quad x = x_1 - x_2 \quad (3.2)$$

mit  $M = m_1 + m_2$ ,  $m := \frac{m_1 m_2}{M}$  (reduzierte Masse,  
konjugierte Impulse

$$P = p_1 + p_2, \quad p = m \left( \frac{p_1}{m_1} - \frac{p_2}{m_2} \right) \quad (3.3)$$

Man hat in der klassischen Mechanik gelernt,  
dass die Transformation

$$(p_1, p_2, x_1, x_2) \mapsto (P, p, X, x) \quad (3.4)$$

kanonisch ist.

Schrödinger schafft den Übergang von der  
klassischen zur Quantenmechanik, indem er  
 $p_1$  durch  $\frac{\hbar}{i} \nabla_1$  und  $p_2$  durch  $\frac{\hbar}{i} \nabla_2$  ersetzt,  
und diese als selbstadjungierte Operatoren auf  
 $L^2(\mathbb{R}^6, d^3x_1, d^3x_2)$  interpretiert. Um in Schwerpunkts-

und Relativkoordinaten umzurechnen, können wir das folgende allgemeine Lemma benützen.

Lemma. Es sei

$$\varphi: (p_1, \dots, p_f, x_1, \dots, x^f) \mapsto (P_1, \dots, P_f, X_1, \dots, X^f)$$

eine lineare, kanonische (symplektische) Transformation von  $\mathbb{R}^{2f}$ . Deutet man  $(p_1, \dots, p_f, x_1, \dots, x^f)$  als Operatoren

$$\hat{p}_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j}, \quad \hat{x}^j = \text{Mult. mit } x^j, \quad (3.5)$$

$j = 1, \dots, f$ , so dass

$$[\hat{x}^k, \hat{p}_l] = i\hbar \delta_l^k,$$

dann gilt, dass

$$\varphi(\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_f, \hat{x}_1, \dots, \hat{x}^f) = (\hat{P}_1, \dots, \hat{P}_f, \hat{X}_1, \dots, \hat{X}^f),$$

wo

$$\hat{P}_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial X^j}, \quad \hat{X}^j = \text{Mult. mit } X^j, \quad j = 1, \dots, f, \quad (3.6)$$

$$[\hat{X}^k, \hat{P}_l] = i\hbar \delta_l^k.$$

Beweis: Übungen.



In Schwerpunkts- und Relativkoordinaten lautet die Hamiltonfunktion (3.1)

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2m} + V(|x|), \quad (3.7)$$

woraus mit dem Schrödingerschen Übersetzungsschlüssel und dem Lemma der Hamiltonoperator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_X + H_{\text{rel}}, \quad (3.8)$$

mit

$$H_{\text{rel}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x + V(|x|) \quad (3.9)$$

wird. Die Schrödingergleichung,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = H \psi_t, \quad \psi_t \in L^2(\mathbb{R}^6), \quad (3.10)$$

kann man nun durch einen Separationsansatz

$$\psi_t(X, x) = \underline{\psi}_t(X) \varphi_t(x) \quad (3.11)$$

lösen. Gelingt dies, so findet man dank der

Linearität von (3.10) die allgemeine Lösung von (3.10)

durch Superposition von Lösungen der Form (3.11).

Die Wellenfunktionen  $\Psi_t$  und  $\varphi_t$  erfüllen die Schrödingergleichungen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_t = - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_X \Psi_t \quad (\rightarrow \text{freies Teilchen}), \quad (3.12)$$

resp.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t = \left( - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x + V(|x|) \right) \varphi_t \quad (3.13)$$

Gl. (3.12) beschreibt die freie Bewegung des Schwerpunkts; Gl. (3.13) die Relativbewegung.

Nun versuchen wir, die Schrödingergleichung für die Relativbewegung zu lösen. Das Problem ist rotations-symmetrisch. Klassisch sind daher alle Komponenten des Relativ-drehimpulses,  $\vec{L}$ , Erhaltungsgrößen, und  $H, \vec{L}^2, L_z$  sind miteinander in Involution, woraus die Integrabilität des Problems folgt. Auch quantenmechanisch sind die Komponenten von  $\vec{L}$  Erhaltungsgrößen:

$$\vec{L} = \vec{x} \wedge \vec{p} \stackrel{QM}{=} \vec{x} \wedge \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \quad (3.14)$$

Man verifiziert leicht, dass

$$[H, L_j] = 0, \quad j = x, y, z; \quad (3.15)$$

insbesondere vertauschen  $H, \vec{L}^2$  und  $L_z$  miteinander, und darauf lässt sich die Lösungstheorie der Schrödingergleichung für die Relativbewegung aufbauen. Mehr dazu werden wir in Kap. 5 und Kap. 6 lernen. In diesem Kapitel benutzen wir zur Lösung von (3.13) Polarkoordinaten, die der Rotationssymmetrie des Problems angepasst sind. Wir beziehen uns auf Bsp. 2, Kap. 1,

$$(1.117): \quad \vec{x} = (r \sin \vartheta \cos \varphi, r \sin \vartheta \sin \varphi, r \cos \vartheta)$$

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \Lambda, \quad \text{wo}$$

$$\Lambda = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \cdot \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (3.16)$$

$\Lambda$  ist der Laplace-Beltrami Operator auf

$L^2(S^2, d\Omega)$ , wo  $S^2$  die Einheitskugel im  $\mathbb{R}^3$

ist, und  $d\Omega = d\vartheta \sin\vartheta d\varphi$ . Man verifiziert durch Rechnen oder Denken, dass

$$\Lambda = -\frac{1}{\hbar^2} \vec{L}^2, \quad (3.17)$$

und

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Nun lautet (3.13):

$$i\hbar \varphi_t(r, \vartheta, \varphi) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\hbar^2}{2m r^2} \Lambda + V(r) \right) \varphi_t(r, \vartheta, \varphi) \quad (3.18)$$

Diese Gleichung lösen wir folgendermassen:

(1) Wir suchen zunächst stationäre Lösungen,

$$\varphi_t(r, \vartheta, \varphi) = e^{-i(Et)/\hbar} \chi_E(r, \vartheta, \varphi)$$

für die (3.18) auf das Eigenwertproblem

$$\underbrace{\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\hbar^2}{2m r^2} \Lambda + V(r) \right)}_{H_{\text{rel}}} \chi_E(r, \vartheta, \varphi) = E \chi_E(r, \vartheta, \varphi), \quad (3.19)$$

$E \in \sigma(H_{\text{rel}})$ , führt. Die Gleichung (3.19)

lösen wir nun durch einen Separationsansatz:

$$\chi_E(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r} u(r) Y_l(\vartheta, \varphi), \quad (3.20)$$

wo  $\{Y_l\}_{l=0}^{\infty}$  ein VONS in  $L^2(S^2, d\Omega)$  sein

möge. Der Operator  $\Delta$  ist nicht nur symmetrisch, sondern selbstadjungiert auf  $L^2(S^2, d\Omega)$ , und es

bietet sich an, die  $Y_l$ 's als Eigenfunktionen von

$\Delta$  zu wählen. Diese Eigenfunktionen heißen

Kugelfunktionen und sind aus ED und MMP

bekannt. Für unsere Zwecke genügen folgende Betrachtungen.

Kugelfunktionen.

Für  $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$  sei  $\hat{x} := \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|} \in S^2$ ,  $|\vec{x}| = r$ .

Die Funktion  $Y_l(\hat{x})$  heißt Kugelfunktion zum  
Index  $l$ , falls

$$r^l Y_l(\hat{x}) =: u_l(x) \quad (3.21)$$

ein homogenes, harmonisches Polynom in den Variablen  $x, y, z$  vom Grad  $l$  ist. Aus  $\Delta u_l = 0$  folgt mit (3.16), dass

$$\Lambda Y_l = -l(l+1)Y_l, \quad (3.22)$$

$l = 0, 1, 2, \dots$ ; d.h. die  $Y_l$  sind die gesuchten Eigenfunktionen des Operators  $\Lambda$ . Da  $\Lambda$  symmetrisch ist, folgt, dass

$$\langle Y_l, Y_{l'} \rangle := \int_{S^2} d\Omega \overline{Y_l(\hat{x})} Y_{l'}(\hat{x}) = 0, \quad (3.23)$$

für  $l \neq l'$ .

Lemma. Der Raum der Kugelfunktionen zum Index  $l$ , d.h. der Eigenraum von  $\Lambda$  zum Eigenwert  $-l(l+1)$ ,  $H_l$ , hat die Dimension  $2l+1$ .

Beweis. Es sei  $P_l$  der Raum aller homogenen Polynome in  $x, y, z$  vom Grad  $l$ . Die Dimension von  $P_l$  ist die Zahl der Tripel nicht-negativer ganzer Zahlen mit Quersumme  $l$ . Also:

$$\dim P_l = (l+1) + l + (l-1) + \dots + 1. \quad (3.24)$$

Der Raum  $H_l = \langle r^l y_l \rangle$  ist der Kern der Abbildung

$$\Delta: P_l \rightarrow P_{l-2};$$

daher

$$\dim H_l \geq \dim P_l - \dim P_{l-2} = 2l+1. \quad (3.25)$$

Die homogenen Polynome

$$a_l r^l y_l(\hat{x}) + a_{l-2} r^2 (r^{l-2} y_{l-2}(\hat{x})) + \dots \quad (3.26)$$

$a_l, a_{l-2}, \dots$  in  $\mathbb{C}$ , bilden wegen der Orthogonalitätsrelationen (3.23) einen Unterraum von  $P_l$  der

Dimension

$$\dim H_l + \dim H_{l-2} + \dots \stackrel{(3.24), (3.25)}{\geq} \dim P_l \quad (3.27)$$

Die Summe auf der linken Seite kann nicht grösser als  $\dim P_l$  sein. Daher muss in (3.25) und in (3.27) das Gleichheitszeichen gelten.

Q.E.D.

Jedes homogene Polynom in  $x, y, z$  vom Grad  $l$  muss also die Form (3.26) haben. Somit ist jedes

Polynom in  $x, y, z$  vom Grad  $l$ , restringiert auf  $S^2$ ,  
eine Summe von Kugelfunktionen zu Indices  $\leq l$ .

Diese Polynome liegen dicht in  $L^2(S^2, d\Omega)$ ; (Anwendung des Satzes von Weierstrass!). Deshalb bilden die Kugelfunktionen ein vollständiges System in  $L^2(S^2, d\Omega)$ .

---

Nun kehren wir zum Separationsansatz (3.20) zurück. Eingesetzt in (3.19) finden wir mit (3.22), dass

$$\begin{aligned} H_{\text{rel}} \chi_E &= \frac{1}{r} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} u''(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} u(r) \right. \\ &\quad \left. + V(r) u(r) \right) Y_l(\hat{x}) \\ &\stackrel{!}{=} E \frac{1}{r} u(r) Y_l(\hat{x}). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Es soll also

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U_l(r) \right) u(r) = E u(r) \quad (3.29)$$

gelten, wo

$$U_l(r) = \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}}_{\text{Zentrifugalbarriere}} + V(r) \quad (3.30)$$



Nun bestimmen wir zunächst die Eigenwerte von  $H_{\text{rel}}$ , d.h. die Energien in  $\mathcal{B}_{pp}(H_{\text{rel}})$ . Die zugehörigen Eigenvektoren heißen

### Gebundene Zustände

Wir setzen  $\varepsilon := \frac{2m}{\hbar^2} E$ , und  $\Phi(r) := \frac{2m}{\hbar^2} V(r)$ .

Dann wird aus (3.29)

$$-u'' + \frac{l(l+1)}{r^2} u + \Phi(r)u(r) = \varepsilon u(r), \quad (3.31)$$

mit  $u(r) \in L^2([0, \infty), dr)$ .

Wir nehmen an, dass  $\Phi(r) \rightarrow 0$ , für  $r \rightarrow \infty$ ,  
und  $r^2 \Phi(r) \rightarrow 0$ , für  $r \rightarrow 0$ . Die Gleichung (3.31) ist eine homogene, gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung und hat für jedes  $\varepsilon$  einen zweidimensionalen Lösungsraum. Das Verhalten der Lösungen für  $r \rightarrow 0$  und  $r \rightarrow \infty$  bestimmt sich wie folgt:

(a)  $r \rightarrow 0$ . Für  $r \rightarrow 0$  kann (3.31) durch

$$-u'' + \frac{l(l+1)}{r^2} u = 0$$

ersetzt werden. Die allgemeine Lösung ist:

$$ar^{l+1} + br^{-l}, \quad a, b \in \mathbb{C}, \quad (3.32)$$

$l = 0, 1, 2, \dots$ . Für  $b \neq 0$  ist die Wellenfunktion in (3.20) singularär bei  $r=0$ ,  $\forall l \geq 0$ ; (für  $l \geq 1$  wäre sie bei  $r=0$  gar nicht mehr quadrat-integrierbar). Offenbar muss sich also eine Lösung,  $u_0$ , von (3.31) für  $r \rightarrow 0$  wie

$$u_0(\varepsilon, r) \sim r^{l+1} \quad (3.33)$$

verhalten, mit  $l = 0, 1, 2, \dots$ , damit sie in  $L^2([0, \infty), dr)$  ist

b)  $r \rightarrow \infty$ . Für  $r \rightarrow \infty$  kann (3.31) durch

$$-u'' = \varepsilon u$$

ersetzt werden. Die allgemeine Lösung ist

$$u(r) = a e^{ikr} + b e^{-ikr}, \quad k = \sqrt{\varepsilon}. \quad (3.34)$$

Für  $\varepsilon > 0$  sind diese Funktionen nicht quadrat-integrierbar. Deshalb hat (3.31) keine Lösung

$u \in L^2([0, \infty), dr)$ , wenn  $\varepsilon > 0$ . Für  $\varepsilon < 0$  gibt

es jedoch eine bis auf Normierung eindeutige Lösung,  $u_\infty$ , von (3.31) mit

$$u_\infty(\varepsilon, r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\kappa r}, \quad \kappa = \sqrt{-\varepsilon} > 0. \quad (3.35)$$

Eine Lösung von (3.31) mit  $u \in L^2([0, \infty), dr)$  muss sich für  $r \rightarrow 0$  wie  $u_0$  und für  $r \rightarrow \infty$  wie  $u_\infty$  verhalten. Daher muss  $\varepsilon < 0$  sein, und  $u_0(\varepsilon, r) \propto u_\infty(\varepsilon, r)$ , (d.h.  $u_0$  und  $u_\varepsilon$  sind linear abhängig). Man überzeugt sich leicht, dass dies bedeutet, dass die Wronski Determinante

$$W(\varepsilon) := \begin{vmatrix} u_0(\varepsilon, r) & u_0'(\varepsilon, r) \\ u_\infty(\varepsilon, r) & u_\infty'(\varepsilon, r) \end{vmatrix} \equiv 0 \quad (3.36)$$

sein muss. Daraus folgt, dass

$$(u_0(\varepsilon, r), u_0'(\varepsilon, r)) = \alpha (u_\infty(\varepsilon, r), u_\infty'(\varepsilon, r)),$$

$\forall r$ , für ein  $\alpha \in \mathbb{C}$ . Die Gleichung (3.36) ist eine Gleichung für die Eigenwerte  $\varepsilon = \varepsilon_n$ ,

$n = 1, 2, \dots$ , von  $H_{\text{rel}}$ .

Mehr Einzelheiten dazu studieren wir in den Übungen.

Lösungen von (3.31) für  $\varepsilon > 0$  (kontinuierliches Energiespektrum von  $H_{\text{rel}}$ ) studieren wir im Kapitel über Potentialstreuung (Kap. 4).

---

### Wasserstoffatom und wasserstoff-ähnliche Ionen

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \quad \Phi(r) = -\frac{2}{ar}$$

mit  $a = \frac{\hbar^2}{Ze^2 m} = \underline{\text{Bohrradius eines Ions mit}}$

Kernladungszahl  $Z$ . Wir setzen  $\beta = 2/a$  und

machen für die Lösung von (3.31) den durch

(3.33) und (3.35) motivierten Ansatz

$$u(r) = e^{-\kappa r} \sum_{k=l+1}^{\infty} c_k r^k, \quad \kappa = \sqrt{-\varepsilon}. \quad (3.37)$$

Eingesetzen in (3.31) führt auf die Rekursion

$$c_{k+1} = c_k \frac{\beta - 2\kappa k}{l(l+1) - k(k+1)}. \quad (3.38)$$

Es gibt daher bis auf Normierung höchstens eine Lösung von (3.31) mit der Form (3.37).

Falls die Rekursion (3.38) nicht abbricht, so finden wir, dass

$$c_k \sim \frac{(2\kappa)^k}{k!}, \quad (k \rightarrow \infty).$$

Also

$$u(r) \sim e^{\kappa r} \quad (r \rightarrow \infty),$$

d.h.  $u$  ist nicht quadratintegrabel. Für Eigenfunktionen von  $H_{\text{rel}}$ , d.h. Lösungen von (3.31) in

$L^2([0, \infty), dr)$  muss die Rekursion (3.38) daher abbrechen

$$c_n \neq 0, \quad c_{n+1} = 0, \quad \text{für } n = l+1, l+2, \dots$$

Diese Bedingung ist erfüllt, falls

$$\kappa = \frac{\beta}{2n} = \frac{mZ e^2}{n \hbar^2} \equiv \kappa_n \quad (3.39)$$

ist. Also

$$E = E_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \kappa_n^2 = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (3.40)$$

für  $n = 1, 2, 3, \dots$  (Hauptquantenzahl). Die zuge-

hörigen Eigenfunktionen sind

$$u_{nl}(r) = e^{-\kappa_n r} \sum_{k=l+1}^n c_k r^k, \quad (3.41)$$

mit  $\kappa_n$  wie in (3.39) und  $c_k$  bestimmt aus

$c_{l+1}$ , für  $k > l+1$ , mit Hilfe der Rekursion (3.38).

Für vorgegebene Hauptquantenzahl  $n$  kann  $l$  offenbar über

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (3.42)$$

variieren. Die Eigenfunktionen von  $H_{rel}$  zum Eigenwert  $E_n$  wie in (3.40) sind also

$$\psi_{nl}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r} u_{nl}(r) Y_l(\vartheta, \varphi), \quad (3.43)$$

wo  $Y_l$  eine Kugelfunktion zum Index  $l$  ist, und

$l \leq n-1$ . Für festes  $l$  gibt es gerade  $2l+1$  Kugel-

funktionen. Die Entartung von  $E_n$  ist daher durch

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (3.44)$$

gegeben. Nicht entartet ist offensichtlich nur

die Grundzustandsenergie  $E_1$  mit zugehöriger

# Grundzustandswellenfunktion

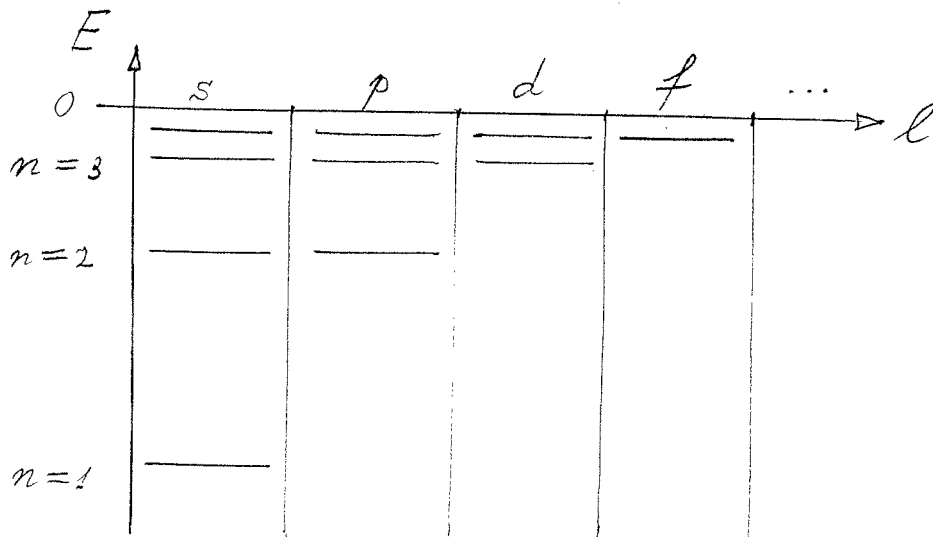
$$\psi_{10}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-(r/a)}, \quad (3.45)$$

wo  $a$  der Bohrradius ist. Im Unterschied zur Bohrschen Theorie hat  $\psi_{10}$  den Drehimpuls 0; (siehe (3.14)).

Die "zufällige" Entartung (3.44) ist speziell für das Coulomb Potential. Für ein "generisches" Potential

$V(r)$  definiert man die Hauptquantenzahl  $n$  als die Zahl der Nullstellen, oder "Knoten", der radialen Wellenfunktion,  $u_{nl}(r)$ , in  $[0, \infty)$ . Der Eigenwert,  $E_{nl}$ , zu (3.29) hängt dann i.a. von  $n$  und von  $l$  ab.

Term schema von  $H$



Die Buchstaben s, p, d, f, + alphabetisch, sind die gebräuchlichen spektroskopischen Bezeichnungen für Zustände mit  $l=0, 1, 2, \dots$ .

### Das kontinuierliche Spektrum von $H_{\text{rel}}$ .

Allgemeine sphärisch-symmetrische Zweikörperprobleme behandeln wir im nächsten Kapitel (Potentialstreuung). Hier beschränken wir uns auf wasserstoffähnliche Ionen und die Rutherford Streuung.

Dazu folgen wir Anhang C, ab S. 43.



## Das kontinuierliche Spektrum des Wasserstoffatoms. 4.

Wir wollen nun die Schrödingergleichung

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \right] \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x}) \quad (110)$$

für die Relativbewegung zweier Teilchen mit

Ladungen  $Z_1 e, Z_2 e$  für den Fall, dass  $E \geq 0$ ,

(d.h.  $E$  gehört zum kontinuierlichen Spektrum von  $H_m$ ),

direkt lösen. Es stellt sich heraus, dass es nicht nötig

ist, die Winkelvariablen  $\theta, \varphi$  von der Variablen  $r$

durch Entwicklung nach Kugelfunktionen zu separieren.

Wir schreiben

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{1}{2} m v^2, \quad \gamma = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v}, \quad (111)$$

und finden dann, dass (110) in die Gl.

$$\left( \Delta + k^2 - \frac{2\gamma k}{r} \right) \psi(\vec{x}) = 0 \quad (112)$$

übergeht. Wir machen für die Lösung den Ansatz

$$\psi(\vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} f(u), \quad (113)$$

wo  $\vec{k}$  ein Wellenvektor mit  $|\vec{k}| = k$  ist und

$$u = ik \left( r - \frac{\vec{k} \cdot \vec{x}}{k} \right). \quad (114)$$

Legen wir die  $z$ -Achse unseres Koordinatensystems in die <sup>44</sup>  
Richtung von  $\vec{k}$ , so finden wir

$$\psi(\vec{x}) = e^{ikz} f(u), \quad u = ik(r-z).$$

Setzen wir diesen Ansatz in (112) ein, so ergibt sich für  $f$  die Gleichung

$$\left[ u \frac{d^2}{du^2} + (1-u) \frac{d}{du} + i\gamma \right] f(u) = 0. \quad (115)$$

⊖ Dies kann man durch Umrechnen des Laplace Operators auf die Koordinaten  $r, u, \varphi$  verifizieren; unser Ansatz für  $\psi$  hängt dann nicht von  $\varphi$  ab.

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} = ik \frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial u} + \text{Abl. nach } \varphi$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} = ik \left( \frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3} \right) \frac{\partial}{\partial u} - k^2 \frac{x^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \text{---''---}$$

⊖ Ebenso

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = ik \left( \frac{1}{r} - \frac{y^2}{r^3} \right) \frac{\partial}{\partial u} - k^2 \frac{y^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \text{---''---}$$

Schliesslich

$$\frac{\partial}{\partial z} (e^{ikz} f(u)) = ik \left[ e^{ikz} f(u) + e^{ikz} \frac{\partial f}{\partial u} \left( \frac{z}{r} - 1 \right) \right]$$

-----

Also

$$\Delta \psi = e^{ikr} (ik) \left[ \left( 2ik \left( \frac{z}{r} - 1 \right) + \left( \frac{1}{r} - \frac{z^2}{r^3} \right) + \left( \frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3} \right) + \left( \frac{1}{r} - \frac{y^2}{r^3} \right) \right) \frac{df}{du} \right]$$

$$\begin{aligned}
& + ik \left( \frac{y^2}{r^2} + \frac{z^2}{r^2} + \frac{x^2}{r^2} - 2 \frac{z}{r} + 1 \right) \frac{d^2 f}{du^2} \Big] \\
& = e^{ikz} \left[ -k^2 f + \left( \frac{2}{r} + \frac{2ik(z-r)}{r} \right) \frac{df}{du} \cdot ik \right. \\
& \quad \left. - \frac{2k^2}{r} (r-z) \frac{d^2 f}{du^2} \right] \quad (116)
\end{aligned}$$

Einsetzen von (116) in (112) und Kürzen mit  $2 \frac{e^{ikz}}{r} ik$  ergibt (115).

Die Gl. (115) ist, wie (98), ein Spezialfall der konfluenten, hypergeometrischen Differentialgleichung.

Die Lösung wird mit

$$f(u) = F(-ix, 1; u) \equiv F(-ix | 1 | u)$$

bezeichnet. Damit wird die Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung (112)

$$\psi(\vec{x}) \equiv \psi_k(\vec{x}) = A e^{ikz} F(-ix | 1 | ik(r-z)) \quad (117)$$

Damit wir mit diesem Resultat etwas anfangen können, müssen wir nun die konfluente, hypergeometrische

Funktion  $F(\alpha, \gamma; z)$  genauer studieren.

→ (48)

# Exkurs über konfluente, hypergeometrische Funktionen.

Dgl. ist

$$z \frac{d^2 w}{dz^2} + (\gamma - z) \frac{dw}{dz} - \alpha w = 0 \quad (118)$$

Potenzreihenansatz für Lösung:

$$w(z) = z^s \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k, \text{ mit } a_0 \neq 0. \quad (119)$$

Eingesetzt in (118) finden wir

$$\begin{aligned} [s(s-1) + s\gamma] a_0 z^{s-1} + z^s \sum_{k=0}^{\infty} [(\gamma + k + s)(k + s + 1) a_{k+1} \\ - (k + s + \alpha) a_k] z^k = 0, \forall z. \quad (120) \end{aligned}$$

Also

$$\left. \begin{aligned} s(s-1) + s\gamma &= 0 \\ a_{k+1} &= \frac{k + s + \alpha}{(k + s + \gamma)(k + s + 1)} a_k \end{aligned} \right\} \quad (121)$$

Daraus erhalten wir  $s=0$  oder  $s=1-\gamma$ . Für  $s=0$ ,

ist (119) die hypergeometrische Reihe, die wir schon

kennen:

$$F(\alpha/\gamma/z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+k)}{\Gamma(\alpha)} \cdot \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma+k)} \frac{1}{k!} z^k, \quad (122)$$

wo  $\Gamma$  die  $\Gamma$ -Funktion bedeutet:

47

$$\Gamma(z) := \int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-t} dt, \quad (\operatorname{Re} z > 0). \quad (123)$$

Die Funktion  $F(\alpha/\gamma/z)$  ist ganz analytisch so lange  $-\gamma \neq 0, 1, 2, \dots$ . Für  $-\alpha = 0, 1, 2, \dots$  ist  $F(\alpha/\gamma/z)$  ein Polynom vom Grad  $-\alpha$ . Nun betrachten wir die Lösung mit  $s = 1-\gamma$ . Wir setzen  $w = z^{1-\gamma} v$  und erhalten für  $v$  die Gleichung

$$z v'' + (2-\gamma-z) v' - (1+\alpha-\gamma) v = 0, \quad (124)$$

mit  $v(0) \neq 0$ . Vergleich von (124) mit (118) zeigt,

dass

$$v(z) = F(1+\alpha-\gamma/2-\gamma/z).$$

Wir schliessen, dass

$$\left. \begin{aligned} &F(\alpha/\gamma/z), \quad \gamma \neq 0, -1, -2, \dots, \text{ und} \\ &z^{1-\gamma} F(1+\alpha-\gamma, 2-\gamma, z), \quad \gamma \neq 2, 3, 4, \dots, \end{aligned} \right\} \quad (125)$$

die zwei Lösungen von (118) sind. Für  $\gamma = 1$  sind sie identisch, aber für  $\gamma \neq 1$  sind sie linear unabhängig.  $F(\alpha/\gamma/z)$  ist regulär bei  $z=0$ .

## Integraldarstellung der konfl., hypergeom. Funktion. <sup>48</sup>

Wir lösen nun (118) mit einer Integraldarstellung:

$$w(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_C e^{tz} f(t) dt, \quad C, f \text{ unbekannt}$$

Eingesetzt in (118) findet man

$$\int_C e^{tz} [z t^2 + (r-z)t - \alpha] f(t) dt = 0, \quad \forall z.$$

Nun ist  $z e^{tz} = \frac{d}{dt} e^{tz}$ . Wir benützen diese Gleichung und integrieren partiell. Das ergibt

$$\begin{aligned} & \int_C \frac{d}{dt} [e^{tz} t(t-1) f(t)] dt \\ & + \int_C e^{tz} \left[ -\frac{d}{dt} (t(t-1) f(t)) + r t f(t) - \alpha f(t) \right] dt = 0 \end{aligned}$$

Wir wählen die Kontur  $C$  so, dass der erste Term verschwindet. Dann erhalten wir für  $f$  die Differentialgleichung

$$-\frac{d}{dt} (t(t-1) f(t)) + (rt - \alpha) f(t) = 0$$

mit der Lösung

$$f(t) = t^{\alpha-1} (t-1)^{r-\alpha-1}$$

Daher

$$w_1(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_C e^{tz} t^{\alpha-1} (t-1)^{r-\alpha-1} dt, \quad (126)$$

mit der Bedingung, dass

$$\int_C \frac{d}{dt} [e^{tz} t^\alpha (t-1)^{\gamma-\alpha}] dt = 0. \quad (127)$$

Wegen (125) ist dann auch

$$w_2(z) = \frac{z^{1-\gamma}}{2\pi i} \int_{C'} e^{tz} t^{\alpha-\gamma} (t-1)^{-\alpha} dt \quad (128)$$

eine Lösung, wobei  $C'$  die Bedingung

$$\int_{C'} \frac{d}{dt} [e^{tz} t^{\alpha-\gamma+1} (t-1)^{-\alpha+1}] dt \quad (129)$$

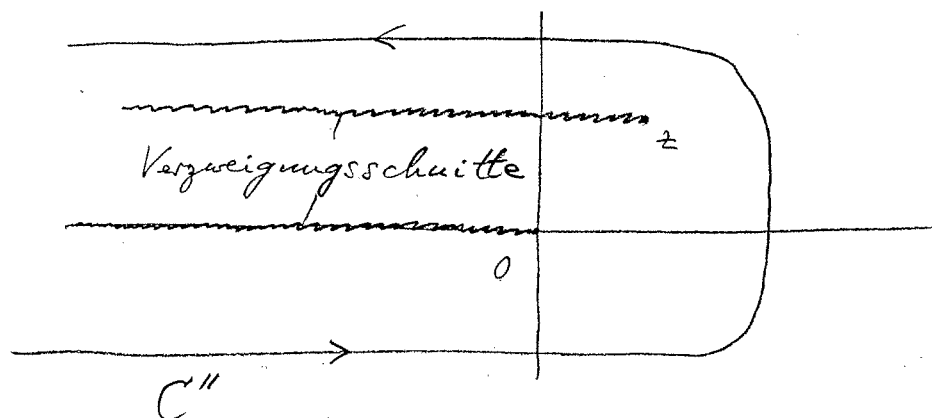
erfüllen muss. (128) kann man auch wie folgt schreiben:

$$w_2(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C'} e^{tz} (tz)^{\alpha-\gamma} (tz-z)^{-\alpha} z dt$$

$$\stackrel{tz=\tau}{=} \frac{1}{2\pi i} \int_{C''} e^{\tau} \tau^{\alpha-\gamma} (\tau-z)^{-\alpha} d\tau \quad (130)$$

$$\text{mit } \int_{C''} \frac{d}{d\tau} [e^{\tau} \tau^{\alpha-\gamma+1} (\tau-z)^{-\alpha+1}] d\tau = 0 \quad (131)$$

Bedg. (131) für  $C''$  ist erfüllt, falls  $C''$  wie in Figur



→ (51)

Definieren  $\tau^{\alpha-\gamma+1}$ ,  $(\tau-z)^{-\alpha+1}$  mit Hauptast des Log.

Man bemerke, dass  $w_2(z)$ , def. durch (130), bei  $z=0$  regulär ist und für  $\alpha = 0, -1, -2, \dots$ , ein Polynom ist. Also gilt

$$w_2(z) = A(\gamma) F(\alpha/\gamma|z), \quad (132)$$

wo  $A(\gamma) = w_2(0)$  ;  $(F(\alpha/\gamma|0) = 1)$ .

Für  $A(\gamma)$  haben wir nach (130) die Integraldarstellung

$$A(\gamma) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C''} e^{\tau} \tau^{-\gamma} d\tau. \quad (133)$$

Dies definiert eine ganze Funktion von  $\gamma$ . Nun haben wir

$$\begin{aligned} A(\gamma+1) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{C''} e^{\tau} \tau^{-\gamma-1} d\tau = -\frac{1}{\gamma} \frac{1}{2\pi i} \int_{C''} e^{\tau} \frac{d}{d\tau} \tau^{-\gamma} d\tau \\ &= \frac{1}{\gamma} \frac{1}{2\pi i} \int_{C''} e^{\tau} \tau^{-\gamma} d\tau = \frac{1}{\gamma} A(\gamma). \end{aligned}$$

(- Weiter gilt

$$A(1) = e^{\tau} \Big|_{\tau=0} = 1.$$

Also gilt

$$A(\gamma) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)}, \quad (134)$$

wo  $\Gamma$  die in (123) definierte  $\Gamma$ -Funktion ist. Gl. (133)

ist die sog. Hankel-Darstellung der  $\Gamma$ -Funktion.

Damit haben wir, dass

$$F(\alpha/\gamma|z) = \Gamma(\gamma) w_2(z),$$

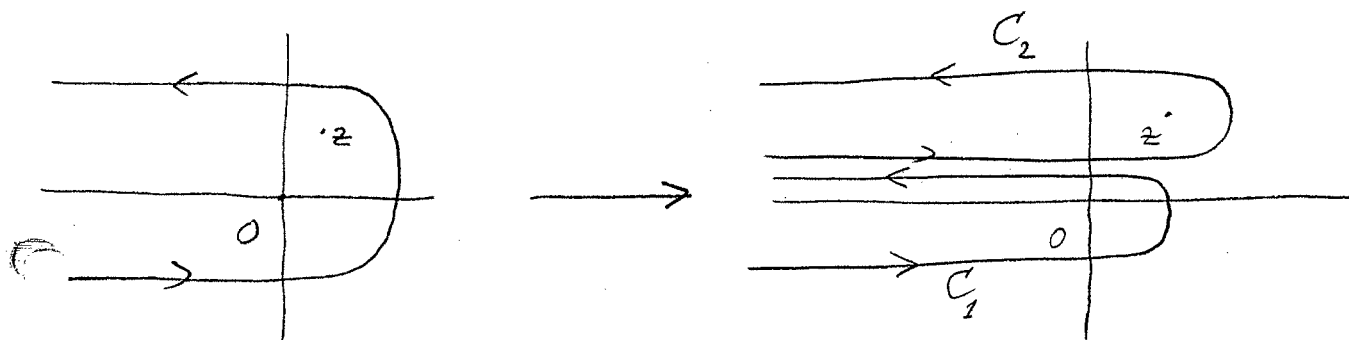


d.h.

51.

$$F(\alpha/\gamma/z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i} \int_{C''} e^{\tau} \tau^{\alpha-\gamma} (\tau-z)^{-\alpha} d\tau \quad (135)$$

Asymptotik von  $F(\alpha/\gamma/z)$ : Wir spalten die Kontur  $C''$  in zwei Teile auf,



und setzen

$$\Phi_s(\alpha/\gamma/z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i} \int_{C_s} e^{\tau} \tau^{\alpha-\gamma} (\tau-z)^{-\alpha} d\tau \quad (136)$$

Dann ist

$$F(\alpha/\gamma/z) = \Phi_1(\alpha/\gamma/z) + \Phi_2(\alpha/\gamma/z).$$

Für  $s=2$  setzen wir  $\tau' = \tau - z$  und finden

$$\begin{aligned} \Phi_2(\alpha/\gamma/z) &= e^z \frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i} \int_{C_1} e^{\tau'} (\tau')^{-\alpha} (\tau'+z)^{\alpha-\gamma} d\tau' \\ &= e^z \Phi_1(\gamma-\alpha/\gamma/-z). \end{aligned} \quad (137)$$

Es genügt also  $\Phi_1$  zu diskutieren. Dazu benutzen wir, dass

$$\begin{aligned} (\tau-z)^{-\alpha} &= (-z)^{-\alpha} \left(1 - \frac{\tau}{z}\right)^{-\alpha} = (-z)^{-\alpha} \sum_{n=0}^N \binom{-\alpha}{n} \left(-\frac{\tau}{z}\right)^n \\ &\rightarrow (141) + R_N(\tau, z), \end{aligned} \quad (138)$$

wo  $R_N(\tau, z)$  das Restglied einer Taylorentwicklung in  $\frac{1}{z}$  darstellt. Einsetzen von (138) in (136) für  $s=1$  liefert:

$$\begin{aligned} \Phi_1(\alpha/\gamma/z) &= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)} (-z)^{-\alpha} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{\Gamma(\alpha+n) \Gamma(\alpha-\gamma+1+n)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\alpha-\gamma+1) n!} \left(-\frac{1}{z}\right)^n \right\} \\ &\quad + O\left(\left|\frac{1}{z}\right|^{N+1}\right) \end{aligned} \quad (139)$$

(Das Abschätzen des Restgliedes sei dem Leser als Übung empfohlen.) Gl. (137) gibt nun

$$\begin{aligned} \Phi_2(\alpha/\gamma/z) &= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^z z^{\alpha-\gamma} \left\{ \sum_{n=0}^N \frac{\Gamma(\gamma-\alpha+n) \Gamma(1-\alpha+n)}{\Gamma(\gamma-\alpha) \Gamma(1-\alpha) n!} \left(\frac{1}{z}\right)^n \right\} \\ &\quad + O\left(\left|\frac{1}{z}\right|^{N+1}\right) \end{aligned} \quad (140)$$

Speziell für  $N=1$  finden wir

$$\begin{aligned} F(\alpha/\gamma/z) &= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)} (-z)^{-\alpha} \left[ 1 + O\left(\left|\frac{1}{z}\right|\right) \right] \\ &\quad + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^z z^{\alpha-\gamma} \left[ 1 + O\left(\left|\frac{1}{z}\right|\right) \right]. \end{aligned} \quad (141)$$

Anwendung auf Coulomb - Problem.

Nach (117) haben wir, dass

$$\psi_k(\vec{x}) = A e^{ikz} F(-i\gamma |1/ik(r-z)|), \quad (142)$$

mit  $\gamma = \frac{Z_1 Z_2 e^2 m}{\hbar^2 k}$ , (beachte (111)).

Wir wählen  $A = \Gamma(1+i\gamma) e^{-\frac{1}{2}\pi\gamma}$  und finden aus (141) und

(142), dass

$$\psi_k(\vec{x}) = \underbrace{\psi_i(\vec{x})}_{\text{"incident"}} + \underbrace{\psi_s(\vec{x})}_{\text{"scattered"}}, \quad (143)$$

wo

$$\psi_i(\vec{x}) = e^{i[kz + \gamma \ln k(r-z)]} \left[ 1 + O\left(\frac{1}{|r-z|}\right) \right] \quad (144)$$

und

$$\psi_s(\vec{x}) = - \frac{\gamma}{k(r-z)} \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} e^{i[kr - \gamma \ln k(r-z)]} \times \left[ 1 + O\left(\frac{1}{|r-z|}\right) \right] \quad (145)$$

$$=: \frac{1}{r} \exp[i(kr - \gamma \ln 2kr)] f(\theta),$$

wo

$$f(\theta) = - \frac{\gamma}{2k \sin^2 \theta/2} \exp[-i\gamma \ln(\sin^2 \theta/2) + 2i\sigma_0], \quad (146)$$

mit  $\sigma_0 = \arg \Gamma(1+i\gamma)$ . (Haben benutzt, dass

$$1 - \cos \theta = 2 \sin^2 \theta/2.)$$

Wählen wir die  $z$ -Achse in Richtung eines Einheitsvektors  $\vec{e} \in S^2$  und setzen  $\vec{k} = k\vec{e}$ , so erhalten wir für jeden Wellenvektor  $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$  eine Lösung  $\psi_{\vec{k}}(\vec{x})$  zur

Energie  $\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \geq 0$ . Die Funktionen

$$\{\psi_{n\vec{k}}^m(\vec{x}), \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) : -l \leq m \leq l, l=0,1,2,\dots, n \geq l+1, \vec{k} \in \mathbb{R}^3\}$$

sind vollständig in  $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ , d.h. jede Wellen-

Funktion  $\psi(\vec{x}) \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$  hat eine Entwicklung

$$\psi(\vec{x}) = \sum_{m,l,n} a_{nl}^m \psi_{nl}^m(\vec{x}) + \int A(\vec{k}) \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) d^3k. \quad (147)$$

Daraus bekommen wir auch leicht die allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung.

### Coulomb - Streuung.

Wir benutzen nun (143) - (146) zur Berechnung des Rutherford'schen Streuquerschnittes. Wir wollen  $\psi_i$

in (143) als einfallende Welle interpretieren. Dazu berechnen wir den einfallenden Teilchenstrom

$$\vec{J}_i = \frac{\hbar}{2mi} [\psi_i^* \vec{\nabla} \psi_i - \psi_i \vec{\nabla} \psi_i^*]. \quad (148)$$

Benutzen wir die asymptotische Formel (144), so finden wir

$$\vec{J}_i = (0, 0, J), \quad \text{wo}$$

$$J = \frac{\hbar k}{m} \left( 1 - \frac{ik}{r} + O\left(\frac{1}{|r-z|^2}\right) \right) \quad (149)$$

$$\rightarrow 0 \quad \text{für } |r-z| \rightarrow \infty,$$

$$\approx v$$

$$\text{d.h. e.g. } z \rightarrow -\infty.$$

Die Dichte des einfallenden Stromes ist  $|\psi_i|^2 = 1$ .

Für die Streuwelle  $\psi_s$  berechnen wir

$$\begin{aligned}\vec{J}_s(\vec{x}) &= \frac{\hbar}{2mi} [\psi_s^* \vec{\nabla} \psi_s - \psi_s \vec{\nabla} \psi_s^*](\vec{x}) \\ &= \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|} J_\theta,\end{aligned}$$

wo

$$J_\theta = \frac{\hbar k}{m} |f(\theta)|^2 \frac{1}{r^2} = v |f(\theta)|^2 / r^2, \quad (150)$$

und die Dichte ist  $|\psi_s(\vec{x})|^2 = |f(\theta)|^2 / r^2$ .

Definition des differentiellen Wirkungsquerschnitts.

$N_i = \#$  Teilchen pro Volumeneinheit im einfallenden Strahl

$J_i = N_i v$  (Stromdichte),  $v =$  Teilchengeschwindigkeit

$N_s = \#$  Teilchen, die pro Zeiteinheit in den Raumwinkel  $d\Omega$  um  $\Omega = (\theta, \varphi)$  gestreut werden

Offensichtlich ist  $N_s$  proportional zu  $J_i$ , d.h.

$$N_s = J_i \Sigma(\Omega) d\Omega. \quad (151)$$

Die Grösse  $\Sigma(\Omega)$  hat die Dimension einer Fläche, die für die Streuung der einfallenden Teilchen an einem Target charakteristisch ist. Vernachlässigt man Mehrfachstreuung und Phasenkohärenz zwischen ver-

56.  
 verschiedenen Streuzentren, so ist  $\Sigma(\Omega)$  proportional  
 zur Zahl,  $N$ , der Streuzentren:

$$\Sigma(\Omega) = N \sigma(\Omega). \quad (152)$$

Man nennt  $\sigma(\Omega)$  den differentiellen Wirkungsquer-  
schnitt.

Wenden wir diese Überlegungen auf ein einziges  
 Coulomb-Streuzentrum an, so haben wir:

$$N_s = J_\theta \cdot r^2 d\Omega \quad (d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi).$$

$$= v |f(\theta)|^2 d\Omega$$

$$J_\theta = v, \quad N = 1.$$

Damit finden wir

$$\begin{aligned} \sigma(\Omega) &= |f(\theta)|^2 = \frac{\gamma^2}{4k^2 \sin^4 \theta/2} \\ &= \left( \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \theta/2}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{aligned} \quad (152)$$

Das ist die Rutherford'sche Streuformel. Die Grösse  
 $f(\theta)$  heisst Streuamplitude.

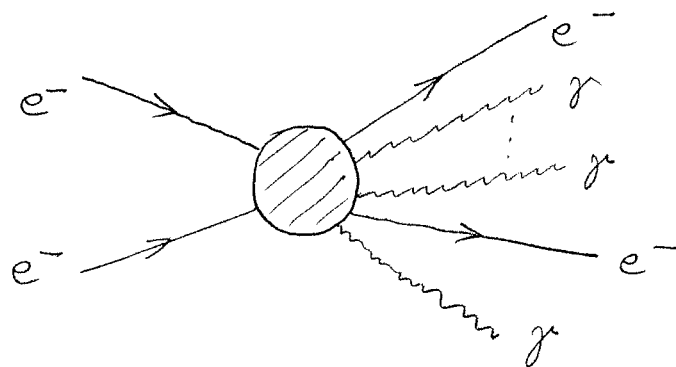
## 4. Potentialstreuung

Dieses Kapitel ist einer kurzen Einführung in die quantenmechanische Streutheorie, insb. in die Zweikörper - Potentialstreuung gewidmet, die das in Kap. 3 zur Coulomb - Streuung behandelte Material in einen allgemeineren Zusammenhang rückt.

In den meisten Experimenten der Kern- und Hochenergiephysik, aber auch in vielen Experimenten der Festkörperphysik werden Wechselwirkungen zwischen zwei anfänglich weit voneinander entfernten Systemen, einem Projektil und einem Target untersucht. Beobachtet wird ein Endzustand, in welchem die Produkte eines Stosses (d.h. von Ww.) zwischen Projektil und Target wieder weit voneinander entfernt sind, so dass man Wechselwirkungen zwischen ihnen nun wieder vernachlässigen kann.

# Beispiele

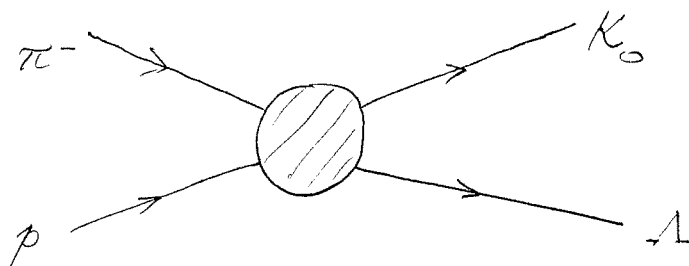
(1)



$$e^- + e^- \longrightarrow e^- + e^- + n\gamma$$

QM II; Einf.  
in die QFT

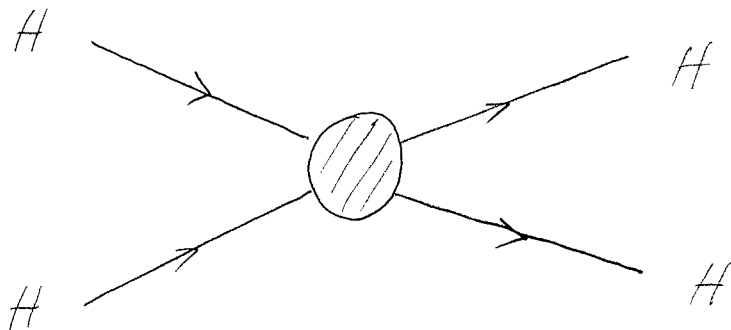
(2)



$$\pi^- + p \longrightarrow K^0 + \Lambda$$

Teilchenphysik

(3)



$$H + H \longrightarrow H + H$$

Diese Vorlesung

Wenn  $\psi_{in}$  der einlaufende Zustand des Gesamtsystems zu einer Zeit  $t \rightarrow -\infty$  ist, so sucht man den sich daraus entwickelnden Zustand  $\psi_{out}$  des Systems zu einer Zeit  $t \rightarrow +\infty$  zu bestimmen. Die Zuordnung  $\psi_{in} \rightarrow \psi_{out}$



wird durch eine lineare, unitäre Transformation gestiftet, die sich aus der sog. Streu matrix oder S-Matrix bestimmen lässt. Die Berechnung solcher Streumatrizen und der durch sie bestimmten Wirkungsquerschnitte für den Spezialfall elastischer Zweiteilchen - Potentialstreuung, wie in Beispiel (3), ist das Thema dieses Kapitels. In diesem Spezialfall ist die Streuthorie eng mit der Untersuchung des kontinuierlichen Spektrums von  $H_{rel}$  verbunden.

Beispiel (1) ist ein Beispiel eines inelastischen Streuprozesses zweier Elektronen, in dem Licht (Photonen) erzeugt wird. Solche Prozesse werden wir in der QM II und in einer Vorlesung "Einführung in die QFT" kennen lernen. Beispiel (2) gehört in eine Vorlesung über Teilchenphysik.

Inelastische Mehrkanalprozesse mit Teilchenzeugung und -vernichtung, wie in den Beispielen (1) und (2), sind bei

hohen Energien pro Teilchen, in der Gegenwart von Teilchen der Ruhemasse 0, wie dem Photon, und in der Festkörperphysik typisch. Gerade in der Festkörper- und in der Kernphysik sind "Mehrfachstreuung" des Projektils im Target, Phasenkohärenz und Vielteilchen effekte wichtig. Solche Komplikationen betrachten wir aber in diesem einführenden Kapitel nicht, das der elastischen Zweikörperpotentialstreuung gewidmet ist.

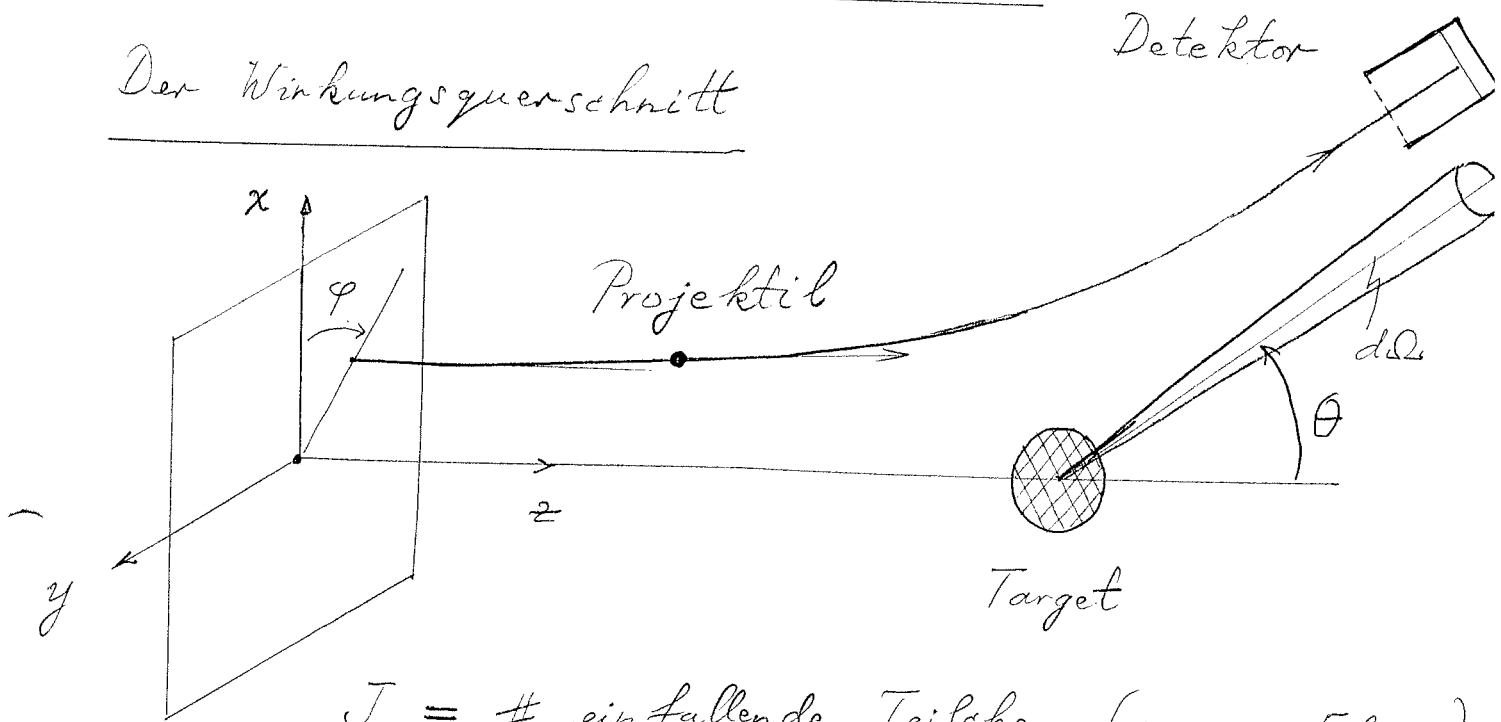
Da die Schwerpunktsbewegung frei ist, ist es sinnvoll, im Schwerpunktsystem zu arbeiten und dort die Relativbewegung zu behandeln.

### Experimentelle Anwendung von Streuprozessen:

- Strukturbestimmung eines Targets; z. B. elektromagnetischer Formfaktor eines Atomkerns (Target) aus Streuung von Elektronen (Projektile); oder Kristallstrukturbestimmung durch Streuung von Röntgenstrahlen, etc.

- Experimentelle Untersuchung noch unbekannter Wechselwirkungen; z. B. Kernkräfte aus Nukleon-Nukleon Streuung, neutrale Ströme aus Streuprozessen mit schwachen Wechselwirkungen, ...
- Produktion und Untersuchung neuer Teilchen; z. B. "top quark", " $\tau$ -Lepton" (CERN, Fermi Lab);
- Higgs?, susy Partnerteilchen?

### Der Wirkungsquerschnitt



$J_i = \#$  einfallende Teilchen (in x-y Ebene)  
 pro Flächen- und Zeiteinheit  
 = einfallende Teilchenstromdichte

$dN_s = \#$  Teilchen, die vom Target pro Zeiteinheit in den Raumwinkel  $d\Omega$  gestreut werden.

$dN_s$  ist proportional zu  $J_i$  :

$$dN_s = J_i \sigma(\Omega) d\Omega, \quad (4.1)$$

wo  $\sigma(\Omega)$  der differentielle Wirkungsquerschnitt ist. In (4.1) wird angenommen, die Verteilung der einfallenden Teilchen in der  $x$ - $y$  Ebene sei uniform, und der Strahl sei so dünn, dass Wechselwirkungen zwischen einfallenden Teilchen vernachlässigt werden können. Der totale Wirkungsquerschnitt ist durch

$$\sigma = \int_{S^2} \sigma(\Omega) d\Omega \quad (4.2)$$

definiert. Man sieht sofort, dass  $\sigma(\Omega)$  und  $\sigma$  die Dimension einer Fläche haben — wie in der klassischen Mechanik und Elektrodynamik.

Ziel dieses Kapitels ist es, Methoden zu entwickeln, um  $\sigma(\Omega)$  für ein Projektil mit Hamiltonoperator

$$H_{\text{rel}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x) \quad (4.3)$$

( $m$ : reduzierte Masse,  $x$ : Relativkoordinate im Schwer-

punktsystem) zu bestimmen. Wir behandeln zuerst die  
Zeitunabhängige Streuthorie

Wir benützen nicht-relativistische Kinematik.

Der Impuls des einfallenden Projektils sei

$$\approx \vec{p} = \hbar \vec{k}, \text{ seine Energie also } \approx E = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m},$$

In Abwesenheit von Wechselwirkungen wird der

Zustand des Projektils durch eine ebene Welle

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = e^{ikz} \quad (\text{für das in der Figur gewählte}$$

Koordinatensystem) beschrieben. Eine durch eine

Potentialkraft beschriebene Wechselwirkung mit

einem Target erzeugt aus einem einlaufenden

Zustand,  $\sim e^{ikz}$ , eine auslaufende Streuwellen

nicht unähnlich einer Kugelwelle  $\frac{e^{ikr}}{r}$  ( $r \rightarrow \infty$ ),

(Huyghensches Prinzip). Um die Streuwelle genauer

zu bestimmen, suchen wir Lösungen der

zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})\right)\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}\psi_{\vec{k}}(\vec{x}), \quad (4.4)$$

die sich bei grossen Abständen vom Streuzentrum wie

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) \underset{|\vec{r}-\vec{z}|\rightarrow\infty}{\sim} e^{i\vec{k}\vec{z}} + f(\vec{k}',\vec{k}) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (4.5)$$

verhält, wo  $\vec{k}' = k \frac{\vec{x}}{r}$ ,  $\vec{k} = k \vec{e}_z$ ,  $k = |\vec{k}|$

Wie im Abschnitt über Coulomb-Streuung findet man aus (4.1) und (4.5) etwas heuristisch, dass

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \equiv \sigma(\Omega) = \left| f(\vec{k}',\vec{k}) \right|_{\vec{k}' \in d\Omega}^2 \quad (4.6)$$

In sphärischen Polarkoordinaten (wie in der Figur angedeutet) entspricht  $\vec{k}$  dem Winkel  $\theta=0$  und  $\vec{k}'$  den Winkeln  $\theta, \varphi$ ; man benützt dann auch die Notation  $f(\vec{k}',\vec{k}) = f_k(\theta, \varphi)$ . Für sphärisch-symmetrische Potentiale ist  $f_k(\theta, \varphi) = f_k(\theta)$  unabhängig von  $\varphi$ .

Um  $f(\vec{k}', \vec{k})$  zu bestimmen, verwandeln wir

Gl. (4.4) in eine Integralgleichung. Dazu verwenden

wir die Green Funktion  $G_k(\vec{x}', \vec{x})$  des Operators

$$-(\Delta + k^2),$$

$$-(\Delta + k^2) G_k(\vec{x}, \vec{x}') = \delta(\vec{x}' - \vec{x}) \quad (4.7)$$

die wir aus der Elektrodynamik (Helmholtzgleichung) kennen:

$$G_k(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{e^{ik|\vec{x} - \vec{x}'|}}{4\pi |\vec{x} - \vec{x}'|} \quad (4.8)$$

Nun kann (4.4) in die Gleichung

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \psi^{(0)}(\vec{x}) - \int G_k(\vec{x}, \vec{x}') \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{x}') \psi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3x' \quad (4.9)$$

wo  $\psi^{(0)}$  die Gleichung  $(\Delta + k^2) \psi^{(0)}(\vec{x}) = 0$

löst. Wegen (4.5) setzen wir  $\psi^{(0)}(\vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$ .

Mit dieser Wahl von  $\psi^{(0)}$  löst (4.9) die Schrödingergleichung (4.4) und erfüllt die "Randbedingung" (4.5), falls etwa  $V \in L^2(\mathbb{R}^3) \cap L^1(\mathbb{R}^3)$ .

Um die Randbedingung (4.5) zu kontrollieren, benütze man:

$$|\vec{x} - \vec{x}'| = r - \frac{1}{r} \vec{x} \cdot \vec{x}' + O\left(\frac{1}{r}\right),$$

$$\vec{k}' = k \frac{\vec{x}}{r}, \quad \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} = \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik\vec{x}' \cdot \vec{x}'} + O\left(\frac{1}{r}\right)$$

deshalb  $\psi_{\vec{k}} = \psi^{(0)} + \psi_S$ , mit

$$\psi_S \sim -\frac{e^{ikr}}{r} \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int e^{-ik\vec{x}' \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}') \psi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3x' + O\left(\frac{1}{r^2}\right).$$

Vergleich mit (4.5) gibt:

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int e^{-ik\vec{x}' \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}') \psi_{\vec{k}}(\vec{x}') d^3x' \quad (4.10)$$

Lösungstheorie zu Gl. (4.9).

Wir definieren den Banachraum,  $\mathcal{C}$ , der stetigen beschränkten Funktionen auf  $\mathbb{R}^3$  mit der Norm

$$\|\psi(\vec{x})\| := \sup_{\vec{x} \in \mathbb{R}^3} |\psi(\vec{x})| \quad (4.11)$$

Wir setzen  $\psi(\vec{x}) := \psi_{\vec{k}}(\vec{x})$ ,  $\psi^{(0)}(\vec{x}) = e^{ik\vec{x} \cdot \vec{x}'}$ ,

$U(\vec{x}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{x})$ . Dann lautet (4.9):



$$\psi = \psi^{(0)} - G_k U \psi, \quad (4.12)$$

eine inhomogene lineare Gleichung auf dem Banachraum  $\mathcal{C}$ . Offensichtlich ist  $\psi^{(0)} \in \mathcal{C}$ , und für  $\psi \in \mathcal{C}$  ist

$$\|G_k U \psi\| \leq \sup_{\vec{x}} \frac{1}{4\pi} \int \frac{|U(\vec{x}')|}{|\vec{x} - \vec{x}'|} d^3x' \|\psi\|.$$

Wir zeigen, dass

$$\begin{aligned} N(V) &:= \sup_{\vec{x}} \frac{1}{4\pi} \int \frac{|U(\vec{x}')|}{|\vec{x} - \vec{x}'|} d^3x' \\ &= \sup_{\vec{x}} \frac{1}{4\pi} \left( \int_{|\vec{x} - \vec{x}'| > \rho} + \int_{|\vec{x} - \vec{x}'| \leq \rho} \right) \frac{|U(\vec{x}')|}{|\vec{x} - \vec{x}'|} d^3x' \\ &\leq \frac{1}{4\pi\rho} \|U\|_1 + \sqrt{\frac{\rho}{4\pi}} \|U\|_2, \end{aligned} \quad (4.13)$$

(Schwarz Ungleichung!) Es folgt, dass für ein Potential  $V$  mit  $N(V) < 1$  die Gleichung (4.12) durch eine konvergente Störungsreihe gelöst werden kann:

$$\psi = \psi^{(0)} + G_k U \psi^{(0)} + (G_k U)^2 \psi^{(0)} + \dots \quad (4.14)$$

Diese Reihe konvergiert im Raum  $\mathcal{C}$ . Man nennt sie Bornsche Reihe. Für schwache Potentiale ( $N(V)$  klein) oder hohe Energien ( $k \rightarrow \infty$ ) genügt oft der erste nicht-triviale Term in (4.14).

$$\psi \simeq \psi^{(0)} + G_k U \psi^{(0)},$$

was auf

$$f_{\text{Born}}(\vec{k}', k) = - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{x}} V(\vec{x}) d^3x \quad (4.15)$$

führt.

Anwendung. Streuung eines Elektrons an einem neutralen Atom. Nehmen an, dass das einfallende Elektron eine so hohe Energie hat, dass die 1. Bornsche Näherung legitim ist.

Sei  $\rho(\vec{x})$  die Ladungsverteilung der Elektronen in der Atomhülle. Das Projektil (ein Elektron)

bewegt sich dann im äusseren Potential  $V(\vec{x})$ ,  
das durch die Poisson Gleichung bestimmt ist:

$$\Delta V(\vec{x}) = -e[eZ \delta(\vec{x}) + \rho(\vec{x})], \quad (4.16)$$

und Ladungsneutralität erfordert, dass

$$\int \rho(\vec{x}) d^3x = -eZ$$

Es folgt, dass

$$\hat{V}(\vec{k}) = -\frac{e}{k^2} [eZ + F(\vec{k})],$$

mit  $F(0) = -eZ$ ; ( $F$  ist der sog. Formfaktor  
der Hülle des Atoms). Es folgt, dass

$$f_{\text{Born}}(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \frac{e}{|\vec{k}|^2} [eZ + F(\vec{k})],$$

und damit

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &\simeq |f_{\text{Born}}(\vec{k}', \vec{k})|^2 \\ &= \frac{m^2 e^4}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{|Z + e^{-1} F(\vec{k}' - \vec{k})|^2}{|\vec{k}' - \vec{k}|^4} \end{aligned} \quad (4.17)$$

Ist  $|\vec{k}' - \vec{k}| \cdot a \gg 1$ , wo  $a$  die mittlere Ausdehnung von  $\rho$  ist, so ist  $|F(\vec{k}' - \vec{k})| \ll eZ$ , und (4.17) reproduziert in diesem Grenzbereich grosser Streuwinkel und hoher Energien (des Projektils) exakt die Rutherford'sche Formel.

Von nun an behandeln wir sphärisch-symmetrische Zweikörperpotentiale,  $\Phi = \Phi(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r)$ .

Dann lässt sich die zeitunabhängige Schrödingergleichung durch einen Separationsansatz mit Hilfe der Kugelfunktionen auf eine gewöhnliche Differentialgleichung reduzieren:

$$-u''(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} u(r) + \Phi(r) u(r) = \varepsilon u(r), \quad (4.18)$$

mit  $\varepsilon = k^2 > 0$ ,  $u(r) \in L^2([0, \infty), dr)$ . Der differentielle Wirkungsquerschnitt,  $\sigma(\Omega)$ , soll aus den Lösungen von (4.18) bestimmt werden.

## Partialwellenzersetzung.

Für ein freies Teilchen lautet die radiale Schrödingergleichung

$$-u''(\rho) + \frac{l(l+1)}{\rho^2} u(\rho) = u(\rho), \quad (4.19)$$

mit  $\rho = kr$ . Um die Lösungen zu finden, benutzen wir die Operatoren

$$R_l := \frac{d}{d\rho} - \frac{l}{\rho}. \quad (4.20)$$

Man findet, dass

$$\begin{aligned} R_l R_{-l} &= \frac{d^2}{d\rho^2} + \left[ \frac{d}{d\rho}, \frac{l}{\rho} \right] - \frac{l^2}{\rho^2} \\ &= \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} = R_{-(l+1)} R_{l+1}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Damit wird aus (4.19) die Gleichung

$$u = -R_l R_{-l} u = -R_{-(l+1)} R_{l+1} u,$$

woraus

$$R_{l+1} u = - (R_{l+1} R_{-(l+1)}) R_{l+1} u \quad (4.22)$$

folgt. Das bedeutet, dass, wenn  $u$  eine Lösung von (4.19) zu vorgegebenem  $l$  ist, dann ist  $R_{l+1} u$

eine Lösung von (4.19) zu  $l \mapsto l+1$ . Für  $l=0$  sind die Lösungen von (4.19) bekannt:

$$\begin{aligned} u(\rho) &:= j_0(\rho) = \sin \rho, \quad \text{und} \\ u(\rho) &:= n_0(\rho) = \cos \rho \end{aligned} \tag{4.23}$$

sind zwei linear unabhängige Lösungen von (4.19) mit  $l=0$ . Aus (4.23) und (4.22) erhält man nun zwei linear unabhängige Lösungen von (4.19) für beliebiges  $l$ ,  $j_l(\rho)$  und  $n_l(\rho)$ . Mit (4.20) findet man, dass sich  $j_l$  und  $n_l$  asymptotisch, für  $\rho \rightarrow \infty$ , wie

$$\begin{aligned} j_l(\rho) &= \sin\left(\rho - l\frac{\pi}{2}\right) + O(\rho^{-1}), \quad \text{und} \\ n_l(\rho) &= \cos\left(\rho - l\frac{\pi}{2}\right) + O(\rho^{-1}) \end{aligned} \tag{4.24}$$

verhalten. Für  $\rho \rightarrow 0$  ist  $j_l(\rho)$  regulär:

$$j_l(\rho) = \frac{1}{(2l+1)!!} \rho^{l+1} + O(\rho^{l+3}), \tag{4.25}$$

mit  $(2l+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l+1)$ . Der Beweis von (4.25) gelingt wie folgt:

$$R_l = \frac{d}{d\rho} - \frac{l}{\rho} = \rho^l \frac{d}{d\rho} \rho^{-l}, \quad \text{und damit}$$

$$\begin{aligned} j_l(\rho) &= (-1)^l R_l R_{l-1} \dots R_1 \sin \rho \\ &= (-1)^l \rho^{l+1} \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho} \end{aligned}$$

Setzen wir nun die Reihenentwicklung für  $\sin \rho$  ein, so folgt (4.25)!

Die Lösung  $n_l(\rho)$  ist bei  $\rho \rightarrow 0$  singulär,  $\propto \rho^{-l}$

Nun untersuchen wir die Partialwellenzersetzung einer ebenen Welle:

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = e^{ikr \cos \vartheta} = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} u_l(kr) P_l(\cos \vartheta),$$

wo  $\vartheta$  der Winkel zwischen  $\vec{k}$  ( $\parallel z$ -Achse) (4.26)

und  $\vec{x}$  ist, und  $P_l(\cos \vartheta)$  eine vom Winkel  $\vartheta$  unabhängige Kugelfunktion zum Index  $l$  ist,

wovon es bis auf Normierung nur eine gibt. Wenn

man  $P_l(1) = 1$  setzt, so ist  $P_l(z)$  ein Legendre

Polynom vom Grad  $l$ :

$$P_l(z) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dz^l} (z^2 - 1)^l \quad (4.27)$$

Über Legendre Polynome findet man mehr in Anhang

Da die ebene Welle für  $\rho = kr \rightarrow 0$  regulär ist, muss  $u_l$  eine reguläre Lösung von (4.19) sein, d.h.

$$u_l(kr) = c_l j_l(kr), \quad c_l \in \mathbb{C}.$$

Die Koeffizienten  $c_l$  bestimmen wir aus der Asymptotik bei  $r = 0$ :

$$\begin{aligned} \left( \frac{d}{d \cos \vartheta} \right)^l e^{i k r \cos \vartheta} &= (i k r)^l + O(r^{l+1}) \\ &= \frac{1}{k r} \sum_{m=l}^{\infty} c_m j_m(kr) \left( \frac{d}{d \cos \vartheta} \right)^l P_m(\cos \vartheta), \end{aligned}$$

da  $P_m(\cos \vartheta)$  ein Polynom vom Grad  $m$  in  $\cos \vartheta$  ist.

Aus (4.25) und (4.27) folgt dann

$$\begin{aligned} (i k r)^l &= c_l \frac{(k r)^l}{(2l+1)!!} \frac{1}{2^l l!} \frac{d^{2l}}{dz^{2l}} z^{2l} \\ &= c_l \frac{(k r)^l}{2l+1}; \end{aligned}$$

also

$$c_l = i^l (2l+1), \quad \text{und somit}$$



$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \vartheta). \quad (4.28)$$

Streuphasen für Streuung im sphärisch-symmetrisch Potential.

Es sei  $u_l(k, r)$  eine reguläre Lösung der radialen Wellengleichung (4.18). Nehmen wir für den Moment an, es sei  $\Phi(r) = 0$ , für  $r > R$  ( $R < \infty$ )! Für  $r > R$  ist dann  $u_l(k, r)$  auch eine Lösung von (4.19), d.h.

$$u_l(k, r) = \cos \delta_l \cdot j_l(kr) + \sin \delta_l \cdot n_l(kr), \quad (4.29)$$

vorausgesetzt man wählt  $u_l$  reell und normiert

$u_l$  geeignet; dabei ist  $\delta_l$  die asymptotische

Phasenverschiebung der regulären Lösung  $u_l(k, r)$

relativ zur freien regulären Lösung  $j_l(kr)$ ;

( $\delta_l$  ist definiert modulo  $\pi$ ). Denn aus (4.29) und

(4.24) folgt, dass für  $r \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} u_l(k, r) &\simeq \sin\left(kr - l \frac{\pi}{2} + \delta_l\right) + O(r^{-1}) \\ &\simeq j_l(kr + \delta_l) + O(r^{-1}) \end{aligned} \quad (4.30)$$

Aus Gl. (4.29) und ihrer Ableitung nach  $r$  findet man für  $r = R$ :

$$\tan \delta_l(k) = - \frac{\alpha_l(k) j_l(kR) - j_l'(kR)}{\alpha_l(k) n_l(kR) - n_l'(kR)}, \quad (4.31)$$

wo

$$\alpha_l(k) = \frac{1}{k} \frac{u_l'(k, R)}{u_l(k, R)}, \quad (4.32)$$

mit  $f' \equiv \frac{df}{dr}$ . (Wir sagen anschliessend mehr zur Bestimmung der Streuphasen  $\delta_l(k)$ .)

Nun entwickeln wir die Streulösung,  $\psi_{\vec{k}}(\vec{x})$ , der zeitunabhängigen Schrödingergleichung (4.4) nach Kugelfunktionen (Partialwellenzersetzung), genauso wie wir dies für die ebene Welle (d.h. für eine Lösung von (4.4) mit  $V=0$ ) getan haben:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) u_l(k, r) P_l(\cos \vartheta), \quad (4.33)$$

wo die Funktion  $u_l(k, r)$  die reguläre Lösung der radialen Schrödingergleichung ist. Die Funk-

tionen  $u_l(k, r)$  werden so normiert, dass  $\psi_{\vec{k}}(\vec{x})$  und die ebene Welle  $e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$  asymptotisch, für  $r \rightarrow \infty$ , die gleiche einlaufende Welle,  $\propto e^{-ikr}$ , beschreiben, siehe (4.5); (aber natürlich i.a. verschiedene auslaufende Wellen,  $\propto e^{ikr}$ ). Für  $r \rightarrow \infty$  folgt daher mit (4.24), (4.28) und (4.33), dass

$$\begin{aligned} u_l(k, r) &\stackrel{!}{\simeq} e^{i\delta_l(k)} \sin\left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k)\right) + O(r^{-1}), \\ &= \frac{1}{2i} \left( e^{i(kr - l\frac{\pi}{2} + 2\delta_l(k))} - e^{-i(kr - l\frac{\pi}{2})} \right) + O(r^{-1}). \end{aligned} \quad (4.35)$$

gewählt werden muss; denn diese Ausdrücke unterscheiden sich nur im auslaufenden Teil von den entsprechenden Ausdrücken für  $j_l(kr)$ . Setzen

wir

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} + \psi_s(\vec{k}, \vec{x}), \quad (4.36)$$

wie in (4.5), wo  $\psi_s \propto \frac{e^{ikr}}{r}$ , so finden wir nun mit (4.35), (4.33), (4.28) und (4.24), dass

$$\psi_s(\vec{k}, \vec{x}) = \psi_k(\vec{x}) - e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$$

$$= \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{k} \frac{1}{2i} (e^{2i\delta_l(k)} - 1) P_l(\cos\vartheta) + O(r^{-2}) \quad (4.37)$$

Durch Vergleich mit (4.5) finden wir für die  
Streuamplitude

$$f(\vec{k}', \vec{k}) \equiv f(k, \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos \vartheta). \quad (4.38)$$

Die rechte Seite heisst Rayleigh - Faxén - Holzmark Reihe. Die Zahlen  $\{\delta_l(k)\}_{l=0,1,2,\dots}$  heissen Streu-  
phasen. Sie bestimmen offenbar die Streuwelle voll-  
ständig.

Benützen wir, dass

$$\int_{-1}^1 dz P_l(z) P_{l'}(z) = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (P_l(1) = 1!),$$

so finden wir aus (4.6), d.h.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \equiv \sigma(\Omega) = |f(k, \vartheta)|^2, \quad (4.39)$$

und (4.2), d.h.

$$\sigma = \int_{S^2} \sigma(\Omega) d\Omega, \quad (4.40)$$

(differentieller und totaler Wirkungsquerschnitt)

$$\begin{aligned}\sigma &\equiv \sigma(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \\ &= \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(k, \vartheta=0).\end{aligned}\quad (4.41)$$

Die zweite Gleichung in (4.41) ist unter dem Namen optisches Theorem bekannt.

Mit (4.38), (4.39) und (4.41) ist das Streuproblem auf die Berechnung der Streuphasen  $\{\delta_l(k)\}$  reduziert. Eine Formel dafür ist in (4.31) angegeben. Wir wollen nun aber noch etwas mehr dazu lernen.

(1) Wir betrachten zwei Systeme mit sphärisch-symmetrischen Zweikörperpotentialen  $V^{(1)}$  und  $V^{(2)}$ .

Die reduzierten Massen seien identisch, d.h.

$m^{(1)} = m^{(2)} \equiv m$ . Die radialen Schrödingergleichungen sind (siehe (4.18)):

$$u^{(j)''} + \left[ \frac{l(l+1)}{r^2} + \Phi^{(j)}(r) - k^2 \right] u^{(j)} = 0, \quad (4.42)$$

$j = 1, 2$ ; und wir interessieren uns nur für die re-

gulären Lösungen. Daher gilt, dass  $u_l^{(j)}(r=0)=0$ ,

$\forall l, j=1,2$ . Nun betrachten wir die Größe

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dr} \left( u_l^{(1)} \frac{d}{dr} u_l^{(2)} - \left( \frac{d}{dr} u_l^{(1)} \right) u_l^{(2)} \right) \\ &= u_l^{(1)} u_l^{(2)''} - u_l^{(1)''} u_l^{(2)} \\ & \stackrel{(4.42)}{=} [\Phi^{(2)} - \Phi^{(1)}] u_l^{(1)} u_l^{(2)}. \end{aligned}$$

Integrieren wir diese Gleichung und benützen, dass  $u_l^{(j)}(0)=0$  ( $u_l^{(j)}(k,r) \equiv u_l^{(j)}(r)$ ), so folgt, dass

$$\begin{aligned} & u_l^{(1)}(r) u_l^{(2)'}(r) - u_l^{(1)'}(r) u_l^{(2)}(r) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^r dr' [V^{(2)}(r') - V^{(1)}(r')] u_l^{(1)}(r') u_l^{(2)}(r') \end{aligned}$$

Nun lassen wir  $r$  gegen  $\infty$  streben und benützen auf der linken Seite die asymptotische Formel (4.30) und diejenige für  $u_l^{(j)'}(r)$ . Dann finden wir, dass

$$k \sin(\delta_l^{(1)}(k) - \delta_l^{(2)}(k)) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr [V^{(2)}(r) - V^{(1)}(r)] u_l^{(1)}(r) u_l^{(2)}(r) \quad (4.43)$$

Diese Formel drückt die Variation der Streuphasen durch die Variation des Potentials aus.

Als Spezialfall von (4.43) finden wir für  $V^{(1)} \equiv 1$ ,  $V^{(2)} = 0$ , und mit  $u_l^{(2)}(r) = j_l(kr)$ , die Formel

$$\sin \delta_l(k) = - \frac{2m}{k\hbar^2} \int_0^\infty dr V(r) u_l(k, r) j_l(kr) \quad (4.44)$$

Diese Formel ist Ausgangspunkt für die Herleitung der Bornschen Reihe für die Streuphasen.

Wir berechnen den ersten Term dieser Reihe für das Yukawa Potential,  $V(r) = g \frac{e^{-(r/\lambda)}}{r}$ , das in der Kernphysik eine gewisse Rolle spielt; Wir setzen

$u_l(k, r) \simeq j_l(kr)$ , und erhalten

$$\begin{aligned} \sin \delta_l(k) &\simeq - \frac{2mg}{k\hbar^2} \int_0^\infty dr e^{-(r/\lambda)} r^{-1} j_l(kr)^2 \\ &= - \frac{mg}{k\hbar^2} Q_l \left( 1 + \frac{1}{2(k\lambda)^2} \right), \end{aligned} \quad (4.45)$$

wo  $Q_l$  die Legendrefunktion zweiter Art zum Index  $l$  ist. Was uns hier einzig interessiert, ist

das Verhalten von  $\sin \delta_l(k)$  für  $l \rightarrow \infty$  und für  $k \rightarrow \infty, k \rightarrow 0$ :

$$\frac{1}{k} Q_l \left( 1 + \frac{1}{2 \left( k \frac{R}{\xi} \right)^2} \right) \longrightarrow 0, \quad l \rightarrow \infty, k \rightarrow 0, \infty.$$

Analytizitätseigenschaften von  $S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}$ ,

gebundene Zustände und Resonanzen.

Wir kehren zu den Formeln (4.31) und (4.32) zurück:

$$\tan \delta_l = - \frac{\alpha_l j_l(kR) - j'_l(kR)}{\alpha_l n_l(kR) - n'_l(kR)},$$

mit

$$\alpha_l(k) = \frac{1}{k} \frac{u'_l(k, R)}{u_l(k, R)},$$

(4.45)

für ein kurzreichweitiges Potential  $V(r)$  mit  $V(r) = 0$ , für  $r \geq R$ . Ausserdem haben wir, dass

$$f(k, \vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{k} e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos \vartheta), \quad (4.47)$$

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l, \quad \sigma_l := \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k),$$



17

siehe (4.38), (4.41). Mit  $s_\ell(k) := e^{2i\delta_\ell(k)}$  haben wir, dass

$$s_\ell - 1 = \frac{2i}{\cot \delta_\ell - i}, \quad (4.48)$$

und damit:

- $\cot \delta_\ell = 0 \iff s_\ell = -1$ ,  $\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1)$  ist maximal;
- $s_\ell$  hat einen Pol bei  $\cot \delta_\ell = i$ .

Behauptung. Gebundene Zustände entsprechen

Polen von  $s_\ell$ . Denn für einen gebundenen Zustand gilt, dass

$$(4.24) \quad u_\ell(r) \sim j_\ell(ixr) - in_\ell(ixr) \sim e^{-\kappa r}, \quad \kappa > 0,$$

mit der Bindungsenergie  $E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$ .

Benützen wir nun (4.46) mit der Stetigkeitsbedingung  $u_\ell(r=R) = j_\ell(ixR) - in_\ell(ixR)$ , und entsprechend für die erste Ableitung, so folgt aus (4.46), dass  $\tan \delta_\ell = -i$ , d.h.  $\cot \delta_\ell = i$ , und  $s_\ell$  hat einen Pol bei  $k = ix$ . (Die Streu-

phase  $\delta_\ell$  hat allerdings auch Pole, die nicht gebundenen Zuständen entsprechen.)

$k$ -Vektoren, für die  $\cot \delta_\ell(k) = 0$  (oder  $\tan \delta_\ell = \infty$ ) entsprechen sog. Resonanzen. Wir

setzen  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ ,  $E > 0$ , und nehmen an,

dass  $\cot \delta_\ell(E = E_r) = 0$ , ( $E_r$ : Resonanzenergie).

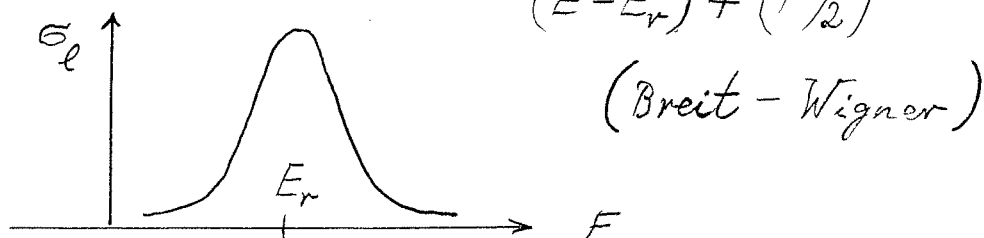
Taylorentwicklung um den Punkt  $E = E_r$  gibt:

$$\begin{aligned} \cot \delta_\ell(E) &\approx \cot \delta_\ell(E_r) - \frac{1}{\sin^2 \delta_\ell(E_r)} \frac{d\delta_\ell}{dE}(E_r) (E - E_r) \\ &= - \frac{d\delta_\ell}{dE}(E_r) (E - E_r) =: - \frac{2}{\Gamma} (E - E_r), \end{aligned}$$

mit  $\Gamma = \Gamma(E_r) = 2 \left( \frac{d\delta_\ell}{dE}(E_r) \right)^{-1}$ .

Setzen wir diese Entwicklung in Formel (4.47), für  $\sigma_\ell$  ein und benützen, dass  $\sin^2 \delta_\ell = \frac{1}{1 + \cot^2 \delta_\ell}$  so folgt, dass

$$\sigma_\ell(E) \approx \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (4.49)$$



Für  $s_l$  finden wir:

173

$$s_l(E) - 1 \simeq \frac{-i\Gamma}{E - E_r + i(\Gamma/2)} \quad (4.50)$$

d.h.  $s_l(E)$  hat einen Pol bei  $E = E_r - i(\Gamma/2)$

(auf dem "unphysikalischen Blatt" der Riemannfläche für die Funktion  $\sqrt{E}$ ). Die Streu-

phase  $\delta_l(E)$  nimmt in einer Umgebung von  $E = E_r$  um den Betrag  $\pi$  zu, und die Breite

$\Gamma$ , der Resonanz ist umso geringer, je grösser

die Ableitung  $\frac{d\delta_l}{dE}$  für  $E$  in der Nähe von  $E_r$

Die Streulänge. Wir untersuchen nun das

Verhalten bei kleinen (positiven) Energien,

$$kR \ll 1. \quad (4.51)$$

Für  $kR \ll 1$  ist

$$j_l(kR) \simeq \frac{(kR)^{l+1}}{(2l+1)!!} \quad (\text{siehe (4.25)}), \text{ und}$$

$$n_l(kR) \simeq \frac{(2l-1)!!}{(kR)^l}$$

Aus (4.46) folgt dann, dass

$$\tan \delta_l \simeq \frac{(kR)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \frac{l - R\alpha_l}{l+1 + R\alpha_l} \quad (4.52)$$

Für  $l=0$  folgt:

$$\frac{1}{k} \tan \delta_0 \simeq - \frac{R^2 \alpha_0}{1 + R\alpha_0} =: -a, \quad (4.53)$$

mit  $\alpha_0 \equiv \alpha_0(E) \simeq \alpha_0(0)$ . Die Grösse  $a$  heisst Streulänge. Für  $\alpha_0 R \gg 1$  ist  $a \simeq R$ .

Für den Wirkungsquerschnitt finden wir dann

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \frac{1}{1 + \cot^2 \delta_0} \simeq \frac{4\pi}{k^2 + 1/a^2} \quad (4.54)$$

Für  $l > 0$  finden wir aus (4.47) und (4.51),

dass

$$\sigma_l \propto \frac{\sin^2 \delta_l}{k^2} \propto \frac{\tan^2 \delta_l}{k^2} \stackrel{(4.52)}{\propto} (kR)^{4l} \left( \frac{R^2}{k^2} \right)$$

was für kleine Werte von  $kR$  rasch gegen 0 strebt. Das bedeutet, dass die Potentialstreuung bei tiefen Energien durch die s-Wellenstreuung dominiert wird, d. h.  $\sigma$  durch  $\sigma_0$ .

Für  $E \rightarrow 0$  folgt:

$$\sigma(E=0) = \sigma_0(E=0) \stackrel{(4.53)}{=} 4\pi a^2 \quad (4.55)$$

Diese Formeln werden wir in den Übungen etwas eingehender untersuchen; (Streuung für harte Kugeln).

Mit (4.53) lässt sich die Streuphase  $s_0$

wie folgt schreiben:

$$s_0 - 1 \stackrel{(4.48)}{=} \frac{2i}{\cot s_0 - i} \stackrel{(4.53)}{\simeq} \frac{2ka}{i - ka}$$

Für  $k = i\kappa$ ,  $\kappa = \frac{\sqrt{-2mE_b}}{\hbar}$ , wo  $E_b \lesssim 0$

die Energie eines gebundenen Zustandes mit

Bahndrehimpuls  $l=0$  ist, muss  $s_0$  einen Pol

haben, d.h.  $i\kappa a = i$ , oder

$$E_b \simeq - \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (4.56)$$

Das heisst, dass die Streulänge umso grösser ist, je kleiner die Bindungsenergie eines gebundenen s-Wellen-Zustandes ( $l=0$ ).

Eine mathematisch präzise Darstellung der hier skizzierten Resultate findet man etwa in:

Roger G. Newton, J. Math. Phys. 1, 319 (1960).

Die Originalarbeiten dazu verdankt man weitgehend Res Jost; (siehe z. B. R. Jost, Helv. Phys. Acta 20, 256 (1947)). Sie bestechen durch ihre mathematische Eleganz.

Bemerkung. Sei  $H_{\text{rel}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(|x|)$

der Hamilton Operator für die Relativbewegung eines sphärisch-symmetrischen Zweikörpersystems,

mit  $V(|x|) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0$ ,  $V \in L^2(\mathbb{R}^3) \cap L^1(\mathbb{R}^3)$ .

Es seien  $\{\psi_{nl}(\vec{x})\}$  ( $n$  = Hauptquantenzahl,  $l$  = Relativdrehimpuls) die Eigenfunktionen von  $H_{\text{rel}}$  zu Eigenwerten  $E_{nl} < 0$ ; (siehe (3.20), (3.31)). Ausserdem bezeichne

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} + \psi_s(\vec{k}, \vec{x})$$

die Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung (4.4), wobei  $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$  ein beliebiger Wellenvektor ist.

Man kann zeigen, dass die Funktionen

$$\{\psi_{nl}, \psi_{\vec{k}} \mid n = 0, 1, 2, \dots, l = 0, 1, 2, \dots, \vec{k} \in \mathbb{R}^3\}$$

vollständig in  $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$  sind; d. h. für jede Wellenfunktion  $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$  gibt es komplexe Zahlen  $\{c_{nl}\}$  und eine quadratintegrierbare Funktion  $f(\vec{k})$  auf  $\mathbb{R}^3$  so, dass

$$\psi(\vec{x}) = \sum_n \sum_l c_{nl} \psi_{nl}(\vec{x}) + \int d^3k f(\vec{k}) \psi_{\vec{k}}(\vec{x}) \quad (4.57)$$

Eine Wellenfunktion  $\psi$  ist ein gebundener Zustand, falls  $f(\vec{k}) \equiv 0$ ; dagegen ist  $\psi$  ein Streuzustand, falls  $c_{nl} = 0, \forall n, l$ . Zu diesen Begriffen findet man etwas mehr im Anhang C. In den Übungen werden wir die zeitliche Entwicklung von Streuzuständen etwas genauer studieren.

## 5. Die formale Struktur der Quantenmechanik

In diesem Kapitel soll aus dem bis anhin Gelernten die allgemeine formale Struktur der Quantenmechanik abstrahiert werden; so wie sie von Weyl, von Neumann, Wigner, u.a. (etwa Gleason; Einstein, Podolsky und Rosen; Bell; ...) formuliert worden ist. Insbesondere soll der Zustandsbegriff präzisiert werden, die allgemeinen Unschärferelationen werden hergeleitet, und der Begriff der Symmetrie soll geklärt werden.

### 5.1. Kinematische Struktur der Quantenmechanik

Es bezeichne  $\Sigma$  ein physikalisches System mit endlich vielen Freiheitsgraden, das quantenmechanisch beschrieben werden soll. Falls nützlich, wollen wir annehmen, die quantenmechanische Beschreibung gehe durch Quantisierung aus einer klassisch-



mechanischen hervor, die wir uns als Hamiltonsch vorstellen wollen.

Klassisch wird die Kinematik von  $\Sigma$  durch einen Phasenraum  $T$  beschrieben. Die Eigenschaften von  $T$  lassen sich vollständig in die Algebra  $C_0^\infty(T)$  aller glatten, reellen Funktionen auf  $T$  von kompaktem Träger kodieren. Elemente von  $C_0^\infty(T)$  interpretiert man als "beobachtbare Größen" oder "Observablen". Die Zustände von  $\Sigma$  fasst man als Zustände auf der Algebra  $C_0^\infty(T)$  auf, d.h. sie sind Wahrscheinlichkeitsmasse auf  $T$ . Die Dynamik von  $\Sigma$  wird durch eine Hamilton Funktion auf  $T$  (einmal stetig differenzierbar, i.a. unbeschränkt) über die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen bestimmt.

Quantenmechanisch fehlt das Analogon von  $T$ .

Quantenmechanisch entspricht der Algebra  $C_0^\infty(T) \otimes \mathbb{C}$  komplexwertiger, glatter Funktionen auf  $T$  von kompaktem Träger eine gewisse  $*$ -Algebra,  $A_T$ , kompakter Operatoren. Aus der Algebra  $C_0^\infty(T)$  lässt sich der Phasenraum  $T$  rekonstruieren. Es gibt viele von einander verschiedene endlich-dimensionale Phasenräume, die weder zueinander symplektomorph, noch diffeomorph oder auch nur zueinander homöomorph sind. Inwiefern es eine natürliche Definition von  $A_T$  gibt, und welche Eigenschaften von  $T$  sich aus  $A_T$  rekonstruieren lassen ist nicht klar. So lange das System  $\Sigma$  nur endlich viele Freiheitsgrade hat und  $T$  einfach zusammenhängend ist, kann man davon ausgehen, dass  $A_T$  nur eine physikalisch relevante Darstellung auf einem separablen Hilbert-

raum  $\mathcal{H}$  hat; und ausserdem ist die Darstellung von  $A_T$  auf  $\mathcal{H}$  dicht in der Algebra,  $B(\mathcal{H})$ , aller beschränkten Operatoren auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  in der schwachen Topologie:

$\{A_i\}_{i \in I}$  konvergiert schwach gegen einen Operator

$A$  auf  $\mathcal{H}$ , falls  $\langle \psi, A_i \varphi \rangle \longrightarrow \langle \psi, A \varphi \rangle$ ,

für alle  $\psi, \varphi \in \mathcal{H}$ . Für  $T = \mathbb{R}^{2f}$  folgen

diese Behauptungen aus dem von Neumannschen Eindeutigkeitssatz für Darstellungen der Weyl Relationen.

Geht man von diesen Behauptungen aus, so sind offenbar alle quantenmechanischen Systeme mit endlich vielen Freiheitsgraden, deren Hilberträume die gleiche Dimension haben, kinematisch identisch. In dieser Bezie-

hung ist die Quantenmechanik viel einfacher als die klassische Mechanik.

Für quantenmechanische Systeme mit unendlich vielen Freiheitsgraden liegen die Verhältnisse allerdings komplizierter, ( $\rightarrow$  QM II, QFT)!

Sei  $\Sigma$  ein quantenmechanisches System mit Hilbertraum  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\Sigma}$ .

Zustandsbegriff. "Reine Zustände" von  $\Sigma$  sind Einheitsstrahlen von  $\mathcal{H}_{\Sigma}$ , d.h. Äquivalenzklassen

$$[\psi] = \{ e^{i\alpha} \psi \mid \psi \in \mathcal{H}_{\Sigma}, \|\psi\| = 1, \alpha \in \mathbb{R} \} \quad (5.1)$$

Ein Einheitsstrahl  $[\psi]$  wie in (5.1) definiert einen Zustand  $\omega_{[\psi]}(\cdot)$  auf der Algebra  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  aller beschränkten Operatoren auf  $\mathcal{H}$ :

$$\omega_{[\psi]}(A) = \langle \psi, A \psi \rangle, \quad A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}). \quad (5.2)$$

Man nennt  $\omega_{[\psi]}(A)$  den Erwartungswert von

$A$  im Zustand  $\omega_{[\psi]}$ .

"(Gemischte) Zustände" sind allgemeine, schwach  
stetige Zustände auf  $B(\mathcal{H})$ , d.h. lineare Funk-  
tionale  $\omega: B(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{C}$  mit den Eigenschaften  
dass (i)  $\omega(A) \geq 0$ , falls  $A = A^* \geq 0$ ;  
(ii)  $\omega(1) = 1$ ;

(iii) falls  $A_i \xrightarrow{w} A$  (d.h.  $\{A_i\}_{i \in I}$   
konvergiert schwach gegen  $A$ ), dann

$$\lim_{i \in I} \omega(A_i) = \omega(A).$$

Offensichtlich sind konvexe Kombinationen,

$$\sum_j \lambda_j \omega_{[\psi_j]}(\cdot), \quad \lambda_j > 0, \quad \sum_j \lambda_j = 1, \quad (5.3)$$

reiner Zustände,  $\omega_{[\psi_j]}$ , Zustände auf  $B(\mathcal{H})$ .

Umgekehrt kann jeder Zustand  $\omega$  auf  $B(\mathcal{H})$   
mit den Eigenschaften (i), (ii) und (iii) als  
konvexe Kombination reiner Zustände aufge-

fasst werden: Gegeben  $\omega$ , gibt es ein VONS

$\{\varphi_j\}_{j=0}^{\infty}$  in  $\mathcal{H}$  und Zahlen  $p_0 \geq p_1 \geq p_2 \geq \dots \geq 0$

mit  $\sum_{j=0}^{\infty} p_j = 1$  so, dass

$$\omega(A) = \sum_{j=0}^{\infty} p_j \omega_{[\varphi_j]}(A) = \sum_{j=0}^{\infty} p_j \langle \varphi_j, A \varphi_j \rangle. \quad (5.4)$$

Sei  $P_j$  der orthogonale Projektor auf  $\varphi_j$ .

Wir definieren den Operator

$$\Omega = \sum_{j=0}^{\infty} p_j P_j. \quad (5.5)$$

Offensichtlich ist  $\Omega$  ein positiver, beschränkter

Operator, und

$$\text{Sp}(\Omega) := \sum_{j=0}^{\infty} \langle \varphi_j, \Omega \varphi_j \rangle < \infty$$

wo  $\{\varphi_j\}_{j=0}^{\infty}$  ein beliebiges VONS in  $\mathcal{H}$  ist;

nämlich

$$\begin{aligned} \text{Sp}(\Omega) &= \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} p_k \langle \varphi_j, P_k \varphi_j \rangle \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} p_k |\langle \varphi_j, \varphi_k \rangle|^2 \end{aligned}$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} p_k \left( \sum_{j=0}^{\infty} |\langle \psi_j, \varphi_k \rangle|^2 \right)$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} p_k \|\varphi_k\|^2 = \sum_{k=0}^{\infty} p_k = 1.$$

Man verifiziert nun leicht, dass

$$\text{Sp}(\Omega A) = \omega(A), \quad A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}). \quad (5.6)$$

Ein beschränkter Operator  $A$  gehört zur

"Schattenklasse"  $\mathcal{T}_p$ ,  $1 \leq p < \infty$ , falls die Spur von  $|A|^p$  endlich ist, wo  $|A| := \sqrt{A^*A}$ . Man nennt

$\mathcal{T}_1$  Spurklasse. Für  $A \in \mathcal{T}_1$  ist

$$\text{Sp}(A) := \sum_{j=0}^{\infty} \langle \psi_j, A \psi_j \rangle \quad (5.7)$$

endlich und unabhängig von der Wahl des VONS

$\{\psi_j\}_{j=0}^{\infty}$ . Die Operatoren in  $\mathcal{T}_2$  heißen Hilbert-Schmidt

Operatoren. Der Raum  $\mathcal{T}_2$  ist ein Hilbertraum mit

Skalarprodukt

$$\langle A, B \rangle := \text{Sp}(A^*B) \quad (5.8)$$

Offensichtlich gilt, dass

$$\mathcal{T}_1 \subset \mathcal{T}_p \subset \mathcal{T}_{\infty} := \mathcal{B}(\mathcal{H}), \quad 1 < p < \infty. \quad (5.9)$$

Definieren wir

$$\|A\|_p := \left( \text{Sp}(|A|^p) \right)^{1/p}, \quad A \in \mathcal{T}_p, \quad (5.10)$$

so gilt die Hölderungleichung:

$$\|A \cdot B\|_p \leq \|A\|_q \cdot \|B\|_r, \quad \frac{1}{p} = \frac{1}{q} + \frac{1}{r}. \quad (5.11)$$

Die Schwarzsche Ungleichung,

$$\begin{aligned} |\langle A, B \rangle| &\leq \|A \cdot B\|_1 \leq \|A\|_2 \|B\|_2 \\ &= \sqrt{\langle A, A \rangle} \sqrt{\langle B, B \rangle}, \quad A, B \in \mathcal{I}_2, \quad (5.12) \end{aligned}$$

ist ein Spezialfall der Hölderungleichung.

Die Schattenklassen  $\mathcal{I}_p$  sind zweiseitige

Ideale in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ : Wenn  $A \in \mathcal{I}_p$  und  $B, C$

zwei beliebige, beschränkte Operatoren sind, dann

ist auch  $BAC \in \mathcal{I}_p$ ; denn wegen (5.10) ist

$$\|BAC\|_p \leq \|B\|_\infty \|A\|_p \|C\|_\infty < \infty,$$

wo  $\|B\|_\infty = \|B\|$  die Operatornorm von  $B$  ist.

Sei nun  $P = P^* \geq 0$  ein Operator in der Spektralklasse  $\mathcal{I}_1$ , mit  $\text{Sp}(P) = 1$ . Da  $P$  selbst-



adjungiert ist, kann man auf  $P$  das Spektraltheorem anwenden, d.h.  $P$  kann diagonalisiert werden. Da  $P$  in der Spurklasse ist, ist das Spektrum von  $P$  rein diskret; wir nennen die Eigenwerte  $\rho_j \geq 0$ . Sei  $P_j$  der spektrale Projektor zum Eigenwert  $\rho_j$ . Das Spektraltheorem sagt, dass

$$P = \sum_{j=0}^{\infty} \rho_j P_j. \quad (5.13)$$

Außerdem gilt nach Annahme, dass

$$\text{Sp } P = \sum_{j=0}^{\infty} \rho_j \dim P_j = 1. \quad (5.14)$$

Wir definieren nun  $p_k = \dots = p_{k+n_j} = \rho_j$ , für

$n_j = \dim P_j = \text{Entartungsgrad von } \rho_j$ , und

$k = \sum_{i=0}^{j-1} n_i$ . Dann sehen wir (Gram-Schmidt!),

dass (5.13) von der Form (5.5) ist, und wie in

(5.6) definiert  $P$  einen Zustand  $\rho$ , auf  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ :

$$\rho(A) := \text{Sp}(PA). \quad (5.15)^{18}$$

Der Vollständigkeit halber erinnern wir an die folgenden Eigenschaften der Spur:

$$\text{Sp}(\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2) = \alpha_1 \text{Sp}(A_1) + \alpha_2 \text{Sp}(A_2), \quad (5.16)$$

für  $A_1, A_2$  in  $\mathcal{Y}_1$ ,  $\alpha_1, \alpha_2$  komplexe Zahlen, und

$$\text{Sp}(AB) = \text{Sp}(BA), \quad (5.17)$$

für  $A \in \mathcal{Y}_p$ ,  $B \in \mathcal{Y}_q$ , mit  $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ .

Die folgende Charakterisierung allgemeiner Zustände verdankt man A. Gleason: Ein Funktional  $\mu$ , das jedem orthogonalen Projektor  $P$  auf  $\mathcal{H}$  eine nicht-negative Zahl  $\mu(P)$  zuordnet und die Eigenschaften

$$(i) \quad \mu(1) = 1$$

$$(ii) \quad \mu(P_1 + P_2) = \mu(P_1) + \mu(P_2), \text{ falls } P_1 \cdot P_2 = 0$$

(d.h.  $\text{Bild } P_1 \perp \text{Bild } P_2$ ), hat, nennt man ein

positives, normiertes Mass auf  $\mathcal{H}$ . Gleason hat den

folgenden Satz bewiesen.

Satz Sei  $\mathcal{H}$  ein Hilbertraum mit  $\dim \mathcal{H} \geq 3$ , und sei  $\mu$  ein positives, normiertes Mass auf  $\mathcal{H}$ . Dann gibt es einen Operator  $P \in \mathcal{I}_1$ ,  $P = P^* > 0$ ,  $\text{Sp}(P) = 1$ , so, dass

$$\mu(P) = \text{Sp}(PP), \quad (5.18)$$

für alle orthogonalen Projektoren  $P$  auf  $\mathcal{H}$ .

Man nennt  $P$  wie in (5.13), (5.14) und wie in Gleason's Satz eine Dichtematrix, resp. einen statistischen Operator; (Landau, von Neumann).

Falls  $P_{[\psi]}$  der orthogonale Projektor auf einen Vektor  $\psi \in \mathcal{H}$  ist, dann ist  $P := P_{[\psi]}$  eine Dichtematrix, und

$$\text{Sp}(PA) = \omega_{[\psi]}(A), \quad A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}). \quad (5.19)$$

Offenbar beschreibt eine Dichtematrix  $P$  dann und nur dann einen reinen Zustand, falls

$$P^2 = P. \quad (5.20)$$

Es ist nicht schwierig, zu zeigen, dass es keine  
sog. dispersionsfreien Zustände gibt, d.h. wenn  
 $P = P^* \geq 0$  in der Spurklasse ist, und

$$(Sp(PA))^2 = Sp(PA^2), \quad \forall A \in B(\mathcal{H}),$$

dann gilt, dass  $P = 0$ .

Physikalische Grössen. Konventionellerweise  
verbindet man physikalische Grössen (z.B. Ort  
oder Impuls eines Teilchens), die für ein quanten-  
mechanisches System  $\Sigma$  charakteristisch sind,  
mit selbstadjungierten Operatoren auf  $\mathcal{H}_\Sigma$ ;  
(die Heisenbergschen "Hermiteschen Matrizen").

Sei  $A = A^*$  ein selbstadjungierter Operator  
auf  $\mathcal{H}_\Sigma$ , der eine physikalische Grösse von  $\Sigma$   
darstellt; und sei  $\omega$  der Zustand von  $\Sigma$ .

Man nennt dann  $\omega(A)$  den "Erwartungswert  
von  $A$  im Zustand  $\omega$ ".

19.

Da  $\omega$  ein Zustand ist, gibt es eine Dichtematrix  $\Omega$  so, dass (5.6) gilt. Da  $A = A^*$  selbst adjungiert ist, kann  $A$  spektral zerlegt werden

$$A = \int_{\mathbb{R}} \lambda dP_{\lambda}^A.$$

Sei  $\Delta$  eine Borelmenge in  $\mathbb{R}$ . Wir definieren

$$\begin{aligned} w_{\omega}^A(\Delta) &:= \omega(P_{\Delta}^A) \\ &= \text{Sp}(\Omega P_{\Delta}^A). \end{aligned} \quad (5.21)$$

Offensichtlich ist  $w_{\omega}^A(\Delta) \geq 0$ ,  $\forall \Delta$ , und

$$w_{\omega}^A(\Delta = \mathbb{R}) = \omega(1) = 1; \text{ d.h. } dw_{\omega}^A(\lambda) \text{ ist}$$

ein Wahrscheinlichkeitsmass auf  $\mathbb{R}$ .

Kopenhagen Heuristik. Folgt man Bohr, Born und Heisenberg, so interpretiert man  $w_{\omega}^A(\Delta)$  als die Wahrscheinlichkeit, in einer Messung der physikalischen Grösse  $A$  an einem System  $\Sigma$  im Zustand  $\omega$  einen Messwert  $\lambda$  in der Menge  $\Delta$  zu finden.

Die Kopenhagener Heuristik scheint in der Praxis erstaunlich gut zu funktionieren. Konzeptuell ist ihre Schwäche darin begründet, dass sie nicht präzisiert, durch welche Experimente, d. h. Wechselwirkungen des Systems  $\Sigma$  mit makroskopisch grossen Messapparaturen  $R$ , eine bestimmte physikalische Grösse von  $\Sigma$  zu messen ist, und was dabei die Rolle der Freiheitsgrade von  $R$  ist (Dekohärenz!) Diese Rolle wird erst in der Untersuchung von Messreihen verschiedener Grössen von  $\Sigma$  klar.

Darauf werden wir zurückkommen.

## 5.2. Darstellung allgemeiner Zustände durch Hilbert-Schmidt Operatoren.

Wenn  $P$  eine Dichtematrix ist, dann ist

$$\kappa := \sqrt{P}$$

in  $\mathcal{I}_2$ , d. h.  $\kappa$  ist ein Hilbert-Schmidt Operator.

Wir schreiben  $\mathcal{I}_2 =: \mathcal{K}$ ,  $\mathcal{I}_\infty = \mathcal{B}(\mathcal{H}) =: \mathcal{A}$ .

Wie erwähnt ist  $\mathcal{K}$  ein Hilbertraum mit

Skalarprodukt

$$\langle \kappa, \nu \rangle := \text{Sp}(\kappa^* \nu), \quad \kappa, \nu \in \mathcal{K} \quad (5.23)$$

Der Raum  $\mathcal{K}$  trägt eine Darstellung,  $l$ , von  $\Sigma$

$$l(A)\kappa := A\kappa \in \mathcal{K}, \quad (5.24)$$

für alle  $\kappa \in \mathcal{K}$ ,  $A \in \mathcal{A}$ . Für  $\kappa$  wie in

(5.22) gilt nun, dass

$$\begin{aligned} \langle \kappa, l(A)\kappa \rangle &= \text{Sp}(\kappa^* A \kappa) \\ &\stackrel{(5.17)}{=} \text{Sp}(\kappa \kappa^* A) \\ &\stackrel{(5.22)}{=} \text{Sp}(PA) \\ &= \rho(A). \end{aligned} \quad (5.25)$$

Umgekehrt, sei  $\kappa \in \mathcal{K}$ . Wir definieren einen Zustand,  $\rho$ , von  $\Sigma$  durch die Dichtematrix

$$P := \langle \kappa, \kappa \rangle^{-1} \kappa \kappa^* \quad (5.26)$$

Dann gilt, dass

$$\begin{aligned} \text{Sp}(PA) &= \frac{1}{\langle \kappa, \kappa \rangle} \text{Sp}(\kappa \kappa^* A) \\ &\stackrel{(5.17)}{=} \frac{1}{\langle \kappa, \kappa \rangle} \text{Sp}(\kappa^* A \kappa) \end{aligned}$$

$$= \frac{\langle \kappa, \ell(A/\kappa) \rangle}{\langle \kappa, \kappa \rangle}, \quad A \in \mathcal{A}. \quad (5.27)$$

Sei  $U$  eine Isometrie auf dem Bildraum eines Operators  $\kappa^* \in \mathcal{K}$ . Es ist  $\text{Bild}(\kappa^*) = \text{Kern}(\kappa)^\perp$ , und es gilt, dass  $U^*U = \mathbb{1}|_{\text{Bild}(\kappa^*)}$ . Daraus folgt, dass

$$\begin{aligned} \langle \kappa, \kappa \rangle &= \text{Sp}(\kappa^* \kappa) = \text{Sp}(\kappa \kappa^*) = \text{Sp}(\kappa U^* U \kappa^*) \\ &= \langle \kappa U^*, \kappa U^* \rangle, \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} P_\kappa &:= \langle \kappa, \kappa \rangle^{-1} \kappa \kappa^* \\ &= \langle \kappa U^*, \kappa U^* \rangle^{-1} \kappa U^* U \kappa^* \\ &= P_{\kappa U^*} \end{aligned} \quad (5.28)$$

Offenbar sind zwei Elemente,  $\kappa_1$  und  $\kappa_2$ , in  $\mathcal{K}$  als äquivalent zu betrachten,  $\kappa_1 \sim \kappa_2$ , falls es eine Isometrie  $U: \text{Kern}(\kappa_2)^\perp \hookrightarrow$  gibt so, dass

$$\kappa_1 = \kappa_2 U^* \quad (5.29)$$



Sei  $[x] =$  Äquivalenzklasse mit Repräsentant  $x$ . Es folgt nun, dass

Raum der Zustände von  $\Sigma$

$$= \{ \text{Dichtematrizen in } \mathcal{I}_1 \}$$

$$= \{ [x] \mid x \in \mathcal{K}, \langle x, x \rangle = 1 \} \quad (5.30)$$

Die reinen Zustände entsprechen offenbar

Strahlen  $[P] = \{ e^{i\theta} P \mid \theta \in \mathbb{R} \}$  von Operatoren in  $\mathcal{K}$  mit eindimensionalem Bildraum

$\{ \lambda \psi \mid \psi \in \mathcal{H}, \lambda \in \mathbb{C} \}$ , und  $P$  ist der orthogonale Projektor auf  $\psi$ .

Die Kommutante der Darstellung  $l$  von  $\mathcal{A}$  auf  $\mathcal{I}$

Der Hilbertraum  $\mathcal{K}$  trägt eine zweite, antilineare Darstellung,  $r$ , der Algebra  $\mathcal{A}$ , die mit der Darstellung  $l$  von  $\mathcal{A}$  (siehe (5.24)) vertauscht:

$$r(A)x := x A^*, \quad (5.31)$$

$x \in \mathcal{K}$ ,  $A \in \mathcal{A}$ . Offensichtlich gilt, dass

$$r(\alpha A) = \bar{\alpha} r(A), \quad A \in \mathcal{A}, \alpha \in \mathbb{C},$$

und

$$r(A) r(B) = r(A \cdot B), \quad A, B \in \mathcal{A} \quad (5.32)$$

Man entnimmt den Definitionen von  $l$  und  $r$  sofort, dass

$$[l(A), r(B)] = 0, \quad A, B \in \mathcal{A}. \quad (5.33)$$

( Tatsächlich gilt mehr: Es sei  $C$  ein linearer Operator auf  $\mathcal{K}$  mit der Eigenschaft, dass

$$[C, l(A)] = 0, \quad \forall A \in \mathcal{A}.$$

Dann gibt es einen Operator  $B \in \mathcal{A}$  so, dass

$$C = r(B).$$

( Weiter gilt, dass, wenn  $C$  ein linearer Operator ist, der mit allen Operatoren  $r(A)$  vertauscht dann gibt es einen Operator  $B \in \mathcal{A}$  so, dass

$$C = l(B).$$

Um diese Behauptungen zu beweisen, definieren wir einen antivirtären Operator  $J$  auf  $\mathcal{K}$ :

$$\mathcal{I}x := x^*, \quad x \in \mathcal{K}. \quad (5.34)$$

Definition. Ein Operator  $T$  auf einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ist antilinear, falls für beliebige  $\psi, \varphi \in \mathcal{H}$ ,  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ ,

$$T(\alpha\psi + \beta\varphi) = \bar{\alpha} T\psi + \bar{\beta} T\varphi. \quad (5.35)$$

Ein Operator  $T$  auf  $\mathcal{H}$  ist antiunitär, falls  $T$  antilinear ist,  $\text{Bild}(T) = \mathcal{H}$ , und

$$\langle T\psi, T\varphi \rangle = \langle \varphi, \psi \rangle = \overline{\langle \psi, \varphi \rangle}, \quad (5.36)$$

für alle  $\psi, \varphi$  in  $\mathcal{H}$ .

Der in (5.34) definierte Operator ist offensichtlich beschränkt, antilinear, und  $\text{Bild}(\mathcal{I}) = \mathcal{K}$ . Weiter gilt, dass

$$\langle \mathcal{I}x, \mathcal{I}\sigma \rangle \underset{(5.23), (5.34)}{=} \underset{\uparrow}{\text{tr}(x\sigma^*)} = \underset{\uparrow}{\text{tr}(\sigma^*x)} = \underset{(5.17)}{\langle \sigma, x \rangle} \underset{(5.37)}{=} \quad (5.37)$$

d. h.  $\mathcal{I}$  ist antiunitär. Nun gilt:

$$\mathcal{I}(\ell(A)\mathcal{I}x) = \mathcal{I}(\ell(A)x^*) = \mathcal{I}(Ax^*) = xA^* = r(A)x$$

d.h.

$$\mathcal{J} \mathcal{L}(A) \mathcal{J} = r(A), \quad (5.38)$$

für alle  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ . Ebenso findet man:

$$\mathcal{J} r(A) \mathcal{J} = \mathcal{L}(A), \quad A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}). \quad (5.39)$$

Aus der Definition von  $\mathcal{J}$  folgt weiter, dass

$$\mathcal{J}^2 = 1, \quad (5.40)$$

d.h.  $\mathcal{J}$  ist eine Involution. Setzen wir

$$\mathcal{M} := \{ \mathcal{L}(A) \mid A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \},$$

$$\mathcal{M}' := \{ C \mid C \in \mathcal{B}(\mathcal{H}), [C, B] = 0, \forall B \in \mathcal{M} \},$$

die sog. Kommutante von  $\mathcal{M}$ , so gilt offenbar, dass

$$\mathcal{M}' = \{ r(A) \mid A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \}, \quad (5.41)$$

und

$$\mathcal{J} \mathcal{M} \mathcal{J} = \mathcal{M}'.$$

Die Algebra  $\mathcal{M}$  wird manchmal als "Algebra von Observablen" bezeichnet, obwohl natürlich nicht jeder selbstadjungierte Operator in  $\mathcal{M}$  einer physikalischen Grösse des Systems entspricht. Der Hilbertraum  $\mathcal{H}$  der Hilbert-Schmidt

Operatoren auf  $\mathcal{H}$  ist der "Raum der Zustandsvektoren" des Systems; reine Zustände entsprechen dabei komplexen Vielfachen orthogonaler Projektoren auf  $\mathcal{H}$  mit eindimensionalem Bildraum

### 5.3 Vereinigung zweier quantenmechanischer

Systeme. Es seien  $\Sigma_1$  und  $\Sigma_2$  zwei quantenmechanische Systeme mit endlich vielen Freiheitsgraden, z. B.  $\Sigma_1$ : Atomkern,  $\Sigma_2$ : Elektronen in der Hülle des Atoms. Es bezeichne  $\Sigma_1 \vee \Sigma_2$  das Gesamtsystem, das durch Vereinigung von  $\Sigma_1$  mit  $\Sigma_2$  entsteht.

Der Raum der reinen Zustandsvektoren von  $\Sigma_1 \vee \Sigma_2$  ist der Hilbertraum

$$\mathcal{H}_{12} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2, \quad (5.42)$$

der Raum allgemeiner Zustandsvektoren ist

$$\mathcal{K}_{12} = \mathcal{K}_1 \otimes \mathcal{K}_2 = \mathcal{I}_2(\mathcal{H}_{12}). \quad (5.43)$$

Die Dichtematrix,  $P_{12}$ , die einem Element

$\kappa_{12} \in \mathcal{K}_{12}$  entspricht, ist wieder durch

$$P_{12} = \kappa_{12} \kappa_{12}^* \quad (5.44)$$

gegeben. Die "Algebra der Observablen" von  $\Sigma_1 \vee \Sigma_2$  ist durch  $\mathcal{B}(\mathcal{H}_{12}) = \mathcal{B}(\mathcal{H}_1) \otimes \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$  gegeben.

Wir wollen nun klären, was mit dem Tensorprodukt,  $\otimes$ , von Hilberträumen und Operatoren gemeint ist:

$$\otimes : (\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2) \longrightarrow \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$$

$$(\varphi_1, \varphi_2) \longmapsto \varphi_1 \otimes \varphi_2 \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$$

(eine "Bilinearform" auf  $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ ) definiert durch

$$\varphi_1 \otimes \varphi_2 (\psi_1, \psi_2) := \langle \psi_1, \varphi_1 \rangle \cdot \langle \psi_2, \varphi_2 \rangle. \quad (5.45)$$

Offenbar ist  $\varphi_1 \otimes \varphi_2$  antilinear in  $(\psi_1, \psi_2) \in \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$

Es sei

$$\mathcal{E} = \{\text{endl. Linear komb. solcher Bilinearformen}\}.$$

$\mathcal{E}$  ist offensichtlich ein Vektorraum über  $\mathbb{C}$  und trägt ein Skalarprodukt, das durch Erweiterung, linear im 2., antilinear im 1. Argument, von

$$\langle \varphi_1 \otimes \varphi_2, \psi_1 \otimes \psi_2 \rangle := \langle \varphi_1, \psi_1 \rangle \cdot \langle \varphi_2, \psi_2 \rangle \quad (5.46)$$

definiert ist. Als Übung zeige man, dass dieses Skalarprodukt wohl definiert und positiv-definit ist.

Dieses Skalarprodukt bestimmt eine Norm  $\|(\cdot)\|$  auf

$\mathcal{E}$ . Man definiert nun

$$\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 := \overline{\mathcal{E}}^{\|(\cdot)\|} : \text{Tensorprodukt von } \mathcal{H}_1 \text{ und } \mathcal{H}_2. \quad (5.47)$$

Wenn  $\{\varphi_n\}$  ein VONS in  $\mathcal{H}_1$  und  $\{\psi_m\}$  ein VONS in  $\mathcal{H}_2$  ist, dann ist  $\{\varphi_n \otimes \psi_m\}$  ein VONS in  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ , wie man unschwer nachweist.

In der Schrödinger Darstellung der Wellenmechanik ist der Raum der reinen Zustandsvektoren durch  $\mathcal{H} = L^2(M, d\mu)$ , wo  $(M, d\mu)$  ein Massraum ist, gegeben; z. B.  $M = \mathbb{R}^{3N}$ ,  $d\mu =$  Lebesgue Mass auf  $\mathbb{R}^{3N}$ ;  $N$ : Zahl unterscheidbarer Punktteilchen.

Satz. Es seien  $(M_1, d\mu_1)$  und  $(M_2, d\mu_2)$  zwei Massräume mit der Eigenschaft, dass  $L^2(M_j, d\mu_j)$ ,  $j = 1, 2$ , separable Hilberträume sind. Dann gilt, dass

$$L^2(M_1, d\mu_1) \otimes L^2(M_2, d\mu_2) \simeq L^2(M_1 \times M_2, d\mu_1 \cdot d\mu_2)$$

$$\sum_i f_i(x) \otimes g_i(y) \quad h(x, y)$$

$$x \in M_1, y \in M_2.$$

Dieser Satz gab ursprünglich Anlass zur oben gegebenen Definition der Operation der Vereinigung zweier g.m. Systeme.

Tensorprodukte von Operatoren. Seien  $A_i$  beschränkte Operatoren auf  $\mathcal{H}_i$ ,  $i = 1, 2$ . Wir definieren einen beschränkten, linearen Operator,  $A_1 \otimes A_2$ , auf  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  durch

$$(A_1 \otimes A_2) \left( \sum_j c_j \varphi_j \otimes \psi_j \right) = \sum_j c_j (A_1 \varphi_j \otimes A_2 \psi_j) \quad (5.48)$$

Man zeigt, dass

$$(A_1 \otimes A_2)^* = A_1^* \otimes A_2^*, \quad \|A_1 \otimes A_2\| = \|A_1\| \cdot \|A_2\|, \quad (5.49)$$

mit  $\|A\| = \sup_{\psi} \frac{\|A\psi\|}{\|\psi\|}$

Jeder "Observable"  $A_1$  von  $\Sigma_1$  ordnen wir nun die "Observable"  $A_1 \otimes \mathbb{1}$  von  $\Sigma_1 \vee \Sigma_2$  zu, und jeder "Observable"  $A_2$  von  $\Sigma_2$  die "Observable"  $\mathbb{1} \otimes A_2$  von  $\Sigma_1 \vee \Sigma_2$ . Anders gesagt beschreiben physikalische Größen des Gesamtsystems  $\Sigma_1 \vee \Sigma_2$ , die Opera-



toren der Form  $A \otimes \mathbb{1}$ ,  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1)$ , entsprechen, Eigenschaften des Teilsystems  $\Sigma_1$ ; usw.

Wenn nun  $\underline{\Psi} \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  einen reinen Zustand des Gesamtsystems  $\Sigma_1 \vee \Sigma_2$  beschreibt, so kann der Zustand  $P_1 \in \mathcal{I}_1(\mathcal{H}_2)$ , den man erhält, indem man  $\underline{\Psi}$  auf die Algebra  $\mathcal{B}(\mathcal{H}_1) \otimes \mathbb{1} = \{A \otimes \mathbb{1} \mid A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1)\}$  der physikalischen Größen des Teilsystems  $\Sigma_1$  restringiert, wie ein gemischter Zustand von  $\Sigma_1$  aussehen! Konkret, sei

$$\underline{\Psi} = \sum_{n,m} c_{nm} \varphi_n \otimes \psi_m, \quad c_{nm} \in \mathbb{C}, \quad (5.50)$$

wo  $\{\varphi_n\}$  ein VONS in  $\mathcal{H}_1$  und  $\{\psi_m\}$  ein VONS in  $\mathcal{H}_2$  sind. Dann ist

$$\begin{aligned} \langle \underline{\Psi}, (A \otimes \mathbb{1}) \underline{\Psi} \rangle &= \sum_{n,m,k} \bar{c}_{nk} c_{mk} \langle \varphi_n, A \varphi_m \rangle \langle \psi_k, \psi_k \rangle \\ &= \text{Sp}(PA), \end{aligned}$$

mit

$$P\varphi := \sum_{n,l} \rho_{nl} \langle \varphi_n, \varphi \rangle \varphi_l,$$

wo  $\rho_{nl} = \sum_k \bar{c}_{nk} c_{lk}$  ist. Offenbar ist

$\overline{\rho_{nl}} = \rho_{ln}$ , d.h. die Matrix  $\rho = (\rho_{nl})$  ist symmetrisch. Daher ist auch  $P$  symmetrisch.

Weiter ist

$$\begin{aligned} \langle \varphi, P\varphi \rangle &= \sum_{n,l} \rho_{nl} \langle \varphi_n, \varphi \rangle \overline{\langle \varphi_l, \varphi \rangle} \\ &= \sum_k \left( \sum_n \bar{c}_{nk} \langle \varphi_n, \varphi \rangle \right) \left( \sum_n c_{nk} \overline{\langle \varphi_n, \varphi \rangle} \right) \\ &\geq 0, \end{aligned}$$

d.h.  $P$  ist positiv, und

$$\text{Sp } P = \sum_n \rho_{nn} = \sum_{nk} |c_{nk}|^2 = \langle \underline{\psi}, \underline{\psi} \rangle = 1,$$

falls  $\underline{\psi}$  normiert ist, d.h.  $\|\underline{\psi}\| = 1$ . In diesem

Fall ist  $P$  eine Dichtematrix auf  $\mathcal{H}_1$ , d.h. ein

Zustand von  $\Sigma_1$ . Dieser Zustand ist nur dann

rein, wenn

$$\sum_n c_{nm} \varphi_n = a_m \psi, \quad (5.51)$$

für einen von  $m$  unabhängigen Vektor  $\psi \in \mathcal{H}$ ,

$a_m \in \mathbb{C}$ . Dann dann ist

$$\langle \underline{\psi}, (A \otimes \mathbb{1}) \underline{\psi} \rangle = \langle \psi, A\psi \rangle, \quad \psi \in \mathcal{H},$$

Aus (5.51) folgt aber, dass

$$\underline{\Psi} = \psi \otimes \left( \sum_m a_m \psi_m \right) =: \psi \otimes \chi, \quad (5.52)$$

d.h.  $\underline{\Psi}$  ist ein reiner "Produktvektor". Umgekehrt folgt aus (5.52), dass

$$\langle \underline{\Psi}, (A \otimes 1) \underline{\Psi} \rangle = \langle \psi, A \psi \rangle, \quad A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1),$$

$$\langle \underline{\Psi}, (1 \otimes B) \underline{\Psi} \rangle = \langle \chi, B \chi \rangle, \quad B \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_2).$$

Damit haben wir den folgenden Satz bewiesen.

Satz. Ein reiner Zustand,  $P_{\underline{\Psi}}$ ,  $\underline{\Psi} \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  des Gesamtsystems  $\Sigma_1 \vee \Sigma_2$  bestimmt reine Zustände der Teilsysteme  $\Sigma_1, \Sigma_2$  dann und nur dann, wenn

$$\underline{\Psi} = \psi \otimes \chi, \quad \psi \in \mathcal{H}_1, \chi \in \mathcal{H}_2.$$

Andernfalls beschreiben die Zustände

$$\omega_1(A) := \langle \underline{\Psi}, (A \otimes 1) \underline{\Psi} \rangle, \quad A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1)$$

und

$$\omega_2(B) := \langle \underline{\Psi}, (1 \otimes B) \underline{\Psi} \rangle, \quad B \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$$

gemischte Zustände von  $\Sigma_1$  und  $\Sigma_2$ . In diesem

Fall nennt man „verschränkt“ („entangled“).<sup>206</sup>

Vom Standpunkt der klassischen Physik aus beschreibt der eben bewiesene Satz einen äusserst merkwürdigen Sachverhalt. Seien  $\Sigma_1$  und  $\Sigma_2$  nämlich klassische Systeme mit Phasenräumen  $\Gamma_1, \Gamma_2$ . Der Phasenraum des zusammengesetzten Systems,  $\Sigma_1 \vee \Sigma_2$  ist dann  $\Gamma_1 \times \Gamma_2$ . Ein reiner Zustand von  $\Sigma_1 \vee \Sigma_2$  ist ein Dirac Mass auf  $\Gamma_1 \times \Gamma_2$ , d. h. eine in einem Punkt  $(x_1, x_2) \in \Gamma_1 \times \Gamma_2$  konzentrierte "Dirac Funktion"  $\delta_{(x_1, x_2)}$ . Restringt man diesen Zustand auf die Algebra  $C^\infty(\Gamma_j)$  der physikalischen Grössen des Teilsystems  $\Sigma_j$ , so entspricht er dem reinen Zustand  $\delta_{x_j}$  von  $\Sigma_j$ , für  $j=1,2$ . Klassisch gibt es also keine verschränkten Zustände!

Quantenmechanisch entstehen verschränkte Zustände eines Gesamtsystems  $\Sigma_1 \vee \Sigma_2$  dadurch, dass  $\Sigma_1$  und  $\Sigma_2$  während einer gewissen Phase

mit einander in Wechselwirkung gestanden haben.

Werden sie später wieder von einander separiert, so sind die Zustände von  $\Sigma_1$  und von  $\Sigma_2$  typischerweise gemischt. Dieser Umstand gibt oft zu Verwirrung Anlass.

#### 5.4 Symmetrien eines quantenmechanischen Systems

Es sei  $\Sigma$  ein quantenmechanisches System mit Hilbertraum,  $\mathcal{H}$ , reiner Zustandsvektoren. Eine Symmetrie von  $\Sigma$  ist eine Abbildung

$$\sigma : \psi \in \mathcal{H} \mapsto \sigma\psi \in \mathcal{H}$$

$$A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \mapsto \sigma A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}),$$

(a priori nicht notwendigerweise linear) so, dass

(i)  $\sigma : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  ist surjektiv

(ii) Für  $\psi \in \mathcal{H}$ ,  $\omega_\psi(A) = \langle \psi, A\psi \rangle$ ,  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ ,

sei  $\omega_\psi^A(\Delta) \equiv \omega_{\omega_\psi}^A(\Delta)$  wie in (5.21) definiert;

dann soll stets gelten, dass für  $\psi \in \mathcal{H}$ ,  $A = A^* \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$

$$\omega_{\sigma\psi}^{\sigma A}(\Delta) = \omega_\psi^A(\Delta),$$

für beliebige  $\Delta \subset \mathbb{R}$ .

Die Eigenschaft (ii) ist äquivalent zu

$$(ii') \quad \langle \sigma \psi, \sigma A \sigma \psi \rangle = \langle \psi, A \psi \rangle,$$

für beliebige  $\psi \in \mathcal{H}$ ,  $A = A^* \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ , und

$$f(\sigma A) = \sigma f(A),$$

für beliebige reellwertige (stetige) Funktionen  $f$  auf  $\mathbb{R}$ .

Satz (Wigner) Es sei  $\sigma$  eine Symmetrie des Systems  $\Sigma$ . Dann gilt:

$$|\langle \sigma \varphi, \sigma \psi \rangle| = |\langle \varphi, \psi \rangle|, \quad \forall \varphi, \psi \in \mathcal{H}. \quad (5.53)$$

Definition. Eine Abbildung  $\sigma: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  mit den Eigenschaften (i) und (5.53) heisst Strahlenkorrespondenz.

Beispiele für Strahlenkorrespondenzen:

(a) Es sei  $U$  ein unitärer Operator auf  $\mathcal{H}$ . Wir definieren  $\sigma_U$  durch

$$\sigma_U \psi := U\psi, \quad \psi \in \mathcal{H}, \quad \sigma_U A := UAU^*, \quad A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \quad (5.54)$$

Dann ist  $\sigma_U$  eine Symmetrie von  $\Sigma$ , insb. eine Strahlenkorrespondenz.

(b) Sei  $V$  ein antiunitärer Operator auf  $\mathcal{H}$ . Wir definieren  $\sigma_V$  durch

$$\sigma_V \psi = V \psi, \quad \sigma_V A = V A V^* \quad (5.55)$$

Dann definiert  $\sigma_V$  eine Symmetrie von  $\Sigma$ , insb. eine Strahlenkorrespondenz.

Satz (Wigner) Es sei  $\sigma$  eine Strahlenkorrespondenz auf  $\mathcal{H}$ . Dann gibt es einen unitären oder antiunitären Operator  $V$  auf  $\mathcal{H}$ , der bis auf eine Phase  $e^{i\alpha}$  eindeutig ist so, dass

$$\sigma = \sigma_V,$$

wie in (5.54), (5.55); d.h.  $\sigma$  bestimmt einen Operatorstrahl  $\{e^{i\alpha} V \mid \alpha \in \mathbb{R}\}$ ,  $V$  unitär oder antiunitär.

Als Korollar folgt, dass jede Strahlenkorrespondenz eine Symmetrie von  $\Sigma$  definiert.

Für Beweise, siehe etwa V. Bargmann, J. Math. Phys. 5, 862 (1964).

Ein weiteres Korollar ist, dass sich die Symmetrien eines Systems zusammensetzen lassen,  

$$\sigma_U \circ \sigma_V = \sigma_{U \cdot V}, \quad (\sigma_{11} = \text{id}),$$
 und deshalb eine Gruppe erzeugen.

## 5.5 Dynamik quantenmechanischer Systeme.

Es sei  $\Sigma$  ein während eines Zeitintervalls  $I \subseteq \mathbb{R}$  isoliertes quantenmechanisches System; (insb. werden während des Zeitintervalls  $I$  an  $\Sigma$  keine Messungen ausgeführt). Zur Zeit  $t_0 \in I$  möge der Zustand von  $\Sigma$  einem Einheitsstrahl  $[\psi_{t_0}]$ ,  $\psi_{t_0} \in \mathcal{H}$ ,  $\|\psi_{t_0}\| = 1$ , entsprechen. Sei  $\omega_{t_1}$ ,  $t_1 > t_0$ , der Zustand von  $\Sigma$  zu einer Zeit  $t_1 \in I$ . Man postuliert:

(I)  $\omega_{t_1}$  ist ein reiner Zustand, entspricht also einem Einheitsstrahl  $[\psi_{t_1}]$ ,  $\psi_{t_1} \in \mathcal{H}$ ; und

(II)  $\psi_{t_1}$  geht aus  $\psi_{t_0}$  durch eine Symmetrie von  $\Sigma$  hervor.

Es folgt, dass es einen unitären oder antiunitären Operator  $U(t_1, t_0)$ , den Propagator, gibt so, dass

$$\psi_{t_1} = U(t_1, t_0) \psi_{t_0}, \quad \forall \psi_{t_0} \in \mathcal{H}. \quad (5.56)$$

Sei nun  $I \ni t_2 > t_1 > t_0$ . Dann folgt, dass

$$\begin{aligned} \psi_{t_2} &= U(t_2, t_0) \psi_{t_0} = U(t_2, t_1) \psi_{t_1} \\ &= U(t_2, t_1) U(t_1, t_0) \psi_{t_0}, \quad \forall \psi_{t_0} \in \mathcal{H}, \end{aligned}$$



d.h.

$$U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1) U(t_1, t_0), \quad (5.57)$$

$\forall t_0, t_1, t_2$  in  $I$  mit  $t_0 < t_1 < t_2$ .

Schliesslich postuliert man, dass

$$(III) \quad \lim_{t' \rightarrow t} U(t', t) \psi = \psi, \quad \forall \psi \equiv \psi_t \in \mathcal{H}. \quad (5.58)$$

Daraus folgt, dass  $U(t', t)$  unitär ist, für  $|t' - t|$  klein genug, und (5.57) impliziert dann, dass  $U(t_1, t_0)$  unitär ist für beliebige  $t_0, t_1$  in  $I$  mit  $t_0 < t_1$ . Ist  $t_0 > t_1$ , so definieren wir

$$U(t_1, t_0) := U(t_0, t_1)^*. \quad (5.59)$$

Ein System  $\Sigma$  heisst autonom, falls

$$U(t_1, t_0) = U(t_1 - t_0, 0) \equiv U(t_1 - t_0), \quad (5.60)$$

für beliebige  $t_0, t_1$  in  $I$ , d.h. falls der Propagator  $U$  nur von der Differenz der Anfangs- und Endzeit abhängt. Dann impliziert (5.57), dass

$$U(t+s) = U(t) U(s), \quad (5.61)$$

d.h.  $\{U(t) \mid t \in \mathbb{R}\}$  ist eine einparametrische, unitäre Gruppe, und wegen (5.58) ist sie stark

stetig. Der Satz von Stone ( $\rightarrow$  Kap. 2) impliziert<sup>212</sup> dann, dass es einen selbstadjungierten Operator  $H = H^*$  auf  $\mathcal{H}$  gibt so, dass

$$U(t) = e^{-i(Ht)/\hbar}. \quad (5.62)$$

Man nennt  $H$  den Hamilton Operator von  $\Sigma$ .

Für nicht-autonome Systeme liegen die Dinge etwas komplizierter. Falls es einen in  $\mathcal{H}$  dichten Bereich  $\mathcal{D}$  gibt so, dass die vektorwertige Funktion  $U(t, t_0)\psi$ ,  $t > t_0$ , von  $t$  für alle  $\psi \in \mathcal{D}$  stark differenzierbar in  $t$  ist, dann gibt es eine Familie selbstadjungierter Operatoren  $\{H(t)\}$  so, dass

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0)\psi = H(t)U(t, t_0)\psi, \quad (5.63)$$

$\psi \in \mathcal{D}$ . In Anwendungen geht man i. a. von der umgekehrten Fragestellung aus: Sei

$\{H(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$  eine Familie zeitabhängiger Hamilton

Operatoren. Unter welchen Bedingungen an  $\{H(t)\}$

hat die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = H(t) \psi_t \quad (5.64)$$

zur Anfangsbedingung  $\psi_{t=t_0} = \psi$  eine eindeutige Lösung? Eine hinreichende Bedingung dafür ist im folgenden Satz formuliert.

Satz (Reed & Simon, Vol. III, Theorem X.70)

Es sei  $\mathcal{H}$  ein separabler Hilbertraum,  $I \subseteq \mathbb{R}$  eine Intervall von Zeiten, und  $\{H(t)\}_{t \in I}$  eine Familie zeitabhängiger Hamilton Operatoren. Es gelte

(1) Alle  $H(t)$  sind auf einem gemeinsamen, in  $\mathcal{H}$  dichten Bereich  $\mathcal{D}$  definiert und (wesentlich) selbstadjungiert,  $\forall t \in I$ .

(2) Für alle  $t, s \in I$  ist  $\dot{H}(t)(H(s) \pm i)^{-1}$  ein beschränkter Operator, der stark stetig von  $t$  und  $s$  abhängt.

Dann gibt es zu jedem Paar  $(t, s)$ ,  $t \geq s$ , von Zeiten in  $I$  einen unitären Operator  $U(t, s)$ , den Propagator, so, dass

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t,s) \psi = H(t) U(t,s) \psi,$$

$\forall \psi \in \mathcal{D}$ , und

(5.65,

$$\lim_{t \rightarrow s} U(t,s) \psi = \psi.$$

### Zeitentwicklung gemischter Zustände.

Sei  $\psi \in \mathcal{H}$ ,  $A$  ein beschränkter Operator auf  $\mathcal{H}$ , und  $U(t,s)$  ein Propagator. Wenn das System  $\Sigma$  zur Zeit  $s$  im reinen Zustand  $[\psi]$  ist, so ist der Erwartungswert von  $A$  zur Zeit  $t > s$  durch

$$\frac{\langle U(t,s) \psi, A U(t,s) \psi \rangle}{\langle \psi, \psi \rangle} = \frac{\langle \psi, \alpha_{s,t}(A) \psi \rangle}{\langle \psi, \psi \rangle}$$

gegeben, wo (im Heisenberg Bild)

$$\alpha_{s,t}(A) := U(t,s)^* A U(t,s) = U(s,t) A U(t,s). \quad (5.59) \quad (5.66)$$

Wenn nun  $\Sigma$  zur Zeit  $s$  in einem durch einen Hilbert-Schmidt Operator  $\kappa \in \mathcal{K}$ , mit  $\text{Sp}(\kappa^* \kappa) = 1$ , beschriebenen gemischten Zustand

ist, so ist der Erwartungswert einer physikalischen Grösse  $A$  zur Zeit  $t \geq s$  durch

$$\begin{aligned}
 \langle \kappa, \alpha_{s,t}(A) \kappa \rangle &= \text{Sp}(\kappa^* \alpha_{s,t}(A) \kappa) \\
 &= \text{Sp}(\kappa^* U(s,t) A U(t,s) \kappa) \\
 &\stackrel{\uparrow}{=} \text{Sp}(U(t,s) \kappa^* U(s,t) A U(t,s) \kappa U(s,t)) \\
 &\quad \text{Sp ist zykl., (5.17)} \\
 &= \text{Sp}(\alpha_{t,s}(\kappa)^* A \alpha_{t,s}(\kappa)) \\
 &= \langle \alpha_{t,s}(\kappa), A \alpha_{t,s}(\kappa) \rangle
 \end{aligned}$$

Die Abbildung  $\kappa \mapsto \alpha_{t,s}(\kappa)$  (5.67)

ist linear und unitär auf  $\mathcal{K}$ ; denn

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha_{t,s}(\kappa), \alpha_{t,s}(\kappa) \rangle &= \text{Sp}(\alpha_{t,s}(\kappa)^* \alpha_{t,s}(\kappa)) \\
 &= \text{Sp}(U(t,s) \kappa^* \underbrace{U(s,t) U(t,s)}_{= \mathbb{1}} \kappa U(s,t)) \\
 &= \text{Sp}(\kappa^* \kappa \underbrace{U(s,t) U(t,s)}_{= \mathbb{1}}) \\
 &= \langle \kappa, \kappa \rangle.
 \end{aligned}$$

Die Abbildung (5.67) beschreibt die unitäre Zeit-

evolution auf dem Hilbertraum  $\mathcal{K}$  der gemischten Zustandsvektoren. Sie ist nur bis auf Rechtsmultiplikation mit einem beliebigen Propagator  $V(s, t)$  eindeutig bestimmt:

$$\alpha_{t,s}(\kappa) \sim \alpha_{t,s}(\kappa) V(s, t).$$

Diese Vieldeutigkeit verschwindet, wenn man gemischte Zustände durch Dichtematrizen beschreibt: Für  $\kappa \in \mathcal{K}$  ist  $P := \kappa \kappa^* \in \mathcal{I}_1(\mathcal{H})$ , mit

$$P \geq 0 \quad \text{und} \quad \text{Sp } P = \langle \kappa, \kappa \rangle.$$

Es gilt dann, dass

$$\begin{aligned} \text{Sp} (P \alpha_{s,t}(A)) &= \text{Sp} (P U(s, t) A U(t, s)) \\ &= \text{Sp} (U(t, s) P U(s, t) A) \\ &= \text{Sp} (\alpha_{t,s}(P) A). \end{aligned} \quad (5.68)$$

Wenn der Zustand von  $\Sigma$  zur Zeit  $s$  durch

$P_s := P$  gegeben ist, dann ist der Zustand von

$\Sigma$  zur Zeit  $t > s$  im Schrödinger Bild durch

$$P_t := \alpha_{t,s}(P_s) = U(t, s) P U(s, t) \quad (5.69)$$

gegeben. Die Familie  $\{P_t\}$  von Dichtematrizen<sup>217</sup> löst die Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} P_t = [H(t), P_t], \quad (5.70)$$

die man Liouville Gleichung nennt.

Mehr zu diesen Dingen in den Übungen.

## 5.6 Idealmessungen

Sei  $\Sigma$  ein physikalisches System, und  $A$  eine durch einen selbstadjungierten Operator auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  der reinen Zustandsvektoren dargestellte physikalische Grösse von  $\Sigma$ . Sei  $\Omega$

der Zustand von  $\Sigma$  unmittelbar vor einer Messung der Grösse  $A$ . Der in der Messung erhaltene Messwert von  $A$  falle in eine Menge  $\Delta \subset \mathbb{R}$ , und der Zustand von  $\Sigma$  unmittelbar nach Abschluss der Messung von  $A$  werde mit  $\Omega_\Delta^+$  bezeichnet.

Die Kopenhagen-Heuristik stellt die folgenden

Forderungen auf:

(I) Wird die Grösse  $A$  im Zustand  $\Omega_{\Delta}^{+}$  noch einmal gemessen, dann fällt der Messwert mit Sicherheit in die Menge  $\Delta$  (jedenfalls, wenn man sich mit der Messung beeilt), d.h.

$$\text{Sp}(\Omega_{\Delta}^{+} P_{\Delta}^A) = 1, \quad (5.71)$$

wo  $\{P_{\Delta}^A\}_{\Delta \subset \mathbb{R}}$  die spektralen Projektoren von  $A$  bezeichnen; (siehe (5.21)).

(II) Sei  $P$  ein in  $P_{\Delta}^A$  enthaltener, orthogonaler Projektor, d.h.  $\text{Bild}(P) \subseteq \text{Bild}(P_{\Delta}^A)$ ;

(man schreibt  $P \prec P_{\Delta}^A$ ). Dann soll gelten, dass

$$\text{Sp}(\Omega P) = \text{Sp}(\Omega_{\Delta}^{+} P) \cdot \text{Sp}(\Omega P_{\Delta}^A). \quad (5.72)$$

Aus den Forderungen (I) und (II) folgt dann

dass

$$\Omega_{\Delta}^{+} = \frac{P_{\Delta}^A \Omega P_{\Delta}^A}{\text{Sp}(\Omega P_{\Delta}^A)}. \quad (5.73)$$

Wenn  $\Omega$  ein durch einen Einheitsvektor  $\psi \in \mathcal{H}$  repräsentierter reiner Zustand ist, dann



ist  $\Omega_A^+$  der durch  $\frac{P_A^A \psi}{\|P_A^A \psi\|}$  repräsentierte reine Zustand; (sog. "Reduktion des Wellenpakets").

Natürlich sind die Forderungen (I) und (II) etwas merkwürdig. Man kann sie durch eine quantenmechanische Beschreibung des Messprozesses aber teilweise plausibel machen: Sei  $A$  eine durch einen selbstadjungierten Operator repräsentierte physikalische Grösse eines Systems  $\Sigma$ . Eine Messung von  $A$  in einem Zustand  $\Omega$  von  $\Sigma$  besteht immer darin, dass  $\Sigma$  in Wechselwirkung mit einem zweiten, makroskopisch grossen System  $\Sigma_A$  gebracht wird. Der Anfangszustand des Gesamtsystems,  $\Sigma_A \vee \Sigma$ , zu einer Zeit  $t_0$  sei ein Produktzustand

$$\Omega_A \otimes \Omega, \quad (5.74)$$

wo  $\Omega_A$  und  $\Omega$  Dichtematrizen von  $\Sigma_A$  resp  $\Sigma$

sind. Es seien  $\kappa_A := \sqrt{\Omega_A}$  und  $\kappa := \sqrt{\Omega}$

die Hilbert-Schmidt Operatoren, die  $\Omega_A$ , resp.  $\Omega$  repräsentieren. Der Einfachheit halber nehmen wir an,  $A$  habe ein reines diskretes Spektrum:

$$A = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n P_n^A, \quad (5.75)$$

wo  $\alpha_0 > \alpha_1 > \alpha_2 > \dots$  die Eigenwerte von  $A$  und  $P_n^A$  die zugehörigen spektralen Projektoren sind. Wir können nun den Anfangszustand  $\kappa_A \otimes \kappa$  von  $\sum_A \vee \sum$  nach den Spektralprojektoren von  $A$  entwickeln:

$$\kappa_A \otimes \kappa = \sum_{n=0}^{\infty} \kappa_A \otimes \kappa_n, \quad (5.76)$$

wo  $\kappa_n := P_n \kappa \in \mathcal{K}_{\Sigma} = \mathcal{I}_2(\mathcal{H}_{\Sigma})$ .

Man nimmt nun an, dass die Dynamik des Systems durch einen Propagator  $U(t,s)$  auf  $\mathcal{H}_{\Sigma_A} \otimes \mathcal{H}_{\Sigma}$  beschrieben wird, der mit

dem Operator  $\mathbb{1} \otimes A$  vertauscht; (oder wenigstens nahezu vertauscht). Dann hat  $V(t, s)$  die Darstellung

$$V(t, s) = \sum_{n=0}^{\infty} V_n(t, s) \otimes P_n, \quad (5.77)$$

wo  $V_n(t, s)$  ein Propagator von  $\Sigma_A$  ist,  $\forall n$ ,

und  $V_n(t, s)^* V_m(t, s) \neq \mathbb{1}$ ,  $n \neq m$ .

Wenn (5.76) den Anfangszustand von  $\Sigma_A \vee \Sigma$  zur Zeit  $t_0$  darstellt, so ist der Zustand von  $\Sigma_A \vee \Sigma$  zur Zeit  $t > t_0$  unter der Annahme (5.77) durch

$$\left( \kappa_A \otimes \kappa \right)_t := \sum_{n=0}^{\infty} V_n(t, t_0) \kappa_A V_n(t_0, t) \otimes \kappa_n$$

dargestellt. Wir setzen

$$\kappa_A^{(n)}(t) := V_n(t, t_0) \kappa_A V_n(t_0, t)$$

Schränkt man nun den Zustand  $(\kappa_A \otimes \kappa)_t$  auf Operatoren der Form  $\mathbb{1} \otimes B$ ,  $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_\Sigma)$ , die Eigenschaften von  $\Sigma$  beschreiben, so findet

man, dass

$$\begin{aligned} & \langle (\kappa_A \otimes \kappa)_t, l(1 \otimes B) (\kappa_A \otimes \kappa)_t \rangle \\ &= \sum_{n,m=0}^{\infty} \langle \kappa_A^{(n)}(t), \kappa_A^{(m)}(t) \rangle \langle \kappa_n, l(B) \kappa_m \rangle \end{aligned}$$

Nun ist es allerdings plausibel, dass

$$\langle \kappa_A^{(n)}(t), \kappa_A^{(m)}(t) \rangle \simeq \delta_{nm}, \quad (5.78)$$

(Dekohärenz!)

falls  $\sum_A$  makroskopisch gross ist und die Zeit  $t$  gross genug ist; (man kann Beispiele konstruieren, in denen (5.78) im Limes  $t \rightarrow \infty$  exakt wird). Mit (5.78) folgt nun, dass

$$\begin{aligned} & \langle (\kappa_A \otimes \kappa)_t, l(1 \otimes B) (\kappa_A \otimes \kappa)_t \rangle \\ & \simeq \sum_{n=0}^{\infty} \text{Sp} (\Omega P_n B P_n) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \text{Sp} (P_n \Omega P_n B), \quad (5.79) \end{aligned}$$

d.h. der Zustand von  $\Sigma$  nach der Messung der Grösse  $A$  ist durch eine Dichtematrix

223

$P_A := \sum_{n=0}^{\infty} P_n \Omega P_n$  beschrieben, die mit  $A$  vertauscht. Die Kopenhagener Heuristik interpretiert die Zahl

$$p_n := \text{Sp}(P_n \Omega P_n) = \text{Sp}(\Omega P_n) \quad (5.80)$$

als die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung von  $A$  im Anfangszustand  $\Omega$  von  $\Sigma$  den Messwert  $\alpha_n$  zu finden. Denn es gilt, dass

$$0 \leq p_n \leq 1, \quad \forall n, \quad \text{und}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} p_n = \text{Sp}(\Omega \sum_{n=0}^{\infty} P_n) = \text{Sp}(\Omega) = 1.$$

Das Phänomen (5.78) wird Dekohärenz genannt und ist der einfache Teil in der Begründung der Postulate (I) und (II).

### 5.7 Allgemeine Unschärferelationen

Seien  $A$  und  $B$  zwei selbstadjungierte Operatoren auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  eines physikalischen Systems. Sei  $\mathcal{K} \in \mathcal{J}_2^+(\mathcal{H})$  irgendein reiner oder gemischter Zustand

Wir definieren

$$\langle A \rangle_{\kappa} := \langle \kappa, A \kappa \rangle = \text{Sp}(\kappa \kappa^* A),$$

und

$$\Delta A_{\kappa} := \left[ \langle \kappa, (A - \langle A \rangle_{\kappa} \mathbb{1})^2 \kappa \rangle \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (5.81)$$

Satz.

$$\Delta A_{\kappa} \cdot \Delta B_{\kappa} \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle_{\kappa}|. \quad (5.82)$$

Beweis. Wir setzen

$$\tilde{A} := A - \langle A \rangle_{\kappa} \mathbb{1}, \quad \tilde{B} := B - \langle B \rangle_{\kappa} \mathbb{1}.$$

Es gilt dann, dass  $[\tilde{A}, \tilde{B}] = [A, B]$ . Für  $\lambda \in \mathbb{R}$  gilt:

$$0 \leq \|(\tilde{A} + i\lambda \tilde{B})\kappa\|_{\mathcal{H}}^2 = \langle \tilde{A}^2 \rangle_{\kappa} + \lambda \langle i[\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle_{\kappa} + \lambda^2 \langle \tilde{B}^2 \rangle_{\kappa}$$

also

$$\langle i[\tilde{A}, \tilde{B}] \rangle_{\kappa}^2 - 4 \langle \tilde{A}^2 \rangle_{\kappa} \langle \tilde{B}^2 \rangle_{\kappa} \leq 0,$$

oder

$$|\langle [A, B] \rangle_{\kappa}| \leq 2 \Delta A_{\kappa} \cdot \Delta B_{\kappa},$$

daher (5.82).

Bemerkung. Falls  $\Delta A_{\kappa} = 0$  dann folgt, dass

$$A\kappa = \langle A \rangle_{\kappa} \kappa,$$

d.h.  $\kappa$  ist ein Eigenvektor von  $A$  zum Eigenwert  $\langle A \rangle_{\kappa}$ .

Anwendung. Für  $A = p_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q^j}$  und  $B = q^k$  haben wir, dass  $[A, B] = \frac{\hbar}{i} \delta_j^k$ , und es folgt, dass

$$\Delta p_j \Delta q^k \geq \frac{\hbar}{2} \delta_j^k \quad (5.83)$$

Das sind die berühmten Heisenbergschen Unschärferelationen, die von Bohr und Heisenberg in vielen Gedankenexperimenten getestet wurden. Geht man davon aus, dass die Ungleichungen (5.83) eine fundamentale Einschränkung der Genauigkeit gleichzeitiger Messungen von Impuls und Ort von Teilchen ausdrückt, so gelangt man zur Einsicht, dass der Zustandsbegriff der klassischen Mechanik inadequat für die Beschreibung von Zuständen physikalischer Systeme sein muss. Ausserdem wird man zur Abschätzung geführt, dass die Anzahl,  $N_\Omega$ , von einander verschiedener quantenmechanischer Zustände, die einem kompakten Gebiet  $\Omega \subset T$  im klassischen Phasen-

raum entsprechen, näherungsweise durch

$$N_{\Omega} \approx \frac{\text{vol}(\Omega)}{\frac{h}{2\pi}}, \quad (5.84)$$

beschränkt ist, wo  $f$  die Zahl der Freiheitsgrade bedeutet.

Schliesslich sei darauf hingewiesen dass, wenn

$$\Delta_{\psi} p_j \cdot \Delta_{\psi} q^j = \frac{h}{2},$$

d.h. (5.83) wird saturiert, dann ist die Wellenfunktion  $\psi$  von der Form

$$\psi(q^1, \dots, q^f) = e^{-\sigma(q^j - q_0^j)^2} \varphi(q^1, \dots, q^{\overset{v}{j}}, \dots, q^f),$$

$\sigma > 0$ , und umgekehrt; (Übungen!)

---



## Anhang B.

### Der harmonische Oszillator

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2, \quad p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x},$$

auf  $\mathcal{H} := L^2(\mathbb{R}, dx)$ , (Schrödinger Darst.).

### Zeitabhängige Schrödinger Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \psi \quad (1)$$

### Stationäre Lösungen

$$\psi(x, t) = u(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (2)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 u = Eu \quad (3)$$

(Eigenwertproblem!)

### Reskalierte, dimensionslose Variablen

$$E =: \hbar\omega \varepsilon, \quad \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x =: \xi \quad (4)$$

$$(3) \Rightarrow \boxed{-u'' + \xi^2 u = 2\varepsilon u} \quad (5)$$

Asymptotische Gl. für  $|\xi| \rightarrow \infty$ :

$$-u''_{\infty} + \xi^2 u_{\infty} = 0(u_{\infty}).$$

Lösung:  $u_{\infty}(\xi) = e^{\pm \frac{1}{2} \xi^2}$

"Schrödinger'sche Randbedg.":  $u$  (polynomial)

beschränkt!  $\Rightarrow u_{\infty}(\xi) = e^{-\frac{1}{2} \xi^2}$  (6)

Ansatz für allg. Lösung von (5):

$$u(\xi) = e^{-\frac{1}{2} \xi^2} w\left(\frac{\xi}{\sqrt{\epsilon}}\right) \quad (7)$$

$$(5) \Rightarrow \boxed{\frac{d^2 w}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dw}{d\xi} + (2\epsilon - 1)w = 0} \quad (8)$$

Potenzreihenansatz für  $w$ :

$$w(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k$$

$\Rightarrow$  Erhalten aus (8) Rekursionsformeln für die  $a_k$ :

$$\boxed{a_{k+2} = \frac{2k - (2\epsilon - 1)}{(k+2)(k+1)} a_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots} \quad (9)$$

3

Aus Annahme  $a_k \neq 0$ , für  $k$  beliebig gross,  
folgt

$$a_{k+2} \underset{k \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2}{k} a_k \quad (10)$$

$$\Rightarrow w(\xi) \underset{\xi \rightarrow \infty}{\sim} \sum_k \frac{1}{k!} \xi^{2k} \sim e^{\xi^2} \quad (11)$$

$$\Rightarrow u(\xi) \sim e^{\xi^2/2}, \text{ für } |\xi| \rightarrow \infty.$$

Dies verletzt "Schrödinger'sche Randbedg.!"

$$\Rightarrow \boxed{a_k = 0, \text{ für } k > k_*} \quad (12)$$

Mit (9) folgt, dass (12) erfüllt dann und nur dann  
wenn

$$\boxed{\varepsilon = n + \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots} \quad (13)$$

Für  $n$  gerade,  $a_0, a_2, \dots, a_n \neq 0$ ;  $a_{2l+1} = 0, \forall l$

Für  $n$  ungerade,  $a_1, a_3, \dots, a_n \neq 0$ ;  $a_{2l} = 0, \forall l$ .

Für  $\varepsilon = \varepsilon_n := n + \frac{1}{2}$ , ist  $w(\xi)$  ein Polynom  $n$ ten Grades

mit Parität  $(-1)^n$  ;  $n^{\text{tes}}$  Hermite Polynom,  $H_n$ .

Dgl. für  $H_n$  ist

$$\boxed{H_n'' - 2\xi H_n' + 2n H_n = 0} \quad (14)$$

Wir definieren die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$a^* := \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right),$$

$$a := \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right).$$

Falls  $f$  zweimal stetig diff. bar, dann

$$\left. \begin{aligned} 2 a^* a f &= - \frac{d^2}{d\xi^2} f + \xi^2 f - f \\ 2 a a^* f &= - \frac{d^2}{d\xi^2} f + \xi^2 f + f \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

$$\Rightarrow \boxed{a a^* - a^* a \equiv [a, a^*] = 1} \quad (16)$$

Mit Hilfe von  $a, a^*$ , können  $H$  wie folgt umschreiben:

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega (a^* a + a a^*) = \hbar \omega \left( a^* a + \frac{1}{2} \right)$$

und die Eigenwertgl. (5) wird

$$\boxed{\frac{1}{\hbar \omega} \left( H - \frac{1}{2} \hbar \omega \right) u = a^* a u = \left( \varepsilon - \frac{1}{2} \right) u} \quad (17)$$

Für  $\varepsilon = \varepsilon_n = n + \frac{1}{2}$ ,  $u = u_n = H_n e^{-\frac{1}{2}z^2}$ , gilt

$$a^* a u_n = n u_n$$

Lemma.  $u_{n+1} \propto a^* u_n$

Beweis. Mit (16) gilt

$$a^* a (a^* u_n) = a^* (a^* a + 1) u_n = (n+1) a^* u_n.$$

Falls  $a^* u_n \neq 0 \Rightarrow a^* u_n \propto u_{n+1}$ .

Sei

$$\langle f, g \rangle := \int d\zeta \overline{f(\zeta)} g(\zeta)$$

das Skalarprodukt auf  $L^2(\mathbb{R}, d\zeta)$ . Dann gilt

$$\langle a^* u_n, a^* u_n \rangle = \langle u_n, a a^* u_n \rangle$$

↑  
partielle Integration

$$\stackrel{(16)}{=} \langle u_n, (a^* a + 1) u_n \rangle$$

$$= (n+1) \langle u_n, u_n \rangle \neq 0. \quad (18)$$

$$\Rightarrow a^* u_n \neq 0$$

Q.E.D.

Normierung der Eigenfunktionen  $u_n$ :

$$\overline{u_n} = u_n, \text{ und } \|u_n\|_2 := \sqrt{\langle u_n, u_n \rangle} = 1.$$

Gl. für  $u_0$ :  $a^* a u_0 = 0$

Falls  $au_0 \neq 0$ , dann  $a^*(au_0) \neq 0 \Rightarrow au_0 = 0$ , d.h.

$$\left( \frac{3}{2} + \frac{d}{d\frac{3}{2}} \right) u_0 = 0$$

$$\Rightarrow u_0 = c e^{-\frac{1}{2} \frac{3}{2}^2}$$

$$\|u_0\|_2 = 1 \Rightarrow c = \pi^{-1/4} \quad (19)$$

Wegen Lemma und (18)

$$u_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} a^* u_n \quad (20)$$

$$(19) \& (20) \Rightarrow \boxed{u_n = \pi^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^*)^n e^{-\frac{1}{2} \frac{3}{2}^2}} \quad (21)$$

Da  $a^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{3}{2} - \frac{d}{d\frac{3}{2}} \right)$ , haben wir, dass

$$a^* = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{3}{2}^2/2} \left( -\frac{d}{d\frac{3}{2}} \right) e^{-\frac{3}{2}^2/2}, \quad (22)$$

als Operator gl. Daher folgt aus (21) und (22):

$$u_n \left( \frac{3}{2} \right) = \pi^{-1/4} 2^{-\frac{n}{2}} \frac{1}{\sqrt{n!}} e^{\frac{3}{2}^2/2} \left( -\frac{d}{d\frac{3}{2}} \right)^n e^{-\frac{3}{2}^2/2} \quad (23)$$

oder

$$u_n(\zeta) = \pi^{-1/4} 2^{-n/2} \frac{1}{\sqrt{n!}} e^{-\zeta^2/2} H_n(\zeta),$$

wo

$$H_n(\zeta) := e^{\zeta^2} \left( -\frac{d}{d\zeta} \right)^n e^{-\zeta^2} \quad (24)$$

Mit Satz von Cauchy, d. h.

$$f^{(n)}(z) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{f(\xi)}{(\xi - z)^{n+1}} d\xi, \quad (\Gamma \text{ um-} \\ \text{schliesst } z),$$

folgt

$$H_n(\zeta) = e^{\zeta^2} (-1)^n \frac{n!}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{e^{-\xi^2}}{(\xi - \zeta)^{n+1}} d\xi \quad (25)$$

Erzeugende Funktion der Hermite Polynome:

$$\Phi(\zeta, t) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(\zeta) \quad (26)$$

(25) & (26)  $\Rightarrow$

$$\begin{aligned} \underline{\Phi(\zeta, t)} &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} e^{\zeta^2 - \xi^2} \frac{1}{\xi - \zeta} \left( \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{-t}{\xi - \zeta} \right)^n \right) d\xi \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} e^{\zeta^2 - \xi^2} \frac{d\xi}{\xi - (\zeta - t)} = \underline{e^{\xi^2 - (\zeta - t)^2}} \quad (27, \end{aligned}$$

Lemma.  $\langle u_m, u_n \rangle = \delta_{mn}.$

Beweis.  $\langle u_n, u_n \rangle = 1, \forall n, \text{ nach Konstruktion}$

Wegen (17) gilt für  $n \neq 0, m$  beliebig:

$$\begin{aligned} \langle u_m, u_n \rangle &= \frac{1}{n} \langle u_m, a^* a u_n \rangle \\ &\stackrel{\text{2x part. Integrat.}}{=} \frac{1}{n} \langle a^* a u_m, u_n \rangle \\ &\stackrel{(17)}{=} \frac{m}{n} \langle u_m, u_n \rangle \end{aligned}$$

$\Rightarrow \langle u_m, u_n \rangle = 0 \text{ für } m \neq n. \quad \text{Q.E.D.}$

Sei  $L^2(\mathbb{R}, d\mathbb{Z})$  der Hilbertraum der quadratintegrierbaren Funktionen auf  $\mathbb{R}$ , mit Skalarprodukt  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ .

Satz.  $\{u_n\}_{n=0}^{\infty}$  ist ein VONS (insb. eine Basis, in  $L^2(\mathbb{R}, d\mathbb{Z})$ ).

Beweis. 1° Mit Satz von Weierstrass!

2° Mit Fouriertransformation:

$$F(z) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \exp(-izx - \frac{x^2}{2}) \overline{f(x)} dx$$

$F$  ist F.T. von  $\exp(-\frac{x^2}{2}) \overline{f(x)}$



Für  $f \in L^2(\mathbb{R}, dx)$  ist  $F$  eine ganze Funktion von  $z$

$$F^{(n)}(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (-i)^n \int_{\mathbb{R}} x^n e^{-izx - x^2/2} \overline{f(x)} dx \quad (28)$$

Sei nun  $\langle f, u_n \rangle = 0, \forall n = 0, 1, 2, \dots$

$$\Rightarrow F^{(n)}(0) = 0, \forall n, \text{ wegen (23).}$$

$$\Rightarrow F(z) = 0, \forall z$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-izx} \left( e^{-x^2/2} \overline{f(x)} \right) dx = 0, \forall z$$

$$\Rightarrow e^{-x^2/2} \overline{f(x)} = 0, \text{ f.ü.} \Rightarrow f(x) = 0, \text{ f.ü.}$$

$$\Rightarrow f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(z), \text{ f.ü.,}$$

wo  $c_n := \langle f, u_n \rangle$  (wegen Orthonormalität der Fu.  $u_n$ !)

Sei  $f = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n, g = \sum_{n=0}^{\infty} d_n u_n$ . Dann

gilt:

$$\langle f, g \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}_n d_n \quad (\text{Parseval})$$

Allgemeine Lösung der zeitabh. Schrödingergl.

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(x),$$

für  $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}, dx)$ . Dann ist

$$\left. \begin{aligned} \psi(x, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} u_n(x), \\ E_n &= \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \end{aligned} \right\} \quad (30)$$

die allgemeine Lösung der zeitabh. Schrödingergl.

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega : \underline{\text{Nullpunktsenergie.}}$$

Exp. Verifikation: Casimir Effekt, Festkörperphysik

Übung: 1) Herleitung der Planck'schen Strahlungs-

formel aus QM des harmonischen Oszillators.

2) Casimir Effekt.

# Eine Anwendung der Quantenmechanik harmonische

## Oszillatoren: Der Debye-Waller Faktor.

Betrachten einen in ein Kristallgitter eingebauten (angeregten) Atomkern, den wir als harmonischen

Oszillator beschreiben wollen. Darunter verstehen

( wir, dass die Bewegungen in  $x$ -,  $y$ - und  $z$ -Richtung harmonisch sind und entkoppeln. Es genügt

daher, die Bewegung in  $x$ -Richtung zu untersuchen.

die Behandlung der Bewegung in  $y$ - und  $z$ -Richtung geht dann genau so.

( Die Kreisfrequenz der Oszillation in  $x$ -Richtung

sei  $\omega$ . Dimensionslose Grössen:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \xi, \quad p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} = \frac{\hbar}{i} \frac{d\xi}{dx} \frac{d}{d\xi} = -i\alpha \frac{d}{d\xi}$$

$$\text{wo } \alpha = \sqrt{m\omega\hbar}.$$

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

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega \left( a^* a + \frac{1}{2} \right).$$

Damit finden wir:

12

$$x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\alpha} (a + a^*), \quad p = -i \frac{\hbar}{\sqrt{2}} (a - a^*). \quad (31)$$

Translationen im Impulsraum:

Der Operator  $V_\pi$  sei durch

$$(V_\pi \hat{\psi})(p) = \hat{\psi}(p - p_0)$$

definiert. Da

$$\hat{\psi}(p - p_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}} e^{-\frac{ip \cdot x}{\hbar}} \psi(x) dx,$$

folgt

$$V_\pi = e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}} \stackrel{(31)}{=} e^{\frac{i\pi}{\sqrt{2}} (a + a^*)}, \quad (32)$$

$$\pi = \frac{p_0}{\alpha} = \frac{p_0}{\sqrt{m\omega\hbar}} \quad (\text{dimensionslose Impulsvariable})$$

Haben benutzt, dass  $x = i\hbar \frac{d}{dp} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\alpha} (a + a^*)$ .

Die zweite Gl. haben wir in den Übungen bewiesen.

Bei einem Stoß werde auf den Oszillator der (dimensionslose) Impuls  $\pi$  übertragen. Im Hössbauer

Effekt geschieht dies dadurch, dass der angeregte

Kern ein  $\gamma$ -Quant emittiert, dessen Impuls in

10

x-Richtung gerade  $p_x^{\gamma} = -p_0 = -\alpha\pi$  ist.

Der Zustand des Kerns vor dem Stoss sei z. B. durch  $u_n$  beschrieben. Dann ist er, auf grund der Impulserhaltung, nach dem Stoss durch  $V_{\pi} u_n$  beschrieben.

Die Wahrscheinlichkeit,  $w_{nn'}$ , dafür, dass der Kern nach dem Stoss sich bei einer Energiemessung im Zustand  $u_{n'}$  befindet ist quantenmechanisch durch

$$w_{nn'} = |\langle u_{n'}, V_{\pi} u_n \rangle|^2 \quad (33)$$

gegeben. Hier stossen wir auf ein allgemeines

Prinzip: Sei  $A$  eine observable Grösse. Quantenmechanisch wird  $A$  durch einen selbstadjungierten Operator auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  des Systems beschrieben. Ein Operator  $A$  ist selbstadjungiert, falls  $D(A) = D(A^*)$  ( $D(A)$ ; Definitionsbereich von

14

$A$ ), und  $A = A^*$  ist. Ein selbstadjungierter Operator kann immer diagonalisiert werden. Falls das Spektrum von  $A$  diskret ist, so kann  $A$  durch

$$A = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n P_n \quad (34)$$

dargestellt werden, wo  $\alpha_n$  die Eigenwerte von  $A$  sind, und  $P_n$  der orthogonale Projektor auf den Eigenraum von  $A$  zum Eigenwert  $\alpha_n$  ist.

(Sei  $\{u_n^j\}_{j=1}^{k(n)}$  eine (z.B. orthonormale) Basis von Eigenvektoren von  $A$  zum Eigenwert  $\alpha_n$ . Dann

ist  $P_n$  der orthogonale Projektor auf den durch die Vektoren  $u_n^1, \dots, u_n^{k(n)}$  aufgespannten Unterraum von  $\mathcal{H}$ . Man nennt  $\alpha_n$  nicht entartet,

falls  $k(n) = 1$  ist.) Nehmen wir nun an,

das System befinde sich in einem "Zustand"

$\psi \in \mathcal{H}$  zum Zeitpunkt, wo wir die Observable  $A$

messen. Wir möchten die Wahrscheinlichkeit,  $w_n^{A, \psi}$ , dafür angeben, dass wir bei Messung von  $A$  den Wert  $\alpha_n$  finden. Genau wie für Orts- und Impulsmessungen diskutiert, gilt nun das

Prinzip:

$$( \quad w_n^{A, \psi} = \langle \psi, P_n \psi \rangle. \quad (35)$$

Falls der Eigenwert  $\alpha_n$  nicht entartet ist ( $k(n) = 1$ ), so folgt aus (35), dass

$$w_n^{A, \psi} = |\langle \psi, u_n \rangle|^2, \quad (36)$$

( wo  $u_n$  der zum Eigenwert  $\alpha_n$  von  $A$  gehörige Eigenvektor ist. (Denn  $P_n \psi = \langle u_n, \psi \rangle u_n$ !)

Als Spezialfall von (36) finden wir wieder (33).

Nun kehren wir zum Mössbauer Effekt zurück. Wir fragen: Was ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich bei Emission eines  $\gamma$ -Quants mit Impuls  $-p_0$

die Oszillationsenergie des Kerns nicht ändert?

Nach (36), (33) ist diese Wahrscheinlichkeit

$$w_n \equiv w_{nn} = |\langle u_n, V_\pi u_n \rangle|^2, \quad (37)$$

falls der Kern vor der Emission des  $\gamma$ -Quants im Zustand  $u_n$  war. Nun haben wir, dass

$$V_\pi = e^{i\frac{\pi}{\sqrt{2}}(a+a^*)}, \quad [a, a^*] = 1.$$

Es seien  $A$  und  $B$  Operatoren,  $K := [A, B]$ ,

mit  $[A, K] = [B, K] = 0$ . Dann gilt

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-K/2} \quad (38)$$

(Beweis: Übungen!) Wegen (38) gilt also

$$V_\pi = e^{i\frac{\pi}{\sqrt{2}}a^*} e^{i\frac{\pi}{\sqrt{2}}a} e^{-\frac{\pi^2}{4}} \quad (39)$$

Nun gilt  $au_0 = 0$ , also  $e^{i\frac{\pi}{\sqrt{2}}a} u_0 = u_0$ ,

und  $(e^{i\frac{\pi}{\sqrt{2}}a^*})^* = e^{-i\frac{\pi}{\sqrt{2}}a}$ . Damit finden wir

$$w_0 = |\langle u_0, V_\pi u_0 \rangle|^2 = e^{-\pi^2/2}. \quad (40)$$



Die Wahrscheinlichkeit für elastische (resp. rückstossfreie) Streuung von Teilchen ( $\gamma$ -Quanten, Neutronen etc.) an einem harmonischen Oszillator (Kristall) bei Temperatur  $T=0$  ist proportional zu  $w_0$  (Debye - Waller Faktor).

Mit etwas mehr Aufwand kann man den Debye - Waller Faktor für elastische Streuung, resp. rückstossfreie Emission eines  $\gamma$ -Quants, auch für einen Kristall der Temperatur  $T$  berechnen und findet (nach F. Bloch):

$$w(T) = \exp\left(-\frac{\pi^2}{2} \text{Coth} \frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \quad (41)$$

(e.g., Skript von W. Baltensperger!)

Daraus sehen wir, dass die Wahrscheinlichkeit für eine rückstossfreie Mössbauer Emission eines  $\gamma$ -Quants mit zunehmender Temperatur  $T$  abnimmt!

Wir wollen (41) an dieser Stelle nicht herleiten.

## Anhang C.

- Ziel dieses Abschnittes ist es, quantenmechanische Zweikörperprobleme mit kugelsymmetrischem Zweikörperpotential lösen zu lernen. Als wichtigstes Beispiel dazu werden wir die Quantenmechanik des Wasserstoffatoms entwickeln, insbesondere das Balmer-Spektrum und die Rutherford'sche Formel für den Wirkungsquerschnitt herleiten.

- Von nun an bezeichnen  $\vec{x}$  und  $\vec{p}$  Orts- und Impulsoperator, die auf den Hilbertraum der quadratintegrablen Wellenfunktionen wirken. In der Ortsraumdarstellung haben wir

$$x_j : \text{Multiplikationsoperator} \quad (42)$$

$$p_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_j} ;$$

in der Impulsraumdarstellung

$$x_j = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_j} , \quad (43)$$

$p_j$  : Multiplikationsoperator.

Es gelten die Heisenberg'schen Vertauschungsrelationen

$$[p_j, x_k] = \delta_{jk} \frac{\hbar}{i} \quad (44)$$

Gemäss Gl. (83), Kap. 2, ist der Hamiltonoperator für ein Zweiteilchensystem (ohne äusseres e.m. Feld)

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \quad (45)$$

Wir nehmen an, dass

$$V(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = V(\vec{x}_1, -\vec{x}_2); \quad (46)$$

$V$  ist kugelsymmetrisch (rotationsinvariant), falls

$$V(\vec{x}_1, -\vec{x}_2) = V(|\vec{x}_1, -\vec{x}_2|)$$

Es empfiehlt sich, genau wie in der klassischen Mechanik

Schwerpunkts- und Relativkoordinaten zu benutzen:

Schwerpunktsmasse:  $M = m_1 + m_2$  (47)

Reduzierte Masse:  $m = \frac{m_1 m_2}{M}$

Ort des Schwerpunktes:  $\vec{X} = \frac{m_1 \vec{x}_1 + m_2 \vec{x}_2}{M}$  (48)

Relativkoordinaten:  $\vec{x} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$

Schwerpunktsimpuls:  $\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$  (49)

Relativimpuls:  $\vec{p} = \frac{m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2}{M}$  (50) <sup>20.</sup>

Aus (44) folgt nun, dass

$$\begin{aligned} [P_j, X_k] &= [p_{1j} + p_{2j}, \frac{m_1 x_{1k} + m_2 x_{2k}}{M}] \\ &= \delta_{jk} \frac{\hbar}{i} \left( \frac{m_1}{M} + \frac{m_2}{M} \right) = \delta_{jk} \frac{\hbar}{i}, \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} [p_j, x_k] &= \frac{1}{M} [m_2 p_{1j} - m_1 p_{2j}, x_{1k} - x_{2k}] \\ &= \delta_{jk} \frac{\hbar}{i} \frac{1}{M} (m_2 + m_1) = \delta_{jk} \frac{\hbar}{i}, \end{aligned}$$

d.h.  $\vec{P}$  und  $\vec{X}$ , resp.  $\vec{p}$  und  $\vec{x}$  sind zueinander konjugierte Operatoren in dem Sinne, dass für sie wieder die Heisenberg'schen Vertauschungsrelationen gelten. Aus (48) und (42) folgt, dass in der

Ortsraumdarstellung

$$\vec{P} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{X}}, \quad \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \quad (51)$$

Denn

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial \vec{x}_1} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}_2} \right)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial \vec{X}}{\partial \vec{x}_1} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} + \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{x}_1} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \frac{\partial \vec{X}}{\partial \vec{x}_2} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} + \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{x}_2} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) \quad (21)$$

$$= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} + \frac{\hbar}{i} (1-1) \frac{\partial}{\partial \vec{x}} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{X}}$$

Ähnlich verifiziert man die Gl. für  $\vec{p}$ .

Sei  $H_0 = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2}$ . Dann gilt:

$$H_0 = -\hbar^2 \left( \frac{1}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \vec{X}^2} + \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} \right) \quad (52)$$

Dann

$$\frac{\partial}{\partial \vec{x}_1} = \frac{\partial \vec{X}}{\partial \vec{x}_1} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} + \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{x}_1} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} = \frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}}$$

$$\frac{\partial}{\partial \vec{x}_2} = \frac{\partial \vec{X}}{\partial \vec{x}_2} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} + \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{x}_2} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} = \frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} - \frac{\partial}{\partial \vec{x}}$$

$$\Rightarrow H_0 = -\hbar^2 \left( \frac{1}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + \frac{m_1}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \vec{X}^2} + \frac{1}{M} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right. \\ \left. + \frac{1}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + \frac{m_2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \vec{X}^2} - \frac{1}{M} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \frac{\partial}{\partial \vec{X}} \right)$$

woraus (52) unmittelbar folgt.

Der in (45) definierte Hamiltonoperator  $H$  hat

also die Form

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \vec{X}^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + V(\vec{x}) \quad (53)$$

und wirkt auf Wellenfunktionen

$$\begin{aligned}\psi(\vec{X}, \vec{x}) &\in \mathcal{H}_2 \simeq L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, d^3X d^3x) \\ &= L^2(\mathbb{R}^3, d^3X) \otimes L^2(\mathbb{R}^3, d^3x).\end{aligned}$$

(Man bemerke, dass die Transformation (48) die Jacobi-Determinante 1 hat, so dass  $d^3x_1 d^3x_2 = d^3X d^3x$ .)

Nun betrachten wir die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{X}, \vec{x}, t) = \left[ \left( -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \vec{X}^2} \right) + \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + V(\vec{x}) \right) \right] \psi(\vec{X}, \vec{x}, t) \quad (54)$$

Zur Lösung machen wir den Separationsansatz:

$$\psi(\vec{X}, \vec{x}, t) = \Phi(\vec{X}, t) \varphi(\vec{x}, t). \quad (55)$$

Eingesetzt in (54) folgen die zwei Gleichungen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\vec{X}, t) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \vec{X}^2} \Phi(\vec{X}, t) \quad (56)$$

(Freie Schrödingergl. für Schwerpunktsbewegung)

und

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\vec{x}, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + V(\vec{x}) \right) \varphi(\vec{x}, t) \quad (57)$$

Die allgemeine Lösung von (54) ist eine Linearkombination von Lösungen der Form (55); (Superpositionsprinzip)

Wir setzen  $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2}$ ,  $H_r = H_0 + V$ ; 23.

("r" für "relativ"). Wir wollen nun fragen, unter welchen Annahmen über  $V$  die Gl. (57) globale Lösungen hat. Sei  $A$  ein Operator, der auf einem im Hilbertraum  $\mathcal{H}$  dicht liegenden Bereich  $D(A)$  definiert und abgeschlossen ist.  $A$  ist selbstadjungiert, falls  $D(A^*) = D(A)$  und  $A = A^*$  auf  $D(A)$ . Wir betrachten die Schrödingergl.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = H \psi_t, \quad \psi_t \in \mathcal{H}. \quad (58)$$

Satz 1. Falls der Operator  $H$  selbstadjungiert ist, hat die Gl. (58) globale Lösungen:

$$\psi_t = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \psi_0, \quad \text{wo } \{e^{-\frac{iHt}{\hbar}}; t \in \mathbb{R}\} \quad (59)$$

eine auf dem ganzen Hilbertraum  $\mathcal{H}$  definierte, einparametrische, unitäre Gruppe ist; insb. ist sie linear und erhält das Skalarprodukt von  $\mathcal{H}$ :

$$\langle \psi_t, \varphi_t \rangle = \langle \psi_0, \varphi_0 \rangle, \quad \forall t.$$

Ein Operator  $U$  auf  $\mathcal{H}$  ist unitär, falls  $U$  linear

ist und  $U^* = U^{-1}$ . Dann folgt

$$\langle U\psi, U\varphi \rangle = \langle \psi, U^* U \varphi \rangle = \langle \psi, U^{-1} U \varphi \rangle = \langle \psi, \varphi \rangle.$$

Nun fragen wir, wann der Hamiltonoperator  $H_r = H_0 + V$  selbstadjungiert ist. Für  $V=0$ ,  $H_r = H_0$ , haben wir diese Frage in Abschnitt 2.2 durch explizite Rechnung beantwortet, (Gln. (34) - (37)). Ein effizientes Kriterium für die Selbstadjungiertheit von  $H_r$  ist im folgenden Satz formuliert.

Satz 2. (Kato-Kriterium) Falls für alle  $\varphi \in D(H_0)$

$$\|V\varphi\| \leq a \|H_0\varphi\| + b \|\varphi\|, \quad (60)$$

wo  $a < 1$  und  $b < \infty$ , dann ist  $H_{rel.} = H_0 + V$  selbstadjungiert auf  $D(H_0)$ , (und (58) hat eine globale, die Norm von  $\psi$  erhaltende Lösung).

In der folgenden Diskussion sei (60) stets vorausgesetzt. Wir wollen nun das Verhalten der Lösungen der Schrödinger gl. (58) für  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$  und  $H = H_r = H_0 + V$  untersuchen.



(1) Gebundene Zustände:  $\psi_t$  ist eine gebundene Lösung von (58), falls  $\forall \varepsilon > 0$  ex.  $R < \infty$  so, dass

$$\sup_{t \in \mathbb{R}} \int_{|\vec{x}| \geq R} |\psi_t(\vec{x})|^2 d^3x \leq \varepsilon \quad (61)$$

(2) Entweichende Zustände (Streu Lösungen):  $\psi_t$  ist eine "entweichende" oder "ungebundene" Lösung von (58), falls  $\forall R < \infty$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_{|\vec{x}| \leq R} |\psi_t(\vec{x})|^2 d^3x = 0 \quad (62)$$

Eine Lösung von (58) heisst stationär, falls

$$\psi_t(\vec{x}) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} u(\vec{x}), \quad (63)$$

wo  $u$  zeitunabhängig ist. Die Funktion  $u$  erfüllt dann die zeitunabhängige Schrödinger Gleichung

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + V(\vec{x}) \right) u(\vec{x}) = E u(\vec{x}) \quad (64)$$

Eine Lösung,  $u_E$ , von (64) ist eine Eigenfunktion von  $H_r = H_0 + V$ , falls  $u_E \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ ;  $E$  heisst dann Eigenwert von  $H_r$ .

Der Abschluss der Menge aller Eigenwerte von  $H_r$  heisst diskretes Spektrum,  $\sigma_d(H_r)$ , von  $H_r$ .

Seien  $u_E, u_{E'}$  zwei Eigenfunktionen von  $H_r$  mit  $E \neq E'$

Dann gilt

$$\begin{aligned} E \langle u_{E'}, u_E \rangle &= \langle u_{E'}, H_r u_E \rangle = \langle H_r u_{E'}, u_E \rangle \\ &= E' \langle u_{E'}, u_E \rangle. \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (E - E') \langle u_{E'}, u_E \rangle = 0 \Rightarrow \langle u_{E'}, u_E \rangle = 0, \quad (65)$$

d.h. Eigenfns. zu verschiedenen Eigenwerten von  $H_r$  sind orthogonal.  $E$  heisst entartet, falls (64) mehrere

linear unabhängige Lösungen hat. Diese kann man

dann vermöge der Linearität von (64) (Superpositionsprinzip) orthonormieren; (Gram-Schmitt Verfahren). Es

folgt, dass es im Unterraum  $\mathcal{H}_d$  von  $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$  der

Eigenfunktionen von  $H_r$  eine orthonormale Basis  $\{u_n(\vec{x})\}_{n=1}^\infty$

gibt.

Satz 3. Es gelte (60);  $\psi_{\vec{x}}$  ist eine gebundene Lösung

$$\text{von (58)} \Leftrightarrow \psi_{\vec{x}}(\vec{x}) = \sum_n c_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} u_n(\vec{x}), \quad (66)$$

258  $E_n$ : Eigenwert von  $H_n$  zur Eigenf.  $\psi_n$

$$c_n = \langle \psi_n, \psi_{t=0} \rangle, \quad \sum_n |c_n|^2 = \|\psi_0\|^2. \quad (67)$$

Satz 4. (Ruelle) Es gelte (60);  $\psi_t$  ist eine entweichende Lösung von (58)  $\Leftrightarrow \psi_0 \perp \mathcal{H}_d$ .

Korollar.  $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) = \underbrace{\{\text{gebundene Zust.}\}}_{\mathcal{H}_d} \oplus \underbrace{\{\text{entw. Zust.}\}}_{\mathcal{H}_d^\perp}$

### ●) Stationäre Beschreibung entweichender Lösungen.

Gegeben seien  $H_r$  und Energie  $E \in \mathbb{R}$ . Die Folge  $\{\psi_n\}_{n=0}^\infty$  ist eine Weyl Folge zu  $(H_r, E)$ , falls

$$\left. \begin{aligned} \|\psi_n\| &= 1, \text{ für alle } n, \\ \int_{|\vec{x}| \leq R} |\psi_n(\vec{x})|^2 d^3x &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0, \quad \forall R < \infty \end{aligned} \right\} \quad (68)$$

$$\| (H - E) \psi_n \| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

Man sagt, eine Energie  $E$  gehöre zum Spektrum,  $\sigma(H_r)$ ,

von  $H_r$ , falls  $H - E$  keinen beschränkten inversen

Operator hat. Falls  $E \in \sigma(H_r)$ , aber  $E$  kein Eigenwert

von  $H_r$  ist ( $E \notin \sigma_d(H_r)$ ), dann sagt man  $E$  gehöre zum

kontinuierlichen Spektrum,  $\sigma_c(H_r)$ , von  $H_r$ .

Man hat dann, dass

$$\sigma(H_r) = \sigma_d(H_r) \cup \sigma_c(H_r). \quad (69) \quad \underline{28.}$$

### Satz 5. (Weyl Kriterium)

$E$  gehört zum kontinuierlichen Spektrum von  $H_r \Leftrightarrow$

$E$  gibt zu  $(H_r, E)$  eine Weyl-Folge  $\{\psi_n\}$ .

Satz 6.  $E$  gehört zum Spektrum von  $H_r \Leftrightarrow$  Die Gl.

(64) hat mindestens eine lokal quadratintegrierbare,

polynomial beschränkte Lösung  $u_E$ , (d.h.  $|u_E(\vec{x})|/(|\vec{x}|+1)^{-1}$

ist in  $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ , für ein  $N < \infty$ ).

Jede Wellenfunktion  $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$  kann nach den

polynomial beschränkten Lösungen der stationären Schrö-

dingergl. (64), mit  $E \in \sigma(H_r)$ , entwickelt werden; ("Voll-

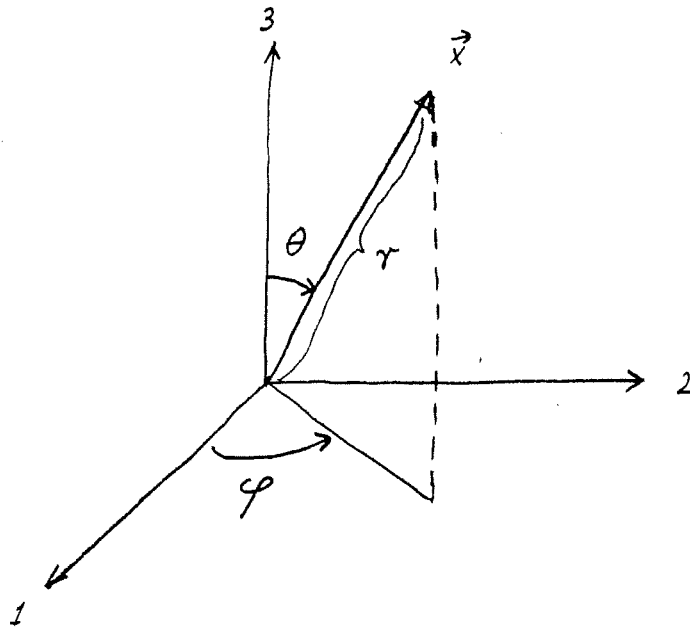
ständigkeit der Lösungen von (64)").

Die Beweise der Sätze 1-6 gehört in eine Vorlesung  
über Funktionalanalysis.

Nun wollen wir (64) für alle  $E \in \sigma(H_r)$  für den  
Fall lösen, dass  $V(\vec{x}) = V(|\vec{x}|)$  kugelsymmetrisch ist.

Dazu benutzen wir sphärische Polarkoordinaten:

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta \quad (70)$$



Wir drücken  $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$  in Polarkoordinaten aus:

Falls wir im klassischen Ausdruck für den Drehimpuls  $\vec{L}$  den Impuls  $\vec{p}$  durch den Operator  $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}}$  ersetzen, erhalten wir den Drehimpulsoperator

$$\vec{L} = \vec{x} \wedge \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \quad (71)$$

Durch Umrechnen auf Polarkoordinaten findet man

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \Lambda, \quad \text{wo } \Lambda = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (72)$$

der Laplace Operator auf der Kugel  $S^2$  ist. Wir finden dann

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Lambda, \quad (73)$$

also

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2mr^2} \vec{L}^2 \quad (74)$$

Die Gleichung

$$(H_0 + V(r)) \varphi(r, \theta, \varphi) = E \varphi(r, \theta, \varphi) \quad (75)$$

lösen wir wieder durch einen Separationsansatz;

$$\varphi(r, \theta, \varphi) = X(r) Y(\theta, \varphi) \quad (76)$$

Sei  $Y(\theta, \varphi)$  eine Eigenfunktion des Operators  $\Lambda$  zum Eigenwert  $-l(l+1)$ , wo  $l$  zunächst noch unbekannt ist. Dann folgt aus (75) die Gl. für  $X$ :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) \right] X(r) = E X(r) \quad (77)$$

Bevor wir (77) lösen, müssen wir nun die Eigenwerte und Eigenfunktionen von  $\Lambda$  bestimmen. Das führt uns auf die Theorie der Kugelfunktionen, die wir schon aus der Vorlesung über Elektrodynamik kennen.

Der im Studium des Operators  $\Lambda$  natürliche Hilbertraum ist  $L^2(S^2, d\Omega)$ , wo

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi,$$

$0 \leq \theta \leq \pi$ ,  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ . Man sieht leicht, dass

$\Lambda$  auf  $L^2(S^2, d\Omega)$  symmetrisch (tatsächlich selbst-

adjungiert) und strikte negativ ist. Wir wollen nun das Eigenwertproblem

$$\Delta Y = -\lambda Y, \quad Y \in L^2(S^2, d\Omega) \quad (78)$$

allgemein lösen. Da  $\Delta \leq 0$ , (d.h.  $\langle \psi, \Delta \psi \rangle \leq 0$ ,  $\forall \psi \in L^2(S^2, d\Omega)$ ), ist  $\lambda \geq 0$ , und wir können  $\lambda = l(l+1)$  schreiben. Mit (73) und (78) finden wir,

● dass

$$\Delta(r^l Y) = [l(l-1) + 2l - l(l+1)] r^{l-2} Y = 0, \quad (79)$$

d.h. wenn  $Y$  eine Lösung zum Eigenwertproblem (78) mit Eigenwert  $-\lambda = -l(l+1)$  ist, dann ist  $r^l Y$  eine harmonische Funktion. Die harmonischen Funktionen

des Laplace-Operators können wie folgt bestimmt werden: Sei  $f(u, t)$  eine glatte Funktion von  $u$  und  $t$ ;  $u \in \mathbb{C}$ ,  $t \in [-\pi, \pi]$ . Wir definieren

$$F(\vec{x}) = \int_{-\pi}^{\pi} f(z + ix \cos t + iy \sin t, t) dt \quad (80)$$

Dann erfüllt  $F$  die Laplace-Gleichung:

$$\Delta F = \int_{-\pi}^{\pi} (1 - \cos^2 t - \sin^2 t) \frac{\partial^2 f}{\partial^2}(\dots, t) dt = 0$$

Die harmonischen Funktionen, die zu Eigenfunktionen von  $\Delta$  gehören, sind homogen in  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ ; siehe (79).

Daher müssen wir  $f(u, t)$  von der Form

$$f(u, t) = u^l g(t) \quad (81)$$

wählen, mit  $g(t)$  periodisch auf  $[-\pi, \pi]$ .

Für  $l = 0, 1, 2, \dots$  konstruieren wir  $(2l+1)$  homogene Polynome vom Grad  $l$ , die harmonisch sind:

$$P_l^m(\vec{x}) = \int_{-\pi}^{\pi} (z + ix \cos t + iy \sin t)^l e^{imt} dt, \quad (82)$$

$m = -l, -l+1, \dots, l$ . (Für  $|m| > l$  ist (82) offensichtlich  $= 0$ !) Für  $\vec{x} = r(\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$  finden wir

$$P_l^m(\vec{x}) = r^l Y_l^m(\theta, \varphi), \text{ wo}$$

$$\begin{aligned} \sqrt{4\pi} Y_l^m(\theta, \varphi) &= \int_{-\pi}^{\pi} (\cos \theta + i \sin \theta \cos(t - \varphi))^l e^{imt} dt \\ &= \int_{-\pi - \varphi}^{\pi - \varphi} (\cos \theta + i \sin \theta \cos \tau)^l e^{im(\tau + \varphi)} d\tau \\ &= e^{im\varphi} \int_{-\pi}^{\pi} (\cos \theta + i \sin \theta \cos \tau)^l e^{im\tau} d\tau, \end{aligned} \quad (83)$$

und in der letzten Gl. haben wir die Periodizität des Integranden zum Verschieben der Integrationsgrenzen benutzt.



Die Funktionen  $Y_l^m$  heissen Kugelfunktionen und sind Eigenfunktionen von  $\Delta$  zum Eigenwert  $-l(l+1)$ ;  $l=0, 1, 2, \dots$ .

Eigenschaften der Kugelfunktionen:

(1)  $\{Y_l^m\}_{m=-l}^l$  sind linear unabhängig.

(2)  $\int \overline{Y_l^m} Y_{l'}^{m'} d\Omega = \delta^{mm'} \delta_{ll'}$ , (Orthogonalität)

(Orth. in  $m, m'$ :  $\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi} d\varphi = \delta^{mm'}$ !)

Orth in  $l, l'$ : Da  $\Delta$  symm. und  $Y_l^m, Y_{l'}^{m'}$  zu versch. Eigenwerten von  $\Delta$  gehören, falls  $l \neq l'$ , sind  $Y_l^m, Y_{l'}^{m'}$  zu einander orthogonal!)

(3)  $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \varphi) \Rightarrow Y_l^m(\theta, \varphi)$

ist Eigenfu. von  $L_z$  zum Eigenwert  $\hbar m$ .

(4) Parität: Für  $(\theta, \varphi) \mapsto (\pi - \theta, \varphi + \pi)$

$$Y_l^m(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_l^m(\theta, \varphi);$$

(aus 1. Gl. in (83)!) )

(5)  $\overline{Y_l^m(\theta, \varphi)} = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta, \varphi)$

34.

(6) Vollständigkeit: Die Funktionen  $\{Y_l^m\}$ ,

$m = -l, -l+1, \dots, l, \quad l = 0, 1, 2, \dots$  bilden ein VONS im Hilbertraum  $L^2(S^2, d\Omega)$ . (Kann mit Hilfe des Satzes von Weierstrass bewiesen werden!)

$$\Rightarrow \sigma(\Lambda) = \{-l(l+1)\}_{l=0}^{\infty}.$$

(7) Zusammenhang mit Legendre Polynomen:

Def.  $P_l(z) = \frac{1}{l! 2^l} \frac{d^l}{dz^l} (z^2-1)^l, \quad -1 \leq z \leq 1.$  (84)

$$P_l^m(z) = (-1)^m (1-z^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dz^m} P_l(z)$$

Für  $z = \cos \theta$  findet man (mit Hilfe des Satzes von Cauchy):

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \left[ \frac{2^{l+1}}{4\pi} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (85)$$

insbesondere

$$Y_l^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2^{l+1}}{4\pi}} P_l(\cos \theta), \quad (86)$$

$l = 0, 1, 2, \dots$

(8) Additions theorem:

$$\sum_l \overline{Y_l^m(\vec{n})} Y_l^m(\vec{n}') = \frac{2^{l+1}}{4\pi} P_l(\cos \angle(\vec{n}, \vec{n}')), \quad (87)$$

wo  $\vec{n}, \vec{n}'$  Einheitsvektoren im  $\mathbb{R}^3$  sind.

Nach diesem kurzen Exkurs in die Theorie der Kugelfunktionen kehren wir nun zum Studium der radialen Schrödingergl. (77) zurück: Für

$$\varphi(r, \theta, \varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi) \chi_l(r)$$

erfüllt  $\chi_l(r)$  die Gl.:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) \right] \chi_l(r) = E_l \chi_l(r) \quad (88)$$

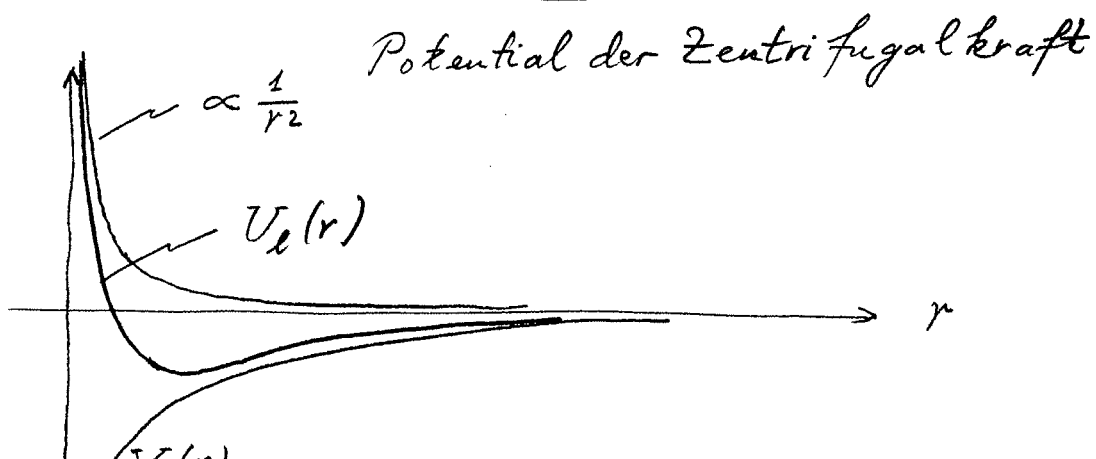
Setzen wir

$$y_l(r) = r \chi_l(r),$$

so finden wir

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U_l(r) \right] y_l(r) = E_l y_l(r), \quad (89)$$

$$U_l(r) = \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2}} + V(r)$$



Gl. (89) beschreibt ein eindimensionales q.m. Problem im Potential  $U_\ell(r)$ , das bei  $r=0$  wie  $\frac{1}{r^2}$  nach  $+\infty$  divergiert, (für  $|V(r)| < \frac{a}{r^{2-\varepsilon}}$ ,  $\varepsilon > 0$ , bei  $r \approx 0$ ).

Mit Hilfe von Satz 5 (Weyl Kriterium) zeigt man leicht, dass für Potentiale  $V(r)$ , die für  $r \rightarrow \infty$  gegen 0 streben, jedes  $E = E_\ell \geq 0$  zum kontinuierlichen Spektrum des radialen Schrödinger Operators

$$h_\ell \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + U_\ell(r)$$

gehört, (wo  $\frac{d^2}{dr^2}$  mit Dirichlet Randbed. bei  $r=0$  definiert und auf  $L^2([0, \infty), dr)$  selbstadjungiert ist). Aus Satz 6 folgt dann, dass (89) zu jeder Energie  $E = E_\ell > 0$  mindestens eine polynomial beschränkte Lösung besitzt.

Es ist auch leicht zu zeigen, dass es zu  $(h_\ell, E)$ ,  $E < 0$ , keine Weyl Folgen gibt. Daher sind beschränkte Lösungen von (89) zu  $E_\ell < 0$  automatisch Eigenfunktionen. Solche gibt es nur, wenn

$V(r)$  wenigstens stückweise negativ ist. Dann kann man versuchen, die Existenz von Lösungen von (89) zu  $E_\ell < 0$  mit dem folgenden Prinzip nachzuweisen: Falls es eine Wellenfunktion  $y_\ell \in L^2([0, \infty), dr)$  gibt, für welche

$$\langle y_\ell, h_\ell y_\ell \rangle < 0,$$

dann hat (89) mind. eine Lösung für ein  $E_\ell < 0$ .

Beschränkte Lösungen von (89) können mit Hilfe der Theorie der gewöhnlichen Differentialgl. konstruiert werden, für alle  $E_\ell \in \sigma(h_\ell)$ ; (Jost Theorie). Bevor wir uns dieser Angelegenheit annehmen, wollen wir aber ein Beispiel diskutieren: H-Atom; (siehe Kap. 3).

## 6. Quantenmechanischer Drehimpuls; Teilchen mit Spin

---

### 6.1 Einführung

In diesem Kapitel untersuchen wir eine spezielle Gruppe sog. dynamischer Symmetrien abgeschlossener quantenmechanischer Vielteilchensysteme mit sphärisch-symmetrischen Potentialkräften: Die Gruppe,  $SO(3)$ , der Drehungen des physikalischen Raums.

---

Ein Beispiel eines solchen Systems ist:

$$\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_N := L^2(\mathbb{R}^{3N}, \prod_{j=1}^N d^3x_j) = \bigotimes_{j=1}^N L^2(\mathbb{R}^3, d^3x_j) \quad (6.1)$$

Die Dynamik des Systems wird durch einen Hamiltonoperator,  $H$ , erzeugt, der die Form

$$H = T + V, \quad T = \sum_{j=1}^N \frac{\vec{p}_j^2}{2m_j}, \quad \vec{p}_j = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_j \quad (6.2)$$

hat (Ortsraumdarstellung), mit

$$V = V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \equiv V(\vec{x}), \quad (6.3)$$

für ein Potential  $V$ , das invariant unter Euklidischen Bewegungen ist:

---

$$V(R\vec{x}_1 + \vec{a}, \dots, R\vec{x}_N + \vec{a}) = V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N), \quad (6.4)$$

für alle  $R \in SO(3)$ ,  $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$ .

Die Selbstadjungiertheit von  $H$ ,  $H = H^*$  auf  $\mathcal{D}(H)$ ,  
wird z. B. mit Hilfe des Satzes von Kato, den wir  
in App. B diskutiert haben, studiert. Falls  $H$  s.a. ist,  
dann ist die Zeitevolution des Systems durch

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t\right) \quad (5)$$

(Schrödinger Bild) gegeben. Unter den Voraussetzun-  
gen des Satzes von Kato ( $\|V\psi\| \leq a\|T\psi\| + b\|\psi\|$ ,  
 $a < 1$ ,  $b < \infty$ ,  $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N})$ ) folgt aus (4), dass  
 $U(t)$  mit den Euklidischen Bewegungen von  $\mathbb{R}^3$  ver-  
tauscht: Wir definieren

$$(U(R, \vec{a})\psi)(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) := \psi(R^{-1}(\vec{x}_1 - \vec{a}), \dots, R^{-1}(\vec{x}_N - \vec{a})) \quad (6)$$

Man verifiziert leicht, dass

$$\begin{aligned} (a) \quad U(R_1, \vec{a}_1) U(R_2, \vec{a}_2) &= U((R_1, \vec{a}_1) \circ (R_2, \vec{a}_2)) \\ &= U(R_1 R_2, \vec{a}_1 + R_1 \vec{a}_2). \end{aligned}$$

$$(b) \quad U(\mathbb{1}, \vec{0}) = \mathbb{1}.$$

$$(c) \quad U(R, \vec{a})^{-1} = U((R, \vec{a})^{-1}) = U(R^{-1}, -R^{-1}\vec{a}).$$

$$(d) \quad U(R, \vec{a}) \text{ ist unitär, } \forall R \in SO(3), \vec{a} \in \mathbb{R}^3.$$

$$(e) \quad U(R, \vec{a}) \text{ ist "stark" stetig in } R \text{ und } \vec{a}.$$

Der Beweis von (d) folgt aus der Bemerkung, dass die Jacobi Determinante

$$\left| \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{y}} \right| = 1, \quad \text{für } \vec{y} = R^{-1}(\vec{x} - \vec{a}).$$

Auf dem in  $\mathcal{H}$  dichten Bereich  $\mathcal{I}(\mathbb{R}^{3N})$  gilt

$$(f) U(R, \vec{a}) \vec{x}_j U(R, \vec{a})^{-1} = R^{-1}(\vec{x}_j - \vec{a}), \quad \forall j$$

$$(g) U(R, \vec{a}) \vec{p}_j U(R, \vec{a})^{-1} = R^{-1} \vec{p}_j, \quad \forall j,$$

$$\Rightarrow U(R, \vec{a}) T U(R, \vec{a})^{-1} = T$$

$$(h) U(R, \vec{a}) V U(R, \vec{a})^{-1} = V, \quad \text{und (unter den}$$

Voraussetzungen des Satzes von Kato)

$$U(R, \vec{a}) U(t) U(R, \vec{a})^{-1} = U(t). \quad (7)$$

Der Generator der Untergruppe der Raumtranslationen ist

$$\vec{P} = \sum_{j=1}^N \vec{p}_j \quad (\text{Totalimpuls}), \quad (8)$$

$$\text{d.h.} \quad U(1, \vec{a}) = \exp(i \vec{a} \cdot \vec{P} / \hbar) \quad (9)$$

Die Theorie der Darstellungen der Gruppe der Raumtranslationen ist die Theorie der Fouriertransformation



Ihnen noch weniger gut bekannt dürfte die Theorie der Darstellungen von  $SO(3)$  sein. Sei  $R(\vec{e}, \alpha)$  eine Drehung von  $\mathbb{R}^3$  mit Drehachse  $\vec{e} \in S^2$  und Drehwinkel  $\alpha$ . Es gilt

$$R(\vec{e}, \alpha) = \exp(\alpha \vec{I} \cdot \vec{e}), \quad \vec{I} = (I_1, I_2, I_3), \quad (10)$$

wo

$$I_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Die Matrizen  $\{I_1, I_2, I_3\}$  (infinitesimale Erzeugend der Rotationen um  $x$ -,  $y$ -, resp.  $z$ -Achse) bilden eine Basis der Liealgebra,  $\mathfrak{so}(3)$ , von  $SO(3)$ . Die Gl. (10) dürfte aus der linearen Algebra oder der Vorlesung über Mechanik bekannt sein.

$\{U(R(\vec{e}, \alpha))\}$  ist eine einparametrische, unitäre Gruppe auf  $\mathcal{H}$ . Nach dem Stone'schen Satz gilt deshalb:

$$U(R(\vec{e}, \alpha)) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \alpha L(\vec{e})\right), \quad (12)$$

wo  $L(\vec{e})$  ein selbstadjungierter Operator auf  $\mathcal{H}$  ist mit

$$L(\vec{e})\psi = i\hbar \frac{d}{d\alpha} U(R(\vec{e}, \alpha))\psi|_{\alpha=0}, \quad (13)$$

für jedes  $\psi \in D(L(\vec{e}))$ . Sei  $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{3N})$ . Dann ist

$$\begin{aligned} L(\vec{e})\psi &= i\hbar \frac{d}{d\alpha} \psi(R^{-1}(\vec{e}, \alpha)\underline{x})|_{\alpha=0} \\ &= i\hbar \underline{\nabla} \psi \cdot \frac{d}{d\alpha} R^{-1}(\vec{e}, \alpha)\underline{x}, \end{aligned} \quad (14)$$

wo  $R\underline{x} = (R\vec{x}_1, \dots, R\vec{x}_N)$ ,  $\underline{\nabla} = (\vec{\nabla}_1, \dots, \vec{\nabla}_N)$ .

Nun gilt nach (10) und (11), dass

$$\frac{d}{d\alpha} R(\vec{e}, \alpha)|_{\alpha=0} = \vec{I} \cdot \vec{e} = \begin{pmatrix} 0 & -e_3 & e_2 \\ e_3 & 0 & -e_1 \\ -e_2 & e_1 & 0 \end{pmatrix},$$

also

$$\frac{d}{d\alpha} R^{-1}(\vec{e}, \alpha)\vec{x} = -(\vec{I} \cdot \vec{e})\vec{x} = -\vec{e} \wedge \vec{x}.$$

Daher

$$\frac{d}{d\alpha} R^{-1}(\vec{e}, \alpha)\underline{x} = -(\vec{e} \wedge \vec{x}_1, \dots, \vec{e} \wedge \vec{x}_N).$$

Damit folgt aus (14), dass

$$\begin{aligned} L(\vec{e})\psi &= -i\hbar \sum_{j=1}^N (\vec{e} \wedge \vec{x}_j) \cdot (\vec{\nabla}_j \psi)(\underline{x}) \\ &= \vec{e} \cdot \left( \sum_{j=1}^N \vec{x}_j \wedge \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_j \psi \right)(\underline{x}), \end{aligned} \quad (15)$$

d. h.

$$L(\vec{e}) = \vec{e} \cdot \vec{L}, \quad \vec{L} = \sum_{j=1}^N \vec{x}_j \wedge \vec{p}_j. \quad (16)$$

Der Vektoroperator  $\vec{L} = (L_1, L_2, L_3)$  heisst

Bahndrehimpulsoperator, und aus (f), (g) und (16)

folgt, dass

$$U(R) \vec{L} U(R^{-1}) = R^{-1} \vec{L}. \quad (17)$$

Nach (13) gilt, dass

$$L_k = i\hbar \frac{d}{d\alpha} U(R(\vec{e}_k, \alpha)) \Big|_{\alpha=0} \equiv i\hbar dU(I_k), \quad (18)$$

$k=1,2,3$ . Die Lie algebra  $so(3)$  ist durch die VR (Vertauschungsrelationen)

$$[I_i, I_j] = \sum_k \varepsilon_{ijk} I_k, \quad \varepsilon_{ijk} = \text{sign} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ i & j & k \end{pmatrix}, \quad (19)$$

oder

$$[\vec{I} \cdot \vec{e}, \vec{I} \cdot \vec{e}'] = (\vec{e} \wedge \vec{e}') \cdot \vec{I}$$

charakterisiert. Da  $\{U(R); R \in SO(3)\}$  eine Darstellung von  $SO(3)$  auf  $\mathcal{H}$ , also  $dU$  eine Darstellung von  $so(3)$  auf  $\mathcal{H}$ , ist, folgt aus (18) und (19):

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k, \quad (20)$$

was man auch durch direktes Nachrechnen verifizieren kann, indem man

$$[p_j^i, x_k^l] = \frac{\hbar}{i} \delta^{il} \delta_{jk}$$

benutzt.

Da  $U(R(\vec{e}, \alpha)) U(t) = U(t) U(R(\vec{e}, \alpha))$ ,  $\forall \vec{e}$

(siehe (7)), folgt

$$\vec{e} \cdot \vec{L} U(t) = U(t) \vec{e} \cdot \vec{L}, \quad \forall \vec{e}, \quad (21)$$

d.h. für die hier betrachteten Systeme kommutiert der totale Bahndrehimpulsoperator  $\vec{L}$  mit der Zeitevolution, d.h.  $\vec{L}$  ist Integral der Bewegung.

Falls  $E$  ein diskreter Eigenwert des Hamiltonoperators  $H$  ist, so folgt aus (21), dass der zu  $E$  gehörige Eigenraum von  $H$  unter  $\vec{L}$  und  $U(R)$ ,  $R \in SO(3)$ , invariant ist, d.h. die Darstellung von  $SO(3)$  auf  $\mathcal{H}$  reduziert.

---

Wir wollen nun unsere Betrachtungen in einen etwas allgemeineren Rahmen stellen. Als Folge werden wir auf eine Verallgemeinerung der Wellenmechanik auf Teilchen mit innerem Drehimpuls, oder Spin, gelangen. Die Existenz des Spins wurde ursprünglich

von Pauli aus den spektroskopischen Daten für Alkali Metalle abgeleitet, der dann später auch die darstellungstheoretische Interpretation des Spins fand.

Wir nennen eine Gruppe  $G$  eine Symmetriegruppe eines q.m. Systems  $S$ , wenn zu jedem  $g \in G$  eine Symmetrietransformation  $\sigma_g$  von  $S$ , im Sinne von Kap. 5, gehört so, dass

$$\sigma_{g_1} \circ \sigma_{g_2} = \sigma_{g_1 \cdot g_2} \quad (22)$$

Nach dem Satz von Wigner gehört zu jeder Symmetrie  $\sigma_g$  ein Operatorstrahl

$$\underline{U}(g) = \{ e^{i\alpha} U(g) : \alpha \in \mathbb{R} \},$$

wo  $U(g)$  unitär oder anti-unitär auf  $\mathcal{H}$  ist.

Wählen wir aus  $\underline{U}(g)$  einen Repräsentanten  $U(g)$  aus,  $\forall g \in G$ , so erhalten wir aus (22) lokal:

$$U(g_1) U(g_2) = \omega(g_1, g_2) U(g_1 \cdot g_2), \quad (23)$$

mit  $|\omega(g_1, g_2)| = 1$ . Man nennt eine Darstellung

$U$  von  $G$ , die (23) erfüllt eine projektive - oder Strahldarstellung von  $G$  auf  $\mathcal{H}$  (durch unitäre und/oder anti-unitäre Operatoren  $U(g)$ ). Falls man eine Phasenfunktion  $\phi$  auf  $G$  so wählen kann dass, für  $U'(g) = \phi(g) U(g)$ ,

$$U'(g_1)U'(g_2) = U'(g_1 \cdot g_2),$$

d.h.

$$\omega(g_1, g_2) = \frac{\phi(g_1)\phi(g_2)}{\phi(g_1 \cdot g_2)}, \quad (24)$$

dann heisst  $U'$  eine Darstellung von  $G$ , und man nennt  $\omega(g_1, g_2)$  einen "trivialen Faktor" von  $G$

Sei  $M$  ein topologischer Raum. Ein Raum  $M'$ , zusammen mit einer surjektiven Abbildung  $\pi : M' \rightarrow M$ , heisst Überlagerung von  $M$ , falls es für jeden Punkt  $p \in M$  eine offene Umgebung  $U$  von  $p$  gibt so, dass  $\pi^{-1}(U)$  eine endliche oder abzählbar unendliche Vereinigung von zu  $U$  homöomorphen Teilmengen von  $M'$  ist.

Falls  $M = G$  eine Gruppe ist, so heisst  $\tilde{G}$  eine Überlagerungsgruppe von  $G$ . Falls  $M' \equiv \tilde{M}$  einfach zusammenhängend ist ( $\pi_1(\tilde{M}) = \{0\}$ ), dann heisst  $(\tilde{M}, \pi)$  universelle Überlagerung von  $M$ ;  $\tilde{G}$  heisst dann universelle Überlagerungsgruppe von  $G$ .

Elemente von  $\tilde{G}$  sind Paare  $(g, \gamma)$ ,  $g \in G$ ,  $\gamma \in \pi_1(G)$ , mit der Multiplikation

$$(g_1, \gamma_1)(g_2, \gamma_2) = (g_1 g_2, \gamma_1 \cdot \gamma_2)$$

und der Projektion  $\pi(g, \gamma) = g$ . Die Untergruppe  $N := \{(e, \gamma) : e = \text{Neutral el. von } G, \gamma \in \pi_1(G)\}$

ist ein Normalteiler von  $\tilde{G}$ , der isomorph zu  $\pi_1(G)$  ist. Für Gruppen ist  $\pi_1(G)$  abelsch; ja  $N$  ist ein sog. "zentraler Normalteiler". Es gilt dann

$$G \cong \tilde{G} / N.$$

Von V. Bargmann (Ann. Math. 59, 1 (1954)) stammt der folgende Satz, den wir hier nicht beweisen können

Satz. Jede stetige projektive Darstellung einer kompakten, zusammenhängenden Gruppe  $G$  ist durch eine stetige, unitäre Darstellung von  $\tilde{G}$  induziert.

Bemerkungen.

- (1) Sei  $G$  eine zusammenhängende Gruppe, und  $U$  eine projektive Darstellung von  $G$  durch unitäre oder anti-unitäre Operatoren auf  $\mathcal{H}$ . Dann ist jeder Repräsentant  $U(g)$  von  $\tilde{U}(g)$  unitär,  $\forall g \in G$ . Denn, sei  $V = V(e)$  eine hinreichend kleine Umgebung von  $e \in G$ . Zu jedem  $g \in V$  gibt es dann ein  $h \in V$  so, dass  $g = h^2$ . Daher gilt  $U(g) = \omega(h, h)^{-1} U(h)^2$ , und daraus ist
- (i)  $U(g)$  unitär (für  $U(h)$  unitär oder anti-unitär).
- Nun gibt es zu jedem  $g \in G$   $g_1, \dots, g_n \in V$  so, dass  $g = g_1 \cdots g_n$ . Also ist

$$\tilde{U}(g) = \{e^{i\alpha} U(g_1) \cdots U(g_n) : \alpha \in \mathbb{R}\}$$

unitär,  $\forall g \in G$ .

- (2) Der Satz besagt, dass für eine projektive Darstellung  $\tilde{U}$  von  $G$  eine unitäre Darstellung



$U$  von  $\tilde{G}$  existiert so, dass  $\forall g \in G$

$$\tilde{U}(g) = \{U(g, \gamma) : (g, \gamma) \in \tilde{G}, \gamma \in \pi_1(G)\}. \quad (25)$$

(3) Anwendung: Sei  $S$  ein quantenmechanisches System, für welches  $G = SO(3)$  eine Symmetriegruppe ist, d.h. es gibt eine projektive Darstellung  $\tilde{U}$  von  $SO(3)$  auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  von  $S$ , (mit  $U(R_1)U(R_2) = \omega(R_1, R_2)U(R_1 \cdot R_2)$ ).

Dann gibt es eine unitäre Darstellung  $U$  von  $\tilde{SO}(3)$  auf  $\mathcal{H}$  so, dass (25) gilt. (Denn  $SO(3)$  ist kompakt und zusammenhängend.) Was ist  $\tilde{SO}(3)$ ?

(6.2.  $SU(2)$  als universelle Überlagerungsgruppe von  $SO(3)$

Wir definieren die Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (26)$$

$\{1, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$  ist eine Basis von  $M_2(\mathbb{C})$ . Die Matrizen

$1, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$  sind hermite'sch (selbstadjungiert).

Die Matrizen  $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$  sind eine Basis im drei-

dimensionalen Raum der spur freien Matrizen. Jede <sup>239.</sup>  
hermite'sche  $2 \times 2$  Matrix  $X$  mit  $\text{Sp } X = 0$  hat daher

die Darstellung

$$X = \sum_{k=1}^3 x_k \sigma_k, \quad x_k \in \mathbb{R}. \quad (27)$$

Die Zahlen  $x_1, x_2, x_3$  kann man als die Komponenten  
eines Vektors  $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$  auffassen. Es gilt

$$X = X^*, \quad \text{Sp } X = 0, \quad \det X = -|\vec{x}|^2. \quad (28)$$

Als Spezialfall finden wir

$$\left. \begin{aligned} \sigma_i &= \sigma_i^*, \quad \text{Sp } \sigma_i = 0, \quad \det \sigma_i = -1 \\ \text{Offensichtlich gilt auch } \sigma_i^2 &= 1. \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

Weiter haben wir

$$\begin{aligned} \sigma_1 \sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = i \sigma_3 \\ \sigma_2 \sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = -i \sigma_3 \end{aligned}$$

Allgemein

$$\sigma_k \sigma_l = \delta_{kl} + i \varepsilon_{klm} \sigma_m \quad (30)$$

Daraus folgt, dass

$$\left[ \frac{1}{i} \sigma_k, \frac{1}{i} \sigma_l \right] = 2 \varepsilon_{klm} \frac{1}{i} \sigma_m, \quad (31)$$

d.h. die Matrizen  $\left\{ \frac{1}{2i} \sigma_1, \frac{1}{2i} \sigma_2, \frac{1}{2i} \sigma_3 \right\}$  definieren

246

eine Darstellung der VR (19), die die Liealgebra,  $so(3)$ , der Drehgruppe  $SO(3)$  definieren. Die Matrizen

$$S_j = \frac{\hbar}{2} \sigma_j \quad (32)$$

erfüllen daher die VR

$$[S_i, S_j] = i \hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} S_k \quad (33)$$

der Drehimpulsalgebra.

Nun definieren wir die Gruppe  $SU(2)$ :

$$SU(2) = \{ U \in M_2(\mathbb{C}) : U^* = U^{-1}, \det U = 1 \} \quad (34)$$

Für  $U \in SU(2)$  gilt  $U = \begin{pmatrix} a+ib & c+id \\ -c+id & a-ib \end{pmatrix},$

mit  $\det U = a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 1. \quad (35)$

Die Gl. (35) definiert die Einheitskugel,  $S^3$ , in  $\mathbb{R}^4$ ,

d.h.  $SU(2)$  ist topologisch die  $S^3$ . Die Punkte

auf  $S^3$  können wir wie folgt parametrisieren:

$$a = \cos \frac{\theta}{2}, \quad \begin{pmatrix} b \\ c \\ d \end{pmatrix} = -\sin \frac{\theta}{2} \vec{e}, \quad \vec{e} \in S^2, \quad (36)$$

mit  $0 \leq \theta \leq 2\pi$ . In dieser Parametrisierung gilt

$$\begin{aligned} U &= \cos \frac{\theta}{2} \mathbb{1} - i \sin \frac{\theta}{2} (\vec{e} \cdot \vec{\sigma}) \\ &= \exp -i \frac{\theta}{2} (\vec{e} \cdot \vec{\sigma}), \quad \vec{e} \cdot \vec{\sigma} \equiv \sum_k e_k \sigma_k. \end{aligned} \quad (37)$$

(Man beachte, dass  $(\vec{e} \cdot \vec{\sigma})^2 = \mathbb{1}!$ )

Sei  $X = \vec{x} \cdot \vec{G}$  wie in (27), und  $U \in SU(2)$ . Wir definiere<sup>24</sup>  
 $X_U := UXU^{-1}$ . Dann gilt

$$X_U^* = (U^{-1})^* X^* U^* = UXU^{-1} = X_U,$$

$$\text{Sp} X_U = \text{Sp}(UXU^{-1}) = \text{Sp}(U^{-1}UX) = \text{Sp} X = 0,$$

$$\text{und } \det X_U = \det X / \det U^2 = \det X = -|\vec{x}|^2.$$

Also gibt es einen Vektor  $\vec{x}_U \in \mathbb{R}^3$  so, dass  $X_U = \vec{x}_U \cdot \vec{G}$ ,  
 ( ) mit  $|\vec{x}_U| = |\vec{x}|$ . Die Abbildung  $\vec{x} \mapsto \vec{x}_U$  ist offenkla-  
 rlich linear, und, da  $|\vec{x}_U| = |\vec{x}|$ , gibt es daher eine  
 $3 \times 3$  Matrix  $R(U) \in O(3)$  so, dass

$$\vec{x}_U = R(U)\vec{x}, \quad \forall U \in SU(2). \quad (38)$$

Selbstverständlich gilt  $R(U_1)R(U_2) = R(U_1 \cdot U_2)$ . Da  
 ( )  $SU(2)$  zusammenhängend ist und  $R(1) = \mathbb{I}_{\mathbb{R}^3}$ , also  
 $\det R(1) = 1$ , folgt  $\det R(U) = 1$ , also  $R(U) \in SO(3)$ ,  
 $\forall U \in SU(2)$ , d.h.  $R: U \mapsto R(U)$  ist ein Homomorphismus  
von  $SU(2)$  nach  $SO(3)$ . Diesen wollen

wir nun noch etwas genauer untersuchen:

Sei  $R(\vec{e}, \theta)$  eine Drehung von  $\mathbb{R}^3$  um die Achse  
 $\vec{e}$  mit Drehwinkel  $\theta$ . Wir haben gesehen, dass

$$\frac{d}{d\theta} R(\vec{e}, \theta) \vec{x} = R(\vec{e}, \theta) \vec{e} \wedge \vec{x} = \vec{e} \wedge R(\vec{e}, \theta) \vec{x}, \text{ also}$$

$$\frac{d}{d\theta} R(\vec{e}, \theta)^T \vec{e} = -\vec{e} \wedge R(\vec{e}, \theta)^T \vec{e}. \quad (39)$$

Sei  $U(\vec{e}, \theta) = \exp -i \frac{\theta}{2} (\vec{e} \cdot \vec{\sigma})$ . Auf grund von (31) gilt

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\theta} U(\vec{e}, \theta) \vec{\sigma} U(\vec{e}, \theta)^* \\ = -U(\vec{e}, \theta) \frac{i}{2} [\vec{e} \cdot \vec{\sigma}, \vec{\sigma}] U(\vec{e}, \theta)^* \\ = -\vec{e} \wedge (U(\vec{e}, \theta) \vec{\sigma} U(\vec{e}, \theta)^*) \end{aligned} \quad (40)$$

Es folgt, dass die matrixwertigen Funktionen

$$\vec{F}_1(\theta) = R(\vec{e}, \theta)^T \vec{\sigma} \quad \text{und} \quad \vec{F}_2(\theta) = U(\vec{e}, \theta) \vec{\sigma} U(\vec{e}, \theta)^*$$

beide die Differentialgl.

$$\frac{d}{d\theta} \vec{F}_i(\theta) = -\vec{e} \wedge \vec{F}_i(\theta), \quad \vec{F}_i(0) = \vec{\sigma} \quad (41)$$

erfüllen. Auf Grund des Eindeutigkeitsatzes

für Lösungen linearer Dgl. mit konstanten Koeffizienten folgt, dass  $\vec{F}_1(\theta) = \vec{F}_2(\theta)$ , d.h.

$$U(\vec{e}, \theta) \vec{\sigma} U(\vec{e}, \theta) = R(\vec{e}, \theta)^T \vec{\sigma},$$

oder

$$U(\vec{e}, \theta) (\vec{x} \cdot \vec{\sigma}) U(\vec{e}, \theta) = R(\vec{e}, \theta) \vec{x} \cdot \vec{\sigma}, \quad (42)$$

$$\forall \theta \in [0, 2\pi], \quad \forall \vec{e} \in S^2.$$

Damit ist gezeigt, dass  $U \mapsto R(U)$  surjektiv ist.

Der Kern der Abbildung  $R: SU(2) \rightarrow SO(3)$  ist offensichtlich  $\{U = \pm \mathbb{1}\}$ , wie man sich leicht überlegt;  $(UXU^* = X \Rightarrow U \text{ vertauscht mit } \mathbb{1}, G_1, G_2, G_3 \Rightarrow U \text{ vertauscht mit allen } V \in SU(2) \Rightarrow U = \lambda \mathbb{1}, \lambda \in \mathbb{C}. \text{ Da } U \in SU(2) \Rightarrow \lambda = \pm 1.)$

Es folgt, dass

$$SO(3) = SU(2) / \{\mathbb{1}, -\mathbb{1}\} \quad (43)$$

Da  $SU(2) \sim S^3$  einfach zusammenhängend ist, schliessen wir, dass  $SU(2) = \widetilde{SO(3)}$  die universelle Überlagerungsgruppe von  $SO(3)$  ist.

Die Liealgebren einer Liegruppe  $G$  und ihrer universellen Überlagerungsgruppe  $\widetilde{G}$  sind isomorph; (denn Liealgebra  $\mathfrak{g}$  von  $G = \text{Tangententialraum von } G \text{ in } e$ ). Daher gilt

$$\mathfrak{so}(3) \cong \mathfrak{su}(2), \quad (44)$$

was (19) und (31) entspricht.

### 6.3 Allgemeine, drehinvariante quantenmechanische Systeme.

---

Nach diesem Exkurs über  $SU(2)$  kehren wir nun zu Bemerkung (3), S. 238, also zur Untersuchung allgemeiner, drehinvarianter quantenmechanischer Systeme zurück.

Falls  $SO(3)$  eine dynamische Symmetriegruppe des Systems

(1)  $S$  ist, dann gibt es – wie wir nun gelernt haben – eine unitäre Darstellung,  $U$ , von  $\tilde{SO}(3) = SU(2)$  auf dem Hilbertraum,  $\mathcal{H}$ , des Systems, die mit seiner Zeitevolution vertauscht. D.h.: zu jedem  $g \in SU(2)$ ,  $t \in \mathbb{R}$ , gibt es

eine Phase  $\omega(g, t)$ , mit  $|\omega(g, t)| = 1$ , so, dass

$$(2) \quad U(g) e^{-itH/\hbar} = \omega(g, t) e^{-itH/\hbar} U(g). \quad (45)$$

Da  $e^{-i(t+s)H/\hbar} = e^{-itH/\hbar} e^{-isH/\hbar}$ , folgt aus (45)

$$\omega(g, t+s) = \omega(g, t) \omega(g, s). \quad (46)$$

Aus der Stetigkeit von  $\omega(g, t)$  in  $t$  und (46) folgt

$$\omega(g, t) = \exp i\chi(g)t, \quad (47)$$

für eine stetige Funktion  $\chi$  auf  $SU(2)$ . Da

$U(g_1 \cdot g_2) = U(g_1) U(g_2)$ , folgt aus (45) und (47), dass

$$\chi(g_1 g_2) = \chi(g_1) + \chi(g_2),$$

für alle  $g_1, g_2 \in SU(2)$ , d.h.  $\chi$  ist eine eindimensionale Darstellung von  $SU(2)$ . Aber  $SU(2)$  hat nur eine einzige, eindimensionale Darstellung: die triviale. Daher folgt, dass  $\chi(g) = 0$ ,  $\forall g \in SU(2)$ , und damit, dass

$$U(g) e^{-itH/\hbar} = e^{-itH/\hbar} U(g), \quad \forall t \in \mathbb{R}, \forall g \in SU(2). \quad (48)$$

Die Darstellung  $U$  von  $SU(2)$  definiert eine Darstellung  $dU$  der Liealgebra  $\mathfrak{su}(2)$  auf  $\mathcal{H}$ :

$$dU\left(\frac{1}{2i} \vec{\sigma} \cdot \vec{e}\right) = \left. \frac{d}{d\theta} U(\exp -i \frac{\theta}{2} (\vec{e} \cdot \vec{\sigma})) \right|_{\theta=0} \quad (49)$$

Definieren wir die totalen Drehimpulsoperatoren  $J_k$ ,

$k=1,2,3$ , durch

$$J_k := i\hbar dU\left(\frac{1}{2i} \sigma_k\right) = dU(S_k), \quad (50)$$

(siehe (31), (32)), dann folgt aus (33), dass

$$[J_k, J_l] = i\hbar \varepsilon_{klm} J_m, \quad (51)$$

also die VR der Drehimpulsalgebra. Aus (48) folgt dann, dass

$$[J_k, H] = 0, \quad k=1,2,3, \quad (52)$$

d.h. die  $J_k$ 's sind Integrale der Bewegung.



Seien nun  $S_1$  und  $S_2$  zwei g.m. Systeme, für die  $SO(3)$  eine dynamische Symmetriegruppe ist. Beispielsweise seien  $S_1$  und  $S_2$  zwei Elektronen, oder zwei Atome, oder zwei Moleküle. Wir erwarten, dass  $SO(3)$  eine Symmetrie des Gesamtsystems,  $S_1 \vee S_2$ , ist, die dann eine dynamische Symmetrie von  $S_1 \vee S_2$  ist, falls das Potential der Wechselwirkung zwischen  $S_1$  und  $S_2$  rotationsinvariant ist. Die Darstellungen  $U_1$  und  $U_2$  auf  $\mathcal{H}_1$ , resp.  $\mathcal{H}_2$ , sollen also eine Darstellung  $U$  von  $SU(2)$  auf  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  definieren. Frage: Wie bestimmt man  $U$  aus  $U_1$  und  $U_2$ ?

Zur Beantwortung beginnen wir mit einer mathematischen Vorbemerkung. Sei  $G$  eine Gruppe und  $U_1, U_2$  zwei Darstellungen auf Räumen  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$ . Wir definieren die Tensorprodukt Darstellung  $U_1 \otimes U_2$  auf  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  durch

$$(U_1 \otimes U_2)(g) = U_1(g) \otimes U_2(g), \quad (53)$$

für alle  $g \in G$ . Falls  $G$  eine Lie'sche Gruppe mit

Lie algebra  $\mathfrak{g}$  ist, dann kann jedes  $g$  in einer hinreichend kleinen Umgebung von  $e$  als  $g = \exp X$ ,  $X \in \mathfrak{g}$ , geschrieben werden. Umgekehrt gilt für kompat Gruppen, dass  $\exp X \in G$ ,  $\forall X \in \mathfrak{g}$ . Die Gruppenelemente  $g(s) = \exp(s \cdot X)$ ,  $s \in \mathbb{R}$ , bilden eine einparametrische Untergruppe von  $X$ , mit  $g(0) = e$ . Nach (53) haben wir dass

$$(U_1 \otimes U_2)(g(s)) = U_1(g(s)) \otimes U_2(g(s)). \quad (54)$$

Damit finden wir:

$$\begin{aligned} d(U_1 \otimes U_2)(X) &= \left. \frac{d}{ds} (U_1 \otimes U_2)(g(s)) \right|_{s=0} \\ &\stackrel{(54)}{=} \left[ \frac{d}{ds} U_1(g(s)) \otimes U_2(g(s)) + U_1(g(s)) \otimes \frac{d}{ds} U_2(g(s)) \right]_{s=0} \\ &= dU_1(X) \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes dU_2(X), \quad (55) \end{aligned}$$

$\forall X \in \mathfrak{g}$ .

Für  $S_1, S_2$ ,  $G = SU(2)$  folgt also:

$$(U_1 \otimes U_2)(g) = U_1(g) \otimes U_2(g), \quad \forall g \in SU(2).$$

$$J_k = d(U_1 \otimes U_2)(S_k) = J_k^{(1)} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes J_k^{(2)}, \quad (56)$$

für  $k = 1, 2, 3$ .

## Spiegelsymmetrie (Parität $P$ ) und Zeitumkehrinvarianz ( $T$ ) von q.m. Systemen.

Falls  $S$  spiegelsymmetrisch invariant ist, dann gehört zur Raumspiegelung  $P: \vec{x} \mapsto -\vec{x}$  eine Transformation  $U(P)$  auf  $\mathcal{H}$  die, nach dem Satz von Wigner, unitär oder antiunitär ist.

Aufgabe: Zeige, dass  $U(P)e^{-itH/\hbar} = e^{-itH/\hbar}U(P), \forall t \in \mathbb{R}$

falls  $P$  eine dynamische Symmetrie von  $S$  ist. Für physikalische Systeme ist der Hamiltonoperator nach unten beschränkt, d.h. sein Spektrum,  $\sigma(H)$ , erfüllt:

$$\sigma(H) \subseteq [-E_0, \infty), \quad E_0 < \infty. \quad (57)$$

$$\text{Aber } \sigma(H) \not\subseteq [-E_0, E_0], \quad (58)$$

insbesondere ist  $\sigma(H)$  nicht symmetrisch um 0.

Zeige nun, dass aus (57) und (58) folgt, dass  $U(P)$  unitär ist, und dass die Eigenwerte von  $U(P) = \pm 1$

sind. Falls  $\psi$  ein Eigenvektor von  $U(P)$  ist, so heisst der zugehörige Eigenwert,  $\pi_\psi$ , die Parität von  $\psi$ .

Ähnliche Überlegungen kann man auch für die

Zeitumkehr anstellen. Falls  $S$  zeitumkehrinvariant ist, dann gehört zur Zeitumkehr  $T: t \mapsto -t$  eine unitär oder antiunitäre Transformation  $U(T)$  auf  $\mathcal{H}$  so, dass

$$U(T) e^{-itH/\hbar} = \omega(t) e^{itH/\hbar} U(T), \quad (59)$$

mit  $|\omega(t)| = 1$ , und  $U(T)^2 = \beta \mathbb{1}$ ,  $|\beta| = 1$ . (60)

Zeige: Falls es keine Zahl  $\varepsilon \in \mathbb{R}$  gibt so, dass  $G(H - \frac{\varepsilon}{2}\mathbb{1})$  symmetrisch um 0 angeordnet ist, dann muss  $U(T)$  antiunitär sein,  $\omega(t) = 1$  und  $\beta = \pm 1$ .

Weiter gilt dann  $U(T)H = HU(T)$ , (wo  $H$  der Hamilt Operator von  $S$  ist). Dieses Resultat stammt von E. P. Wigner.

Die Beweise der Eigenschaften von  $U(P)$  und  $U(T)$ , sowie Beispiele und Anwendungen kommen in den Übungen vor.

Wir kehren nun zur Untersuchung der unitären Darstellungen von  $SU(2)$  auf den Hilberträumen von q.m Systemen mit dynamischer Rotationsymmetrie zurück. Ausgangspunkt bilden ein paar allgemeine Bemerkungen

über Darstellungen kompakter Gruppen.

(a) Eine Darstellung  $\pi$  einer Gruppe  $G$  ist ein Homomorphismus von  $G$  in den Ring der regulären, linearen Transformationen eines Vektorraumes  $E$ .

(b) Die Darstellung  $\pi$  von  $G$  auf einem Hilbertraum  $E$  heisst unitär, falls  $\pi(g)$  unitär ist,  $\forall g \in G$ , also  $\pi(g)^* = \pi(g^{-1})$ .

(c) Die Darstellung  $\pi$  von  $G$  auf  $E$  heisst irreduzibel, falls  $E$  keine nicht-trivialen Unterräume enthält, welche unter  $\pi(G)$  invariant sind.

(d) Schur'sches Lemma.

(1) Seien  $(\pi, E)$  und  $(\pi', E')$  zwei irreduzible Darstellungen von  $G$  und  $\varphi: E \rightarrow E'$  eine Abbildung mit der Eigenschaft, dass

$$\varphi \pi(g) = \pi'(g) \varphi, \quad \forall g \in G.$$

Dann ist  $\varphi = 0$ , oder  $\varphi$  ist ein Isomorphismus.

(2) Falls  $\pi = \pi'$ ,  $E = E'$ , folgt

$$\varphi = \lambda \mathbb{1}_E, \quad \lambda \in \mathbb{C}.$$

Sei nun  $G$  eine kompakte Gruppe.

(e) Falls  $(\pi, E)$  eine stetige, irreduzible Darstellung von  $G$  auf einem Banachraum  $E$  ist, dann ist  $E$  endlich-dimensional.

(f) Falls  $(\pi, E)$  eine endlich-dimensionale Darstellung von  $G$  ist, dann gibt es auf  $E$  ein Skalarprodukt so, dass  $\pi$  unitär ist; (Korollar der Existenz einer invarianten Haar'schen Masse auf  $G$ ).  $\Rightarrow$  Die stetigen, irreduziblen Darstellungen kompakter Gruppen sind alle endlich-dimensional und unitär.

(g) Jede unitäre Darstellung einer kompakten Gruppe auf einem Hilbertraum kann in eine direkte Summe irreduzibler Darstellungen zerlegt werden: Sei  $U$  eine unitäre Darst. der kompakten Gruppe  $G$  auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$ . Dann gibt es Unterräume  $E_k \subset \mathcal{H}$ ,  $k = 1, 2, 3, \dots$ , mit:

$$E_k \perp E_l, \quad k \neq l, \quad \bigoplus_{k=1}^{\infty} E_k = \mathcal{H},$$

$E_k$  ist invariant unter  $U(G)$ , und  $U|_{E_k}$  ist irreduzibel; ( $\dim E_k < \infty$ ,  $\forall k$ ).

(h) Sei  $(\pi, E)$  eine endlich-dimensionale Darstellung der kompakten Gruppe  $G$  auf  $E$ . Wir definieren den Charakter,  $\chi_\pi$ , von  $\pi$  als

$$\chi_\pi(g) = \text{Sp } \pi(g). \quad (61)$$

Offensichtlich gilt:

$$\chi_\pi(hgh^{-1}) = \chi_\pi(g), \quad (62)$$

d.h. Charaktere sind Klassenfunktionen.

Charaktere äquivalenter Darstellungen sind identisch. Falls  $\pi = \bigoplus_j \pi_j$ , dann gilt:

$$\chi_\pi(g) = \sum_j \chi_{\pi_j}(g), \quad \forall g \in G. \quad (63)$$

(i) Sei  $d\mu$  das auf 1 normierte, invariante Haar'sche Mass auf einer kompakten Gruppe  $G$ .

Seien  $\chi_1$  und  $\chi_2$  Charaktere inequivalenter, irreduzibler unitärer Darstellungen von  $G$ . Dann gilt:

$$\int_G \overline{\chi_1(g)} \chi_2(g) d\mu(g) = 0 \quad (64)$$

Falls  $\chi$  ein irreduzibler Charakter von  $G$  ist, dann gilt

$$\int_G |\chi(g)|^2 d\mu(g) = 1. \quad (65)$$

Satz von Peter-Weyl. Die irreduziblen Charaktere von  $G$  sind vollständig im Raum der quadratintegrablen Klassenfunktionen auf  $G$ .

(j) Sei  $\pi$  eine Darstellung von  $G$  mit Charakter  $\chi_\pi$  und sei  $\pi_0$  eine irreduzible Darstellung von  $G$ . Dann ist

$$n_{\pi_0} := \int \overline{\chi_{\pi_0}(g)} \chi_\pi(g) d\mu(g) \in \mathbb{Z}_+ \quad (66)$$

die Multiplizität der Darstellung  $\pi_0$  in  $\pi$ , d.h.  $\pi_0$  kommt in  $\pi$   $n_{\pi_0}$  mal vor. Sei  $E$  der Darstellungsräum der unitären Darstellung  $\pi$ , und sei  $E_0$  der Unterraum von  $E$  mit der Eigenschaft, dass

$$\pi|_{E_0} = \underbrace{\pi_0 \oplus \dots \oplus \pi_0}_{n_{\pi_0} \text{ mal}},$$

wo  $n_{\pi_0}$  durch (66) gegeben ist. Dann ist der orthogonale Projektor,  $P_{E_0}$ , auf  $E_0$  durch

$$P_{E_0} := d_{\pi_0} \int_G \overline{\chi_{\pi_0}(g)} \pi(g) d\mu(g) \quad (67)$$

gegeben, wo  $d_{\pi_0}$  die Dimension von  $\pi_0$  ist.



(k) Anwendung auf  $G = SU(2)$ .

Das Haar'sche Mass,  $d\mu$ , von  $SU(2)$  ist das auf 1 normierte uniforme Mass auf der 3-Sphäre  $S^3 \cong SU(2)$ ; (was könnte es anderes sein!).

Sei  $F(g)$  eine Klassenfunktion auf  $SU(2)$ , d.h.

$F(g) = F(hgh^{-1})$ . Man überzeugt sich leicht, dass

es zu jedem  $g$  einen Winkel  $\alpha$  und ein  $h \in SU(2)$  gibt so, dass

$$g = h \exp\left(i \frac{\alpha}{2} \sigma_3\right) h^{-1}.$$

Daraus folgt, dass  $F(g) = f(\alpha)$ , für eine Funktion  $f$  auf  $[0, 2\pi)$ .

{ 2 } Satz. 
$$\int_{SU(2)} F(g) d\mu(g) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(\alpha) \sin^2 \alpha d\alpha. \quad (68)$$

Anwendung. Sei  $\chi = \chi(\alpha)$  ein irreduzibler Charakter von  $SU(2)$ . Dann gilt

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} |\chi(\alpha)|^2 \sin^2 \alpha d\alpha = 1. \quad (69)$$

---

Beweis von (68): Übungen!

Nach dieser kurzen Exkursion in die Darstellungstheorie kompakter Gruppen verstehen wir nun, dass jede unitäre Darstellung von  $SU(2)$  in eine direkte Summe endlich-dimensionaler, irreduzibler Darstellungen zerlegt werden kann. Diese gilt es nun zu bestimmen. Wir stellen zwei Methoden vor:

- Globale - oder Tensormethode.
- Infinitesimale Methode; (Darst. der Liealgebra  $\mathfrak{su}(2)$ ; Methode der höchsten Gewichte).

#### 6.4 Globale Methode.

i) Fundamentaldarstellung von  $SU(2)$ .

Betrachten den VR  $\mathcal{D}_{1/2} = \mathbb{C}^2$ , mit der Basis

$\vec{e}_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $\vec{e}_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  und dem Skalarprodukt

$$\langle \vec{e}_\pm, \vec{e}_\pm \rangle = 1, \quad \langle \vec{e}_+, \vec{e}_- \rangle = 0.$$

Eine Darstellung,  $\mathcal{D}_{1/2}$ , von  $SU(2)$  auf  $\mathcal{D}_{1/2}$  ist

definiert durch:  $U \in SU(2) \mapsto \mathcal{D}_{1/2}(U)$ ,

$$D_{1/2}(U) \vec{e}_+ = U_{11} \vec{e}_+ + U_{21} \vec{e}_- \quad (1)$$

$$D_{1/2}(U) \vec{e}_- = U_{12} \vec{e}_+ + U_{22} \vec{e}_-$$

Für  $\xi = \xi_+ \vec{e}_+ + \xi_- \vec{e}_- \in D_{1/2}$  gilt dann

$$\begin{aligned} D_{1/2}(U) \xi &= \xi_+ D_{1/2}(U) \vec{e}_+ + \xi_- D_{1/2}(U) \vec{e}_- \\ &= (U_{11} \xi_+ + U_{12} \xi_-) \vec{e}_+ + (U_{21} \xi_+ + U_{22} \xi_-) \vec{e}_-, \end{aligned} \quad (2)$$

d.h.

$$D_{1/2}(U) \begin{pmatrix} \xi_+ \\ \xi_- \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \xi_+ \\ \xi_- \end{pmatrix}, \quad \forall U \in SU(2). \quad (3)$$

ii) Die Darstellung  $D_j$ .

Wir definieren einen  $(2j+1)$ -dimensionalen VR,  $D_j$ ,

als  $2j$ -faches, symmetrisches Tensorprodukt von  $D_{1/2}$ .

Eine Basis in  $D_j$  wird durch die folgenden Vektoren

in  $D_{1/2}^{\otimes 2j}$  gegeben:

$$\psi_m^j := (\vec{e}_+)^{\otimes_s (j+m)} \otimes (\vec{e}_-)^{\otimes_s (j-m)}, \quad (4)$$

$$m = j, j-1, \dots, -j, \quad j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$$

Jeder Vektor  $\psi \in D_j$  hat die Darstellung

$$\psi = \sum_{m=-j}^j \xi_m \psi_m^j.$$

Eine Darstellung,  $D_j$ , von  $SU(2)$  auf  $\mathcal{D}_j$  wird wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} D_j(U) \psi_m^j &:= (D_{1/2}(U) \vec{e}_+)^{\otimes_s(j+m)} \otimes_s (D_{1/2}(U) \vec{e}_-)^{\otimes_s(j-m)} \\ &= \sum_{m'} D_j(U)_{m'm} \psi_{m'}^j \end{aligned} \tag{5}$$

Diese Gleichung definiert offensichtlich eine Unterdarstellung der  $2j$ -fachen Tensorprodukt Darstellung von  $D_{1/2}$  auf dem Unterraum der symmetrischen Tensoren vom Range  $2j$ ,  $\mathcal{D}_j$ . Es gilt

$$\dim \mathcal{D}_j = 2j + 1. \tag{6}$$

Die Matrixelemente  $D_j(U)_{m'm}$  in (5) sind relativ komplizierte Polynome in den Matrixelementen von  $U$ , die wir hier nicht berechnen wollen. Statt dessen zeigen wir nun, dass  $\mathcal{D}_j$  ein Skalarprodukt tragt, das durch dasjenige auf  $\mathcal{D}_{1/2}$  bestimmt ist; Sei  $\zeta$  ein Einheitsvektor in  $\mathcal{D}_{1/2}$ . Dann ist

$$\psi(\zeta) := \zeta^{\otimes_s 2j} = (\zeta_+ \vec{e}_+ + \zeta_- \vec{e}_-)^{\otimes_s 2j} \tag{7}$$

in  $\mathcal{D}_j$ . Das Skalarprodukt von  $\psi(\zeta)$  mit sich selbst

ist durch

$$\langle \psi(\zeta), \psi(\zeta) \rangle = (|\zeta_+|^2 + |\zeta_-|^2)^{2j} = \langle \zeta, \zeta \rangle^{2j} = 1 \quad (8)$$

gegeben. Andererseits ist

$$\psi(\zeta) = \sum_{m=-j}^j \binom{2j}{j+m} \zeta_+^{j+m} \zeta_-^{j-m} \psi_m^j. \quad (9)$$

Vergleich von (8) mit (9) zeigt, dass

$$\begin{aligned} \langle \psi_m^j, \psi_{m'}^j \rangle &= \binom{2j}{j+m}^{-1} \underbrace{\langle \vec{e}_+, \vec{e}_+ \rangle}_{=1}^{j+m} \underbrace{\langle \vec{e}_-, \vec{e}_- \rangle}_{=1}^{j-m} \\ &= \binom{2j}{j+m}^{-1} \delta_{mm'} \end{aligned} \quad (10)$$

gesetzt werden muss.

Nach (5) und (7) gilt, dass

$$\begin{aligned} D_j(U) \psi(\zeta) &= (\zeta_+ D_{1/2}(U) \vec{e}_+ + \zeta_- D_{1/2}(U) \vec{e}_-)^{\otimes_s 2j} \\ &= ((U\zeta)_+ \vec{e}_+ + (U\zeta)_- \vec{e}_-)^{\otimes_s 2j} \\ &= \psi(U\zeta) \end{aligned} \quad (11)$$

Nun zeigen wir, dass  $D_j(U)$  im durch (10) bestimmten Skalarprodukt auf  $\mathfrak{D}_j$  unitär ist. Dazu bemerken wir zunächst, dass die Vektoren

$$\{ \psi(\zeta) : \zeta \in \mathfrak{D}_{1/2}, \psi(\zeta) \text{ wie in (7)} \} \quad (12)$$

ein Erzeugendensystem in  $\mathfrak{D}_j$  bilden; (Übung!)

Weiter gilt nach (10), dass

$$\begin{aligned}\langle \psi(\zeta), \psi(\eta) \rangle &= \sum_{m=-j}^j \binom{2j}{j+m} (\bar{\zeta}_+ \eta_+)^{j+m} (\bar{\zeta}_- \eta_-)^{j-m} \\ &= (\langle \zeta, \eta \rangle)^{2j}\end{aligned}\quad (13)$$

Wegen (12) genügt es nun zu zeigen, dass

$$\langle D_j(U) \psi(\zeta), D_j(U) \psi(\eta) \rangle = \langle \psi(\zeta), \psi(\eta) \rangle, \quad (14)$$

( )  $\forall \zeta, \eta \in \mathcal{D}_{1/2}$ . Auf grund von (11) gilt aber

$$\langle D_j(U) \psi(\zeta), D_j(U) \psi(\eta) \rangle = \langle \psi(U\zeta), \psi(U\eta) \rangle \quad (15)$$

Benützen wir nun (13) und die Unitarität von  $D_{1/2}$ , so folgt, dass

$$\langle \psi(U\zeta), \psi(U\eta) \rangle = \langle \psi(\zeta), \psi(\eta) \rangle,$$

( ) was zu beweisen war.

Als Nächstes zeigen wir, dass  $D_j$  irreduzibel ist.

Dies folgt direkt daraus, dass für jedes feste  $\zeta \in \mathcal{D}_{1/2}$   $\{U\zeta : U \in SU(2)\}$  die Kugel vom Radius  $\langle \zeta, \zeta \rangle^{1/2}$  in  $\mathcal{D}_{1/2}$  aufspannt und daher

$$\{D_j(U) \psi(\zeta) = \psi(U\zeta) : U \in SU(2)\}$$

ein Erzeugendensystem in  $\mathcal{D}_j$  ist. Daher gibt es

für  $D_j$  keine invarianten Unterräume in  $\mathcal{D}_j$ , d.h.  $D_j$

ist irreduzibel. Dasselbe Resultat kann auch durch Betrachten der Charaktere der Darstellungen  $D_j$  gezeigt werden:

$$\chi_j(V) = \text{Sp } D_j(V), \quad V \in SU(2). \quad (16)$$

Da  $\chi_j(VUV^{-1}) = \chi_j(V)$  (Zyklichkeit der Spur), können wir benützen, dass jedes  $V \in SU(2)$  diagonalisierbar ist:

$$V = V \underbrace{\begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix}}_{\equiv U(\alpha)} V^{-1}, \quad V \in SU(2).$$

Damit gilt, dass  $\chi_j(V) = \chi_j(U(\alpha))$ ; (die Konjugationsklassen in  $SU(2)$  werden durch einen Winkel  $\alpha \in [0, 2\pi)$  parametrisiert, und  $\chi_j(V)$  hängt nur von der Konjugationsklasse ab, in der  $V$  liegt). Nun

gilt wegen (4) und (5), dass

$$\begin{aligned} D_j(U(\alpha)) \varphi_m^j &= e^{i(j+m)\alpha} e^{-i(j-m)\alpha} \varphi_m^j \\ &= e^{2im\alpha} \varphi_m^j. \end{aligned} \quad (17)$$

Daraus folgt mit (16) und (10), dass

$$\chi_j(U(\alpha)) = \sum_{m=-j}^j e^{2im\alpha} = \frac{\sin(2j+1)\alpha}{\sin\alpha}. \quad (18)$$

Um zu zeigen, dass  $D_j$  irreduzibel ist, können wir nun das Kriterium (65) und den Satz (68) des letzten Abschnitts benutzen:  $\chi$  irreduzibel, falls

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} |\chi(U(\alpha))|^2 \sin^2 \alpha \, d\alpha = 1.$$

Also

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} |\chi_j(U(\alpha))|^2 \sin^2 \alpha \, d\alpha \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} |e^{i(2j+1)\alpha} - e^{-i(2j+1)\alpha}|^2 \, d\alpha = 1, \end{aligned}$$

d.h.  $D_j$  ist irreduzibel.

Nun müssen wir fragen, ob wir alle irreduziblen Darstellungen gefunden haben. Nach dem Satz von Peter-Weyl ist dies genau dann der Fall, wenn die Funkti-

nen 
$$\chi_j(U(\alpha)) = \frac{\sin(2j+1)\alpha}{\sin \alpha}, \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \quad (19)$$

im  $L^2$ -Raum der Klassenfunktionen mit dem Skalarprodukt

$$\langle F, G \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \overline{F(\alpha)} G(\alpha) \sin^2 \alpha \, d\alpha \quad (20)$$

vollständig sind. Da



$$\begin{aligned}
\sigma_2 U(\alpha) \sigma_2 &= \sigma_2 (\cos \alpha \mathbb{1} + i \sin \alpha \sigma_3) \sigma_2 \\
&= \cos \alpha \mathbb{1} - i \sin \alpha \sigma_3 \\
&= U(-\alpha), \quad \sigma_2 \in SU(2),
\end{aligned}$$

gilt für jede Klassenfunktion  $F$ , dass

$$F(\alpha) = F(-\alpha), \quad (21)$$

d.h.  $F$  ist gerade. Daher hat  $F$  eine Fourierreihe

○ der Form

$$F(\alpha) = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n \frac{\sin(n\alpha)}{\sin \alpha},$$

(Beweis durch Induktion), und mit (20) gilt, dass

$$\begin{aligned}
\langle F, G \rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} \bar{\varphi}_n \gamma_n \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} |\sin(n\alpha)|^2 d\alpha \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \bar{\varphi}_n \gamma_n,
\end{aligned}$$

○ für  $G = \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n \frac{\sin(n\alpha)}{\sin \alpha}$ . Laut (19) gilt aber

$$\frac{\sin(n\alpha)}{\sin \alpha} = \chi_{\frac{n-1}{2}}(U(\alpha)), \quad (22)$$

und damit ist der Beweis der Vollständigkeit der Charaktere  $\chi_j$  beendet.

iii) Diskussion der Darstellungen  $D_j$ :

$j$  bezeichnet den Spin,  $m$  die  $z$ -Komponente des Spins,

die man auch magnetische Quantenzahl nennt.

$j=0$ : Triviale Darstellung von  $SU(2)$ ,  $\chi_0(U(\alpha))=1$   
 $\Leftrightarrow$  spinlose (skalare) Teilchen.

$j=1/2$ : Fundamentaldarstellung von  $SU(2)$ ,

$$\chi_{1/2}(U(\alpha)) = \sin 2\alpha / \sin \alpha = 2 \cos \alpha$$

$\Leftrightarrow$  Teilchen mit Spin  $1/2$ , e.g. Elektron,  
 Proton, Neutron, Quark.

$j=1$ : Spin-1 Darstellung von  $SU(2)$  = Fundamentaldarstellung von  $SO(3)$  ( $\mathcal{D}_1 \simeq \mathbb{R}^3$ ).

$\Leftrightarrow$  Massive Teilchen mit Spin 1, e.g.  $W_{\pm}$ -  
 und  $Z$ -Bosonen.

(iv) Nun bestimmen wir die von  $D_j$  induzierten Darstellungen,  $dD_j$ , der Lie algebra  $\mathfrak{su}(2)$ .

$$\mathfrak{su}(2) = \left\{ X \equiv \frac{i}{2} \vec{x} \cdot \vec{\sigma} : \vec{x} = \theta \vec{e} \in \mathbb{R}^3 \right\}.$$

$$dD_j(X) = \frac{d}{ds} D_j(\exp s X) \Big|_{s=0}. \quad (23)$$

$$D_j(\exp s X) \psi(\vec{z}) \stackrel{(\text{II})}{=} \psi((\exp s X) \vec{z})$$

$$\approx \psi\left(\vec{z} + \frac{i}{2} s \vec{x} \cdot \vec{\sigma} \vec{z}\right), \quad (24)$$

für  $|s|$  klein.

Für explizite Rechnungen ist es praktisch, die Basis-elemente  $\psi_m^j$  zu normieren. Wir definieren

$$e_m^j := \sqrt{\binom{2j}{j+m}} \psi_m^j \quad (25)$$

Dann gilt nach (10), dass

$$\langle e_m^j, e_{m'}^{j'} \rangle = \delta^{jj'} \delta_{mm'} \quad (26)$$

Benützen wir die Definition der Drehimpulsoperatoren

$$\vec{x} \cdot \vec{J}(j) = i\hbar \mathcal{D}_j \left( \frac{i}{2} \vec{x} \cdot \vec{\sigma} \right) \quad (27)$$

so finden wir aus (24) durch Entwicklung nach

Potenzen von  $\xi_+$  und  $\xi_-$  und Vergleich, dass

$$\begin{aligned} \vec{x} \cdot \vec{J}(j) e_m^j &= \hbar \left\{ m x_3 e_m^j + \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \frac{x_1 - ix_2}{2} e_m^j \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \frac{x_2 + ix_1}{2} e_{m-1}^j \right\} \quad (28) \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} J_3(j) e_m^j &= \hbar m e_m^j \\ J_+(j) e_m^j &= \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} e_{m+1}^j \\ J_-(j) e_m^j &= \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)} e_{m-1}^j \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

wo  $J_{\pm} := J_1 \pm i J_2$ .

Bemerkung. Die Darstellungen  $D_j$  von  $SU(2)$  haben folgende Eigenschaft, die man unmittelbar der Definition entnimmt:

$$D_j(-1) = (-1)^{2j} 1, \quad (30)$$

also: ganzzahlige  $j$  gehören zu eindeutigen,

halbzahlige  $j$  zu zweideutigen Darstellungen der  $SO(3)$ .

v) Die Clebsch - Gordan Reihe der  $SU(2)$ .

$$\chi_j(U(\alpha)) = \sum_{m=-j}^j e^{2im\alpha} = \sin(2j+1)\alpha / \sin\alpha.$$

Betrachten die Tensorprodukt darstellung  $D_{j_1} \otimes D_{j_2}$

auf  $D_{j_1} \otimes D_{j_2}$ , was physikalisch der Zusammensetzen

eines g.m. Systems (Teilchen) mit Spin  $j_1$  mit einem

System des Spins  $j_2$  entspricht. Wir fragen: Welche

möglichen Spinwerte hat das Gesamtsystem? (Zusam-

mensetzung quantenmechanischer Drehimpulse!)

Diese Frage kann man leicht mit Hilfe der Charaktere beantworten.

Direkt aus der Definition der Charaktere und des Tensorproduktes folgt, dass

$$\chi_{j_1 \oplus j_2}(U) = \chi_{j_1}(U) \chi_{j_2}(U). \quad (31)$$

Sei  $N_{j_1 j_2}^j$  die Multiplizität der Darstellung  $D_j$  als Unterdarstellung von  $D_{j_1} \otimes D_{j_2}$ , d.h.

$$\ominus \quad D_{j_1} \otimes D_{j_2} = \bigoplus_j D_j \otimes \mathbb{C}^{N_{j_1 j_2}^j}, \quad (32)$$

mit  $\mathbb{C}^0 = \emptyset$ . Aus den Formeln (63), (64) und (65) des letzten Abschnitts folgt, dass

$$\chi_{j_1 \oplus j_2}(U) = \chi_{j_1}(U) \chi_{j_2}(U) = \sum_j N_{j_1 j_2}^j \chi_j(U). \quad (33)$$

○ (Die Formeln (31)–(33) können leicht auf allgemeine kompakte Gruppen verallgemeinert werden!) Nun gilt

$$\begin{aligned} \chi_{j_1}(U(\alpha)) / \chi_{j_2}(U(\alpha)) &= \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} e^{i(m_1+m_2)\alpha} \\ &= \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^j e^{im\alpha} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \chi_j(U(\alpha)) \end{aligned} \quad (34)$$

Diese Gleichung soll in den Übungen gezeigt werden.

Daraus folgt:

$$N_{j_1 j_2}^j = \begin{cases} 1, & |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Also

$$D_{j_1} \otimes D_{j_2} = \bigoplus_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D_j \quad (35)$$

Diese Gl. nennt man die Clebsch - Gordan Reihe für  $SU(2)$ .

### 6.5 Infinitesimale Methode: Irreduzible Darstellungen von $su(2)$ .

Wenn  $G$  eine einfach zusammenhängende, kompakte Lie'sche Gruppe ist, dann gilt:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Irreduzible Darstellungen} \\ \text{von } G \end{array} \right\} \overset{1-1}{\Leftrightarrow} \left\{ \begin{array}{l} \text{Irreduzible Darstellungen} \\ \text{von } \mathfrak{g} = \text{Lie}(G). \end{array} \right.$$

Da  $G$  kompakt ist, ist jede irreduzible Darstellung  $D$  von  $G$  unitär und daher, wegen

$$dD(X) = \left. \frac{d}{ds} D(\exp sX) \right|_{s=0}, \quad X \in \mathfrak{g},$$

jede Darstellung von  $\mathfrak{g}$  eine Darstellung durch

antihermite'sche Matrizen, d. h.

$$(id D(X))^* = id D(X) \quad (36)$$

Sei nun  $\rho$  eine antihermite'sche Darstellung von  $su(2)$  auf einem VR,  $V$ , mit Skalarprodukt.

Offensichtlich können wir  $\rho$  komplex-linear auf die Lie algebra  $sl_2(\mathbb{C})$  der spurfreien  $2 \times 2$  Matrizen ausdehnen. Wir definieren nun

$$J_\alpha := \hbar \rho\left(\frac{1}{2} \sigma_\alpha\right), \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad (37)$$

$$J_\pm := J_1 \pm i J_2 \in \rho(sl_2(\mathbb{C})), \quad (38)$$

( ) Da  $\rho$  eine Darstellung von  $su(2)$  ist, gelten die Vertauschungsrelationen

$$[J_k, J_l] = i\hbar \varepsilon_{klm} J_m, \quad (39)$$

also auch

$$\left. \begin{aligned} [J_3, J_\pm] &= \pm \hbar J_\pm \\ \text{und} \quad [J_+, J_-] &= -2i [J_1, J_2] = 2\hbar J_3. \end{aligned} \right\} \quad (40)$$

Statt dass wir, wie in der globalen Methode, alle irreduziblen (unitären) Darstellungen von  $SU(2)$  bestimmen, wollen wir nun direkt alle antihermiteschen, irreduziblen Darstellungen von  $su(2)$ , d.h. alle Darstellungen von (40), mit

$$J_3^* = J_3 \quad \text{und} \quad J_{\pm}^* = J_{\mp}, \quad (41)$$

bestimmen. Im folgenden setzen wir  $\hbar = 1$ .

Sei  $\psi_m \in V$  ein Eigenvektor von  $J_3 = \rho\left(\frac{1}{2}\sigma_3\right)$

zum Eigenwert  $m$ . Da  $e^{2\pi i J_3} = \rho(-1) = \pm 1$ ,

folgt, dass

$$m \in \frac{1}{2} \mathbb{Z}. \quad (42)$$

Weiter folgt aus (40), dass

$$\begin{aligned} J_3(J_{\pm} \psi_m) &= [J_3, J_{\pm}] \psi_m + J_{\pm} J_3 \psi_m \\ &\stackrel{(40)}{=} (m \pm 1) J_{\pm} \psi_m \end{aligned} \quad (43)$$

Wegen (41) haben wir, dass

$$\langle \psi, J_{\pm} J_{\mp} \psi \rangle = \langle J_{\mp} \psi, J_{\mp} \psi \rangle \geq 0,$$

$\forall \psi \in V$ . Wir nennen den maximalen Eigenwert



von  $J_3$   $j$  und einen zugehörigen Eigenvektor  $\psi_j$ .

Da alle irreduziblen Darstellungen von  $\mathfrak{su}(2)$  endlich-dimensional sind, ist  $j < \infty$ . Wegen (43) gilt  $J_+ \psi_j =$   
also auch

$$J_- J_+ \psi_j = 0. \quad (44)$$

Nun gilt aber, dass

$$J_- J_+ = J_1^2 + J_2^2 + i[J_1, J_2] \stackrel{(39)}{=} \vec{J}^2 - J_3^2 - J_3, \quad (45)$$

und daher, mit (44),

$$\vec{J}^2 \psi_j = (J_- J_+ + J_3^2 + J_3) \psi_j = j(j+1) \psi_j. \quad (46)$$

Wir normieren  $\psi_j$  so, dass  $\|\psi_j\| = 1$ , und definieren

$$r_m \psi_{m-1} := J_- \psi_m, \quad m = j, j-1, \dots, \quad (47)$$

wo die Zahlen  $r_m$  so gewählt sind, dass  $\|\psi_m\| = 1$ ,  
oder  $= 0$ ,  $\forall m < j$ .

Da  $\vec{J}^2$  mit  $J_-$  vertauscht, finden wir aus  
(46) und (47), dass

$$\vec{J}^2 \psi_m = j(j+1) \psi_m, \quad \forall m \leq j. \quad (48)$$

Da  $J_3 \psi_m = m \psi_m$  und  $J_3^* = J_3$ , folgt

$$\langle \psi_m, \psi_{m'} \rangle = 0, \quad \text{für } m \neq m'. \quad (49)$$

Da  $\rho$  endlich-dimensional ist, gibt es ein  $m_-$  so,  
dass

$$J_- \psi_{m_-} = 0,$$

also

$$J_+ J_- \psi_{m_-} = 0. \quad (50)$$

Da

$$J_+ J_- = \vec{J}^2 - J_3^2 + J_3 \quad (51)$$

und wegen (48), folgt, dass

$$j(j+1)\psi_{m_-} = \vec{J}^2 \psi_{m_-} = J_3(J_3 - 1)\psi_{m_-}$$

$\uparrow$   
 (50), (51)

$$= m_-(m_- - 1)\psi_{m_-}. \quad (52)$$

Also  $m_- = -j$ , oder  $m_- = j+1$ . Aber da

$m_{\max.} = j$ , folgt

$$m_- = -j. \quad (53)$$

[Umgekehrt gilt für  $\psi_{-j}$

$$\|J_- \psi_{-j}\|^2 = \langle \psi_{-j}, J_+ J_- \psi_{-j} \rangle$$

$$\stackrel{(51)}{=} \langle \psi_{-j}, [j(j+1) - j^2 - j] \psi_{-j} \rangle = 0.]$$

Nun berechnen wir die Normierungskonstanten  $r_m$ :

$$|r_m|^2 = \|J_- \psi_m\|^2 = \langle \psi_m, J_+ J_- \psi_m \rangle$$

$$\stackrel{(51)}{=} [j(j+1) + m - m^2] \underbrace{\|\psi_m\|^2}_{=1}, \text{ d.h.}$$

272

$$\boxed{r_m = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}} \quad (54)$$

Also

$$J_- \psi_m = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \psi_{m-1} \quad (55)$$

und, mit  $J_+ = J_-^*$ , folgt dann

$$J_+ \psi_m = \sqrt{(j+m+1)(j-m)} \psi_{m+1}, \quad (56)$$

was wir schon in (29) gefunden hatten.

Der von den Vektoren  $\{\psi_m \equiv e_m^j\}_{m=-j}^j$  aufgespannte

Unterraum  $V_0$  von  $V$  ist offensichtlich invariant

( ) unter der Darstellung  $\rho$  von  $\mathfrak{su}(2)$  und enthält

keine nicht-trivialen, invarianten Unterräume. Wenn

$\rho$  irreduzibel ist, folgt also

$$V_0 = V,$$

d.h. der sog. höchste Gewichtsvektor  $\psi_j \in V$

ist eindeutig (bis auf eine Phase).

Nun sieht man leicht, dass die eben beschriebene

Darstellung  $\rho = \rho_j$  von  $su(2)$  zu einer Darstellung,  $D$ , von  $SU(2)$  integriert werden kann:

$$D(U = \exp i \frac{\theta}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma}) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^N}{N!} \rho_j(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^N. \quad (57)$$

Für  $\vec{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ,  $\theta = 2\alpha$  finden wir  $U = U(\alpha)$ ,

$\vec{n} \cdot \vec{\sigma} = J_3$ , und daher, mit  $J_3 \psi_m = m \psi_m$

$$\rho_j D(U(\alpha)) = \sum_{m=-j}^j e^{2im\alpha} = \chi_j(U(\alpha)). \quad (58)$$

Damit folgt

$$D = D_j, \quad \rho_j = dD_j. \quad (59)$$

## 6.6 Teilchen mit Spin und Pauli Gleichung.

Mit Hilfe der Darstellungstheorie der  $SU(2)$  ist es nun einfach, Teilchen mit innerem Drehimpuls, oder Spin, quantenmechanisch zu beschreiben. Auf die Existenz eines inneren Freiheitsgrades für Elektronen, den wir mit dem Spin identifizieren werden, hat schon

früh die Untersuchung der Alkali-Spektren hingewiesen. Ausser für den Bahndrehimpuls  $l=0$  des Leuchtelektrons (in der äussersten Schale) bestehen nämlich alle Terme für  $l \geq 1$  aus zwei dicht beieinander liegenden Spektrallinien. Dieser Befund hat Pauli dazu veranlasst, dem Elektron einen zweiwertigen, inneren Freiheitsgrad zuzuschreiben. Von Goudsmit und Uhlenbeck (1925) stammt die Idee, dass ein Elektron wie auch viele andere Elementarteilchen, einen inneren Drehimpuls hat. Das von ihnen dieser Auffassung zu Grunde gelegte mechanistische Modell eines Elektrons ist allerdings unhaltbar. Die korrekte gruppentheoretische Formulierung des Spins und dessen Zusammenhang mit der Drehgruppe stammt von Pauli (1927).

Ein direkter Nachweis der Existenz des Spins von Elektronen und Atomen gelang im Stern-Geulach Versuch (1922), ursprünglich für einen Strahl von

Natrium Atomen. Diesen Versuch werden wir später besprechen.

Wir wollen nun nicht-relativistische Teilchen mit beliebigem Spin quantenmechanisch - gruppentheoretisch beschreiben. Wir kennen schon

Spinlose Teilchen ( $s=0$ ): Der Zustand,  $\psi$ ,

eines spinlosen Teilchens wird durch eine skalare Wellenfunktion  $\psi(\vec{x})$  beschrieben, wo

$\psi(\vec{x}) \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ ,  $\|\psi\|_2 = \sqrt{\langle \psi, \psi \rangle} = 1$ . Ihre

Transformationseigenschaften unter Drehungen des

Raumes werden durch die Darstellung

$$(U(R)\psi)(\vec{x}) \equiv \psi_R(\vec{x}) = \psi(R^{-1}\vec{x}), \quad (60)$$

$$R \in SO(3) \quad (R^{-1} = R^T),$$

beschrieben. Die Darstellung  $U$  ist nicht irreduzibel

Tatsächlich ist

$$U = \bigoplus_{\ell=0}^{\infty} D_{\ell} \otimes \mathbb{1} \Big|_{L^2(\mathbb{R}_+, r^2 dr)}. \quad (61)$$

Der Hilbertraum  $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$  hat die Tensorproduktzerlegung

$$L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) = L^2(S^2, d\Omega) \otimes L^2(\mathbb{R}_+, r^2 dr), \quad (62)$$

wo

$$d\Omega = \sin \theta \, d\theta \, d\varphi,$$

in sphärischen Polarkoordinaten. Nun ist

$$U = \tilde{U} \otimes \mathbb{I}, \quad (63)$$

denn die radialen Wellenfunktionen transformieren trivial unter Raumdrehungen.

Die Kugelfunktionen  $\{Y_m^l(\theta, \varphi)\}_{m=-l, l=0,1,2,\dots}^l$

bilden ein VONS in  $L^2(S^2, d\Omega)$ . Wir behaupten

nun, dass der durch die Funktionen  $\{Y_m^l\}_{m=-l}^l$

aufgespannte Unterraum  $\mathcal{D}_l$  gerade die Darstel-

lung  $\mathcal{D}_l$  trägt, so dass  $\tilde{U} = \bigoplus_{l=0}^{\infty} \mathcal{D}_l$ . Statt dass

wir zum Beweis auf unsere Konstruktion der Kugel-

funktionen zurück kehren, konstruieren wir diese gleich

noch einmal neu, nämlich gruppentheoretisch: In

Polarkoordinaten sind die Komponenten des Bahndreh-

impulsoperators  $\vec{L} = \frac{1}{i} \vec{r} \wedge \vec{p}$  ( $\hbar = 1!$ ) durch die folgenden Ausdrücke gegeben, (Übungen zu Kap. 3)

$$L_z = \frac{1}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (64)$$

$$L_{\pm} = L_x \pm i L_y = \frac{1}{i} e^{\pm i\varphi} \left[ \pm i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]$$

Wie wir wissen, haben die Kugelfunktionen die Form

$$Y_m^l(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} P_m^l(\theta),$$

$Y_m^l$  ist also eine Eigenfunktion von  $L_z$  zum Eigenwert  $m$ . Für  $Y_l^l$  soll nun gelten, dass

$$L_+ Y_l^l = 0, \text{ also}$$

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \theta} - l \cot \theta \right] P_l^l(\theta) = 0, \quad (65)$$

mit der Lösung

$$P_l^l(\theta) = \frac{(-1)^l}{2^{l+1/2} l!} \sqrt{(2l+1)!} (\sin \theta)^l,$$

wobei die Normierungskonstante so gewählt ist, dass

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta |P_l^l(\theta)|^2 = 1,$$

und die Phase  $(-1)^l$  konventionell ist.



Nun kann man auf Grund der Darstellungstheorie der  $SU(2)$  rekursiv definieren:

$$L_- Y_m^l(\theta, \varphi) = \sqrt{(l+m)(l-m+1)} Y_{m-1}^l(\theta, \varphi), \quad (66)$$

siehe Formel (56). Daraus folgt die Formel für die Kugelfunktionen

$$Y_m^l(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi (l-m)!}} e^{im\varphi} \frac{1}{(\sin\theta)^m} \times \left( \frac{d}{d\cos\theta} \right)^{l-m} (\sin\theta)^{2l} \quad (67)$$

Es folgt automatisch, dass  $L_- Y_{-l}^l = 0$ ,  $Y_m^l = 0$ ,

$\forall m < -l$ . Der Charakter von  $\tilde{V}/_{\mathcal{D}_l}$  ist durch

$$Sp_{\mathcal{D}_l}(\tilde{V}(\alpha)) = \frac{\sin(2j+1)\alpha}{\sin\alpha}$$

gegeben, d.h.  $\tilde{V}/_{\mathcal{D}_l} \simeq \mathcal{D}_l$ .

Nun betrachten wir Teilchen mit Spin. Sei  $\mathcal{H}$

der Hilbertraum der reinen Zustandsvektoren

für ein Teilchen mit Spin. Alles, was wir wissen,

ist, dass  $\mathcal{H}$  eine projektive Darstellung der Drehgruppe  $SO(3)$  trägt, die von einer unitären Darstel-

lung von  $SU(2)$  kommt, jedoch ein- oder zweiwertig sein kann. Wir machen für die Zustandsvektoren in  $\mathcal{H}$  den Ansatz

$$\psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) \\ \vdots \\ \psi_{2s+1}(\vec{x}) \end{pmatrix}, \quad \psi_\alpha \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x), \quad (68)$$

d.h.

$$\psi \in \mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \otimes \mathbb{C}^{2s+1}, \quad (69)$$

mit

$$\|\psi\|_2^2 := \sum_{\alpha=1}^{2s+1} \|\psi_\alpha\|_2^2 = 1.$$

Die Transformationseigenschaften unter Drehungen des Raumes sollen durch

$$(U(R)\psi)(\vec{x}) \equiv \psi_R(\vec{x}) := D_s(R)\psi(R^{-1}\vec{x}) \quad (70)$$

gegeben sein, wo  $D_s(R_1)D_s(R_2) = \pm D_s(R_1 \cdot R_2)$ , für

$R_1, R_2 \in SO(3)$ , und  $D_s$  die Darstellung von  $SU(2)$

auf  $\mathcal{D}_s$ , (Spin  $s$ ), ist. Der Hilbertraum  $\mathcal{H}$  hat

die Tensorprodukt darstellung

$$\mathcal{H} = L^2(S^2, d\Omega) \otimes L^2(\mathbb{R}_+, r^2 dr) \otimes \mathbb{C}^{2s+1}, \quad (71)$$

und

$$U = \tilde{U} \otimes 1 \otimes D_s.$$

Wir ignorieren nun die radialen Wellenfunktionen die hier keine Rolle spielen. Auf dem Unterraum

$$D_l \otimes \mathbb{C}^{2s+1}, \quad D_l = \mathcal{L}\{Y_m^l\}_{m=-l}^l, \quad \text{reduziert sich}$$

$U$  zur Darstellung  $D_l \otimes D_s$ . Im Gegensatz zum

Falle der spinlosen Teilchen, ist diese nicht irreduzibel,

sondern spaltet in eine direkte Summe irreduzibler

Darstellungen auf (Clebsch-Gordan Reihe)

$$D_l \otimes D_s = \bigoplus_{j=|l-s|}^{l+s} D_j, \quad (72)$$

wo  $j$  der totale Drehimpuls des Teilchens ist.

Die mit der Tensorprodukt darstellung  $\tilde{U} \otimes D_s$  von  $SU(2)$  verbundene Darstellung der Drehimpulsalgebra hat die Generatoren  $\vec{J} = (J_x, J_y, J_z)$ , wo

$$\vec{J} = \vec{L} \otimes 1 + 1 \otimes \vec{S}, \quad (73)$$

$\vec{L}$ , der Bahndrehimpuls, durch (64) und  $\vec{S}$ , der Spin, durch

$$\vec{S} = dD_s \left( \frac{1}{2} \vec{e} \right) \quad (74)$$

gegeben sind ; siehe Abschnitt 5.3, Gl. (56), und Abschnitt 5.4, Gl. (27).

Falls  $SU(2)$  für ein solches System eine dynamische Symmetrie ist, so sind  $\vec{J}^2$  und  $J_z \equiv J_3$  Erhaltungsgrößen, die mit dem Hamiltonoperator  $H$  vertauschen, nicht aber i. A.  $\vec{L}, L_z$  oder  $\vec{S}^2, S_z$  ; (Spin - Bahn Kopplung!).

Aus der zweifachen Aufspaltung der Terme der Alkali Spektren (für  $l \neq 0$ ) kann man vermuten, dass ein Elektron den Spin  $s = 1/2$  hat. Dies entspricht den Clebsch - Gordan Reihen :

$$\left. \begin{aligned} D_l \otimes D_{s=1/2} &= D_{l-1/2} \oplus D_{l+1/2}, \quad l \neq 0 \\ D_0 \otimes D_{1/2} &= D_{1/2} \end{aligned} \right\} \quad (75)$$

Offenbar vertauscht der Hamiltonoperator eines Alkali-Atoms nicht getrennt mit  $\vec{L}^2$  und  $\vec{S}^2$ , sondern nur mit  $\vec{J}^2$ , was der Tatsache entspricht, dass die zu  $D_{l-1/2}$  und  $D_{l+1/2}$  gehörigen Energie-

niveaux nicht entartet sind. Dies ist eine Folge der Spin - Bahn Kopplung, die einem Term

$$V_{SL} = A \vec{S} \cdot \vec{L} \quad (76)$$

im Hamiltonoperator entspricht.

Für die Wellenfunktionen der Elektronen benützt wir die Notation

$$\psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi^+(\vec{x}) \\ \psi^-(\vec{x}) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\vec{x}) \\ \psi_{\downarrow}(\vec{x}) \end{pmatrix},$$

mit

$$S_3 \psi(\vec{x}) = \frac{\hbar}{2} \sigma_3 \psi(\vec{x}) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\vec{x}) \\ -\psi_{\downarrow}(\vec{x}) \end{pmatrix}$$

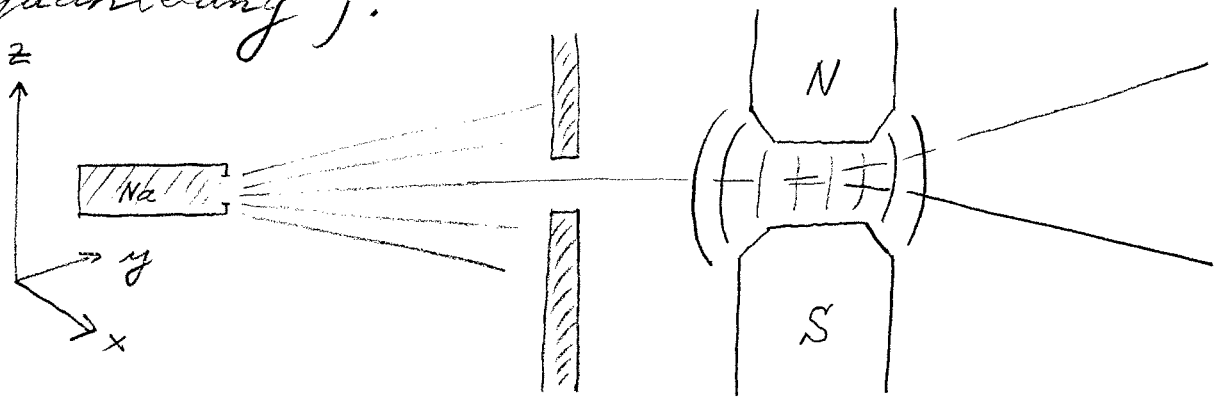
Als Interpretation bietet sich an:

$$\begin{aligned} |\psi^{\pm}(\vec{x})|^2 &= \text{W. keits dichte für ein Teilchen im} \\ &\text{Punkt } \vec{x} \in \mathbb{R}^3 \text{ mit } z\text{-Komponente des} \\ &\text{Spins} = \pm \frac{\hbar}{2}. \end{aligned} \quad (77)$$

Ein direkter experimenteller Nachweis des Elektronenspins geschieht im Stern - Gerlach Experiment.

Wie wir später verstehen werden, hat ein Natrium Atom im Grundzustand den inneren Drehimpuls  $s = \frac{1}{2}$ , der vom Spin des Leuchtelektrons in der

äußersten Schale herrührt, also direkt mit dem Elektronenspin zusammen hängt. Stern und Gerlach führten einen Strahl von Natrium Atomen durch ein inhomogenes Magnetfeld  $\vec{B}(\vec{x})$ . Der Strahl spaltete sich in zwei Teilstrahlen auf, ("Richtungsquantelung"):



Erklärung: Klassisch wirkt auf ein magnetisches Moment  $\vec{m}$  in einem inhomogenen Magnetfeld  $\vec{B}(\vec{x})$  die Kraft  $\vec{K}(\vec{x}) = \vec{\nabla}(\vec{m} \cdot \vec{B}(\vec{x}))$ . Die Aufspaltung des Natriumstrahles könnte also eine Folge davon sein, dass Natriumatome ein magnetisches Moment tragen, das vom magnetischen Moment des Leuchtelektrons kommt. Auf grund der klassischen Physi. würde man erwarten, dass  $\vec{m}$  proportional zum inne-

ren Drehimpuls,  $\vec{S}$ , ist, d.h.

$$\vec{m} = g \mu_B \frac{1}{\hbar} \vec{S} \quad (78)$$

wo  $\mu_B = e\hbar/2m_e c$  das Bohr'sche Magneton bedeutet ( $e < 0$ : Ladung des Elektrons,  $m_e$ : Masse des Elektrons) und  $g$  der gyromagnetische Faktor ist. Klassisch würde man erwarten, dass  $g = 1$ . Gemessen wird  $g = 2.0033$ . Da  $\vec{S}$  in der Quantenmechanik ein Operator ist, ist offenbar auch  $\vec{m}$  ein Operator. Die Kraft  $\vec{K}(\vec{x}) = \vec{\nabla}(\vec{m} \cdot \vec{B}(\vec{x}))$  leitet sich von einem "Potential",  $-\vec{m} \cdot \vec{B}(\vec{x})$ , ab.

Offenbar muss der Hamiltonoperator eines Elektrons (oder eines Natrium Atoms) im Magnetfeld  $\vec{B}(\vec{x})$  von der Form

$$H = H_0 - \vec{m} \cdot \vec{B}(\vec{x}) = H_0 - g \mu_B \frac{1}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}(\vec{x}) \quad (79)$$

sein, wo  $H_0$  mit  $\vec{\sigma}$  vertauschen soll. Der Term  $-\vec{m} \cdot \vec{B}$  ist die Zeeman Energie. Da das Magnetfeld  $\vec{B}(\vec{x})$  in  $z$ -Richtung steht, sind die Unterräume

$$\mathcal{H}_{\pm} = \{ \psi : \psi^{\mp}(\vec{x}) = 0 \}$$

invariant unter der Zeitentwicklung, d.h. die Projektionen auf  $\mathcal{H}_{\pm}$  vertauschen mit  $e^{-itH/\hbar}$ , oder, in anderen Worten,  $m_3$  ist eine Erhaltungsgrösse. Das

Zentrum,  $\vec{x}_{\pm}$ , eines "gepackten" Wellenpaketes  $\psi_{\pm}$  genügt nach dem Ehrenfest'schen Theorem näherungsweise der Bewegungsgleichung

$$m \ddot{\vec{x}}_{\pm} \approx \vec{F}(\vec{x}_{\pm}) \pm \frac{g\mu_B}{2} (\vec{\nabla} B_3)(\vec{x}_{\pm}), \quad (80)$$

wo  $\vec{F}$  spinunabhängig ist. Daher geht ein

Anfangszustand  $\psi_{in} = \begin{pmatrix} \psi_{in}^{+} \\ \psi_{in}^{-} \end{pmatrix}$  mit  $|\psi_{in}^{+}(\vec{x})| \simeq$

$\lambda |\psi_{in}^{-}(\vec{x})|$  in einem inhomogenen  $\vec{B}$ -Feld in

$z$ -Richtung in einen Zustand  $\psi_{out} = \begin{pmatrix} \psi_{out}^{+} \\ \psi_{out}^{-} \end{pmatrix}$

über mit der Eigenschaft, dass die Träger von

$\psi_{out}^{+}$  und  $\psi_{out}^{-}$  näherungsweise disjunkt sind,

d.h. der Strahl spaltet in zwei Teilstrahlen auf,

und  $\|\psi_{out}^{+}\|_2^2 \simeq \frac{\lambda^2}{1+\lambda^2}$ ,  $\|\psi_{out}^{-}\|_2^2 \simeq \frac{1}{1+\lambda^2}$ ,



(was die Intensitäten der zwei Teilstrahlen angibt). Unterwirft man nun die zwei Teilstrahlen einem weiteren  $\vec{B}$ -Feld in  $z$ -Richtung, so ist keine weitere Aufspaltung zu beobachten. Treten sie jedoch in ein inhomogenes  $\vec{B}$ -Feld in  $x$ -Richtung ein, so spaltet jeder Teilstrahl in zwei weitere Teilstrahlen gleicher Intensität auf. Denn

$$\begin{pmatrix} \psi \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \psi \\ \psi \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \psi \\ -\psi \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ \psi \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \psi \\ \psi \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \psi \\ -\psi \end{pmatrix}$$

$$\text{und} \quad S_x \begin{pmatrix} \psi \\ \psi \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \psi \\ \psi \end{pmatrix}, \quad S_x \begin{pmatrix} \psi \\ -\psi \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \psi \\ -\psi \end{pmatrix}.$$

Mit analogen Überlegungen überzeugt man sich, dass ein Strahl neutraler Teilchen vom Spin  $s$  mit magnetischem Moment sich beim Durchlaufen eines inhomogenen  $\vec{B}$ -Feldes in  $2s+1$  Teilstrahlen aufspaltet. Im Limes  $s \rightarrow \infty$  findet man die klassische Verteilung.

Wie kann man den gyromagnetischen Faktor  $g$

bestimmen? Eine mögliche Methode dazu ist die Bloch'sche Spin Resonanz, die durch die Nobelpreise von R. Ernst und K. Wüthrich wieder ins Gespräch gekommen ist, und die wir kurz diskutieren wollen. Wir betrachten ein einzelnes Elektron unter dem Einfluss eines räumlich konstanten, aber zeitabhängigen Magnetfeldes

$$\vec{B}(t) = (B_1 \cos \omega t, -B_1 \sin \omega t, B_0), \quad (81)$$

das offenbar um die  $z$ -Achse rotiert. Der Hilbertraum dieses Systems ist

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \otimes \mathbb{C}^2, \quad (82)$$

der (zeitabhängige!) Hamiltonoperator ist, wie in (79) angenommen,

$$H(t) = H_0(t) \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes H_1(t), \quad (83)$$

wo

$$\begin{aligned} H_1(t) &= - \frac{g\mu_B}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}(t) \\ &= -\hbar \omega_0 \frac{\sigma_3}{2} - \hbar \omega_1 \left[ \cos(\omega t) \frac{\sigma_1}{2} - \sin(\omega t) \frac{\sigma_2}{2} \right], \end{aligned} \quad (84)$$

mit  $\omega_0 = \frac{g\mu_B B_0}{\hbar}$  und  $\omega_1 = \frac{g\mu_B B_1}{\hbar}$ .

Die Schrödinger - Pauli Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = H(t) \psi_t$$

hat die Lösung

$$\psi_t = (V(t,0) \otimes U(t,0)) \psi_0, \quad (85)$$

wo  $V(t,0)$  der Propagator auf  $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$  zum Hamiltonian Operator  $H_0(t)$  ist (und  $V(t,0) = \exp(-itH_0/\hbar)$ , falls  $H_0$  zeitunabhängig ist), und  $U(t,0)$ , der Propagator auf

$\mathbb{C}^2$ , die Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t,0) = H_1(t) U(t,0) \quad (86)$$

erfüllt, mit  $U(t,s) = U(t,0)U(s,0)^{-1}$ ,  $U(s,s) = \mathbb{1}$ . Die

Gleichung (86) hat die Lösung

$$U(t,0) = e^{it\omega\sigma_3/2} e^{it[(\omega_0-\omega)\sigma_3 + \omega_1\sigma_1]/2}, \quad (87)$$

was wir nun durch Nachrechnen beweisen: Sei  $U(t,0)$  durch die rechte Seite von (87) definiert. Dann haben wir, dass

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t,0) &= -(\hbar\omega\sigma_3/2) U(t,0) \\ &\quad - e^{it\omega\sigma_3/2} \frac{\hbar}{2} [(\omega_0-\omega)\sigma_3 + \omega_1\sigma_1] e^{it[(\cdot)\sigma_3 + \omega_1\sigma_1]/2} \\ &= -(\hbar\omega_0\sigma_3/2) U(t,0) - \frac{\hbar\omega_1}{2} \left( e^{it\omega\sigma_3/2} \sigma_1 e^{-it\omega\sigma_3/2} \right) \\ &\quad \times U(t,0) \end{aligned}$$

$$= \left[ -\hbar \omega_0 \frac{\sigma_3}{2} - \hbar \omega_1 \cos \omega t \sigma_1 + \hbar \omega_1 \sin \omega t \sigma_2 \right] U(t, 0)$$

$$= H_1(t) U(t, 0), \quad \text{was zu beweisen war!}$$

In der zweitletzten Gleichung haben wir benutzt,

dass

$$e^{it \frac{\omega \sigma_3}{2}} \sigma_1 e^{-it \frac{\omega \sigma_3}{2}} = \left( \cos\left(\frac{\omega t}{2}\right) + i \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right) \sigma_3 \right) \sigma_1 \\ \times \left( \cos\left(\frac{\omega t}{2}\right) - i \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right) \sigma_3 \right)$$

$$= \underbrace{\left( \cos^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) \right)}_{\cos(\omega t)} \sigma_1 - \underbrace{2 \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right) \cos\left(\frac{\omega t}{2}\right)}_{\sin(\omega t)} \sigma_2,$$

in der letzten Gleichung haben wir (84) eingesetzt.

Aus der Gl. (87) für den Propagator  $U(t, 0)$  lässt sich die Wahrscheinlichkeit ausrechnen, dass der Spin eines Elektrons zur Zeit  $t$  umgeklappt ist, wenn er zur Zeit  $t=0$  in  $(+z)$ -Richtung war:

$$P_{\text{flip}}(t) = |U(t, 0)_{-+}|^2 = \frac{\omega_1^2}{2\Omega^2} (1 - \cos \Omega t), \quad (88)$$

wo  $\Omega = [(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2]^{1/2}$ . Es folgt, dass

$$\max_t P_{\text{flip}}(t) = \frac{\omega_1^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2} \leq 1, \quad (89)$$

und Resonanz tritt auf, d.h.  $\max_t P_{\text{flip}}(t) = 1$ , falls

$$\omega_0 = \omega, \quad \text{d.h.} \quad \frac{g\mu_B B_0}{\hbar} = \omega. \quad (90)$$

Diese Gl. zeigt, dass sich  $g$  aus der Beobachtung von Spinresonanz durch Messung von  $\omega$  bestimmen lässt.

Die Schrödingergleichung,  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = H \psi_t$ ,

mit  $H$  e.g. wie in (79), für Teilchen mit Spin

wurde zuerst von Pauli gefunden. Betrachten wir

ein Teilchen mit Masse  $m$ , elektrischer Ladung  $q$  und

magnetischem Moment  $\vec{m} = \frac{\mu}{\hbar} \vec{S}$  in einem

äusseren elektromagnetischen Feld  $(\vec{E}, \vec{B})$  mit

Vektorpotential  $\vec{A}$  und im Einflussbereich eines

äusseren Potentials  $V$ , so wird seine Zeitentwicklung

durch die Pauligleichung beschrieben, die die folgen

de Form hat:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = H(t) \psi_t, \quad \psi_t \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x) \otimes \mathcal{D}_S, \quad (91)$$

258

$$H(t) = \frac{1}{2m} \left[ \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{x}, t) + \left( \frac{\mu}{\hbar c} - \frac{q}{2mc^2} \right) \vec{E} \wedge \vec{S} \right]^2 - \frac{\mu}{\hbar} \vec{B}(\vec{x}, t) \cdot \vec{S} + V(\vec{x}, t). \quad (92)$$

Die Beiträge zu  $H(t)$  linear in  $\vec{E}$  beschreiben die sog. Spin-Bahn Kopplung, die eben für die Aufspaltung der Terme in den Alkali Spektren verantwortlich ist. Sie sind relativistische Korrekturen, die man sich folgendermassen erklären kann: Ein Teilchen, das mit Geschwindigkeit  $\vec{v}$  ein elektrisches Feld  $\vec{E}$  passiert, erfährt in seinem eigenen Ruhesystem ein magnetisches Feld  $\vec{B}' = \vec{B} - \frac{\vec{v}}{c} \wedge \vec{E}$ . Trägt es ein magnetisches Moment  $\vec{m} = \frac{\mu}{\hbar} \vec{S}$ , so beträgt seine Zeeman Energie

$$\begin{aligned} E_Z &= -\vec{m} \cdot \vec{B}' = -\vec{m} \cdot \vec{B} + \vec{m} \cdot \left( \frac{\vec{v}}{c} \wedge \vec{E} \right) \\ &= -\vec{m} \cdot \vec{B} + \frac{\vec{v}}{c} (\vec{E} \wedge \vec{m}) \end{aligned} \quad (93)$$

Der zweite Term auf der R.S. von (93) stimmt

bis auf den Koeffizienten mit dem Beitrag linear in  $\vec{E}$

auf der rechten Seite von (92) überein, denn der Geschwin-

digkeit  $\vec{v}$  entspricht in der Quantenmechanik der Opera-

$\frac{1}{m} \left[ \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{x}, t) \right]$ . Woher kommt die Diskrepanz zwi-

schen (92) und (93),  $\propto v/2mc^2$ ? Auf Grund der "äusseren

Kräfte ist die Bewegung des Teilchens beschleunigt, und

daher rotiert sein Ruhesystem mit einer Kreisfrequenz  $\omega$

um eine Achse  $\parallel (\vec{v} \wedge \vec{E})$ , (für  $|\vec{v}| \ll c$ ). Tatsächlich

ist die Winkelgeschwindigkeit

$$\vec{\omega}_T = - \frac{q}{mc} \frac{\vec{v}}{2c} \wedge \vec{E}, \quad (94)$$

wie zuerst von Thomas (1927) gefunden wurde. Die Bewegung

gleichung für den Spin  $\vec{S}$  im Ruhesystem lautet dann

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \frac{\mu}{\hbar} \vec{S} \wedge \vec{B}' - \vec{S} \wedge \vec{\omega}_T \quad (\text{Thomas Präzession}) \quad (95)$$

Dies ist die Bewegungsgl. zur modifizierten Zeeman Energie

$$\begin{aligned} E_Z &= - \vec{m} \cdot \vec{B}' + \vec{\omega}_T \cdot \vec{S} \\ &= - \vec{m} \cdot \vec{B} + \left( \frac{\mu}{\hbar c} - \frac{q}{2mc^2} \right) \vec{v} \cdot (\vec{E} \wedge \vec{S}), \end{aligned} \quad (96)$$

in Übereinstimmung mit (92). Die (nicht-triviale!) Herleitung

von (94) findet man z.B. in Jackson's Buch

über klassische Elektrodynamik.

In (96) fehlen Terme quadratisch in  $\vec{E}$ , die in (92) vorkommen. Solche Terme sind höhere relativistische Korrekturen. Für ein Teilchen mit Spin  $s = \frac{1}{2}$  gilt

$$S_i S_j = \frac{\hbar^2}{4} \delta_{ij} + i \frac{\hbar}{2} \varepsilon_{ijk} S_k,$$

und daher  $(\vec{E} \wedge \vec{S})^2 \propto \vec{E}^2 \cdot \mathbb{1}$ . Daher kann man die in  $\vec{E}$  quadratischen Terme in (92) in eine "Renormierung" von  $V$  absorbieren.

Falls das elektrische Feld  $\vec{E}$  von einem zentral-symmetrischen, elektrostatischen Potential  $\phi$  erzeugt wird (e.g. von einem Kern), so gilt

$$\vec{E}(\vec{x}) = - \frac{\vec{x}}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r}.$$

Dann ist der in  $\vec{E}$  lineare Term in (92) durch

$$\frac{1}{m} \left( \frac{\mu}{\hbar c} - \frac{q}{2mc^2} \right) \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} (\vec{S} \cdot \vec{L}) \quad (97)$$

(bis auf höhere Ableitungen von  $\phi$ ) gegeben, falls  $|\vec{\nabla} V| \ll |\vec{\nabla} \phi|$ . Das ist der übliche Ausdruck für die Spin-Bahn-Wechselwirkung; vergleiche mit (76)!



## Erhaltungssätze für die Pauli Gleichung.

Die Pauli Gleichung,  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = H(t) \psi_t$ , mit  $H(t)$  wie in (92) impliziert die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_c = 0, \text{ wo} \quad (98)$$

$$\rho(\vec{x}, t) = e \psi_t^*(\vec{x}) \cdot \psi_t(\vec{x}) = e (|\psi_t^+(\vec{x})|^2 + |\psi_t^-(\vec{x})|^2)$$

und

$$\begin{aligned} \vec{J}_c &= e \frac{1}{2m} \left( \psi^* \left( \frac{\hbar \vec{\nabla}}{i} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) \psi - \left[ \left( \frac{\hbar \vec{\nabla}}{i} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) \psi \right]^* \cdot \psi \right) \\ &= e \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \cdot \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi)^* \cdot \psi) + \frac{e}{mc} \psi^* \psi \vec{A}, \quad (99) \end{aligned}$$

(Konvektionsstromdichte). Die Magnetisierungsdichte ist

$$\vec{M}(\vec{x}, t) = \frac{g\mu_B}{\hbar} \psi_t^*(\vec{x}) \cdot \vec{S} \psi_t(\vec{x}) \quad (100)$$

Die magnetische Stromdichte  $(\vec{M}_1, \vec{M}_2, \vec{M}_3)$  ist durch

$$\vec{M}_j = \frac{g\mu_B}{2m\hbar i} (\psi^* \cdot \vec{\sigma} D_j \psi - (D_j \psi)^* \cdot \vec{\sigma} \psi) \quad (101)$$

gegeben, wo  $D_j$  eine kovariante Ableitung bedeutet;

$(D_j = \frac{\partial}{\partial x^j}, \text{ falls } \vec{A} = \vec{E} = 0)$ . Nur falls  $\vec{E} = 0$ , folgt

die Kontinuitätsgl.:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{M} + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^j} \vec{M}_j = 0.$$

Die Magnetisierungsdichte gibt einen Spinanteil zur

elektrischen Stromdichte:

$$\vec{J}_{\text{spin}} = c \vec{\nabla} \wedge \vec{M}, \quad (102)$$

und es folgt, dass  $\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{\text{spin}} = 0$ . Die totale elektrische Stromdichte,  $\vec{J}_{\text{em}}$ , ist durch

$$\vec{J}_{\text{em}} = \vec{J}_c + \vec{J}_{\text{spin}}, \quad (103)$$

gegeben, und es gilt:  $\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{\text{em}} = 0$ .

Ein einfaches Beispiel zur Pauli-Gleichung:

Das Elektron in einem homogenen Magnetfeld  $\vec{B}$ .

Wählen  $\vec{A} = \frac{1}{2} (\vec{B} \wedge \vec{x})$ , so dass  $\vec{\nabla} \wedge \vec{A} = \vec{B}$  und  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ .

Ohne Verlust an Allgemeinheit können wir  $\vec{B}$  in  $(+z)$ -Richtung wählen, d.h.  $\vec{B} = (0, 0, B)$ . Wir definieren

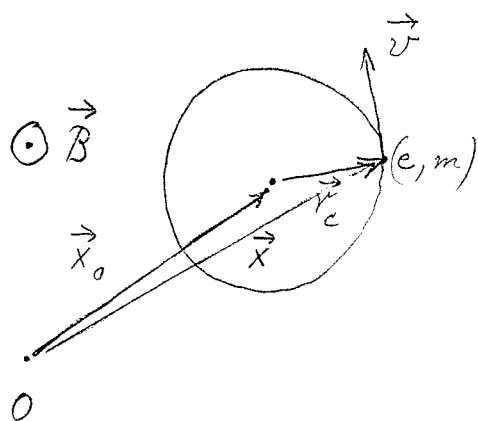
$$\begin{aligned} \pi_x &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{e}{2c} y B, \\ \pi_y &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{c} A_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{e}{2c} x B, \\ \pi_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}. \end{aligned} \quad (104)$$

$$H = \frac{1}{2m} (\pi_x^2 + \pi_y^2 + \pi_z^2) \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes \frac{g\mu_B}{2} B \sigma_3 \quad (105)$$

Die klassische Larmor- oder Zyklotronfrequenz ist

$$\omega_c = \frac{eB}{mc}. \quad (106)$$

Wir betrachten nun Projektion der Bewegung in  $(x-y)$ -Ebene.



$$\vec{x} = \vec{x}_0 + \vec{r}_c$$

$$\vec{v} = \dot{\vec{x}} = \dot{\vec{r}}_c, \text{ da } \dot{\vec{x}}_0 = 0$$

$$\text{Zentrifugalkraft} = \frac{mv^2}{r_c}, \quad r_c = |\vec{r}_c|$$

$$\text{Lorentzkraft} = eB \frac{v}{c}.$$

$$\text{Also: } \frac{mv^2}{r_c} = eB \frac{v}{c}, \text{ oder } \omega_c \equiv \frac{v}{r_c} = \frac{eB}{mc} \quad (107)$$

Weiter gilt klassisch:

$$\vec{x}_0 = \vec{x} - \vec{r}_c = \text{const.},$$

oder wegen (107),

$$\vec{x}_0 = \vec{x} + \varepsilon \frac{\vec{v}}{\omega_c} = \text{const.}, \quad (108)$$

wo  $\varepsilon = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ . Da  $m\vec{v} = \vec{\pi}$ , folgt, dass auch

$$\vec{w} = \vec{\pi} - m\omega_c \varepsilon \vec{x} = \text{const.}, \quad (109)$$

(Multiplikation von (108) mit  $-m\omega_c \varepsilon$ !).

In der QM werden aus  $\pi_x, \pi_y, \pi_z$  die Operatoren in (104). Durch Nachrechnen verifiziert man leicht, dass

$$[\pi_x, \pi_y] = i \frac{eB}{c} \hbar \mathbb{1} = i\hbar m\omega_c \mathbb{1}, \quad [\pi_{x/y}, \pi_z] = 0, \quad (110)$$

$$\text{und } [w_x, w_y] = -i\hbar m\omega_c \mathbb{1}, \quad [w_i, \pi_j] = 0. \quad (111)$$

Daraus folgt problemlos, dass

$$[H, w_j] = 0, \quad [H, \pi_z] = 0, \quad [H, \pi_i] = i\hbar\omega_c \varepsilon_{ij} \pi_j. \quad (112)$$

Schliesslich verifiziert man leicht, dass

$$L_z = \frac{w_x^2 + w_y^2 - \pi_x^2 - \pi_y^2}{2m\omega_c} = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad (111)$$

d.h.  $L_z$  ist die  $z$ -Komponente des Bahndrehimpulsoperators. Aus (110), (111) und (112) folgt dann, dass

$$[L_z, \pi_i] = i\hbar \varepsilon_{ij} \pi_j, \quad [L_z, w_i] = i\hbar \varepsilon_{ij} w_j,$$

und

$$[H, L_z] = 0,$$

(114)

wie es sich gehört!

Die Operatoren  $\pi_x$  und  $\pi_y$  sind die Generatoren von Translationen in der  $(x-y)$ -Ebene. Die erste Gleichung in (110) entspricht den Heisenberg'schen Vertauschungsrelationen für  $p$  und  $x$ . Sie sagt daher, dass die Translationen in der  $(x-y)$ -Ebene projektiv dargestellt werden; ("magnetische Translationen"!).

Aufgrund des von Neumann'schen Eindeigkeitsatzes für irreduzible Darstellungen der Heisenberg'schen VR, können  $\pi_x$  und  $\pi_y$  wie folgt gewählt werden:

$$\pi_x = i \frac{eB}{c} \hbar \frac{\partial}{\partial z}, \quad \pi_y = \frac{1}{2} - p_y, \quad (115)$$

wo  $p_y$  eine beliebige reelle Zahl ist.

Nach (111) gilt Analoges für  $w_x, w_y$ :

$$w_x = z, \quad w_y = i \frac{eB}{c} \hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (116)$$

Nun setzen wir  $z - p_y = i \frac{eB}{\sqrt{mc^2}} u, \quad \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\sqrt{mc^2}}{eB} \frac{\partial}{\partial u}.$  (1)

Dann ist  $H = H_0 + H_1$ , wo

$$H_0 = \left[ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{\omega_c^2}{2} u^2 \right] \otimes \mathbb{1}, \quad (118)$$

$$H_1 = \frac{\pi_z^2}{2m} \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes \frac{g\mu_B}{2} B \sigma_3.$$

$H_0$  ist der Hamilton Operator eines ein-dimensionalen harmonischen Oszillators. Daher sind die Eigen-

werte von  $H_0$  die Energiewerte  $E_n = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)$ ,

und die Eigenfunktionen sind Hermite Funktionen in  $u$ .

Mit den gleichen Argumenten wie für  $H_0$  sieht

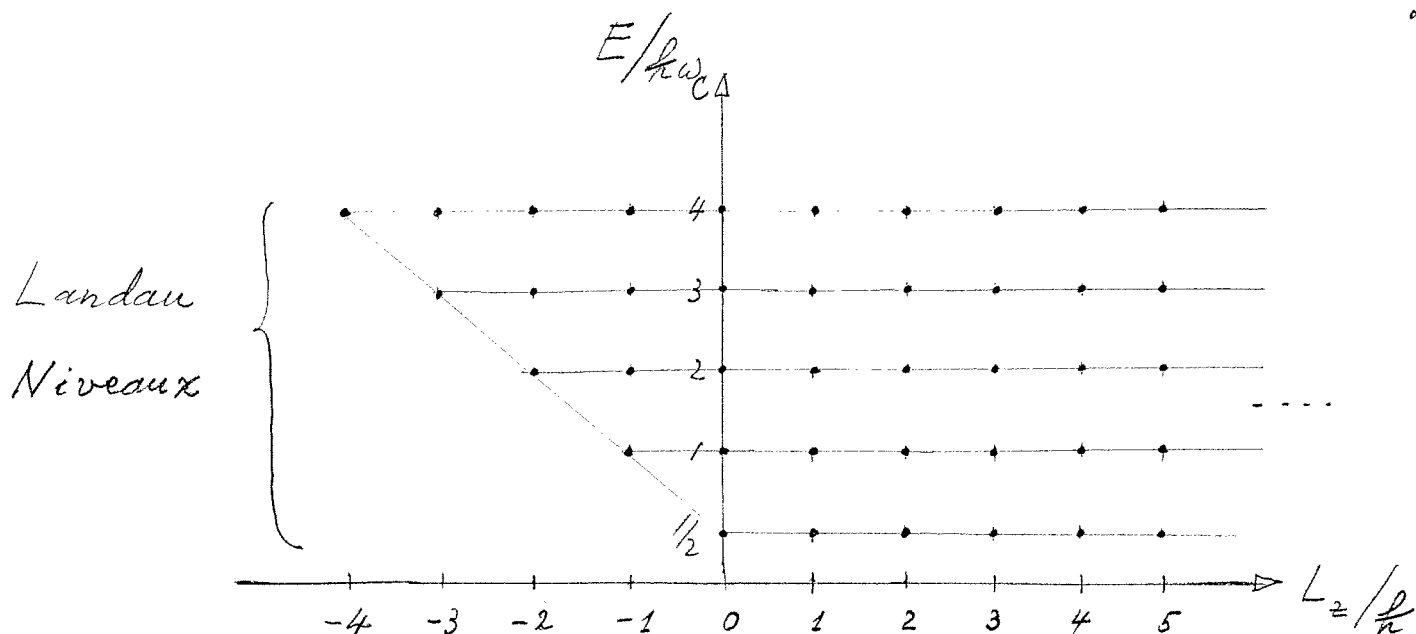
man, dass das Spektrum von  $L_z$  aus der Menge

$$\{\hbar l = \hbar(m-n): n, m = 0, 1, 2, \dots\} \quad (119)$$

besteht, d.h. das gemeinsame Spektrum von  $H_0$  und

$L_z$  besteht aus

$$\sigma(L_z, H_0) = \left\{ \hbar \left( l, \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) \right) : n = 0, 1, 2, \dots, l = -n, -n+1, \dots, 0, 1, \dots \right\} \quad (120)$$



Jedes Landau Niveau ist unendlich entartet. Die Entartung kann durch die  $z$ -Komponente des Drehimpuls indiziert werden. Im  $n^{\text{ten}}$  Landau Niveau sind die Eigenwerte von  $L_z$  die Zahlen  $-\hbar n, -\hbar(n-1), \dots, 0, \hbar, \dots$

Schliesslich bemerken wir, dass  $H_0$  und  $H_1$  vertauschen, und die zwei Terme in  $H_1$  vertauschen auch.

Damit ist das Spektrum von  $H$  durch

$$\hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) \pm \frac{g\mu_B}{2} B + \frac{(\hbar k)^2}{2m}, \quad (121)$$

$n=0, 1, 2, \dots$ ,  $k \in \mathbb{R}$  gegeben. Daraus sehen wir,

dass für  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$  und  $g=2$  ein Elektron

im  $(n-1)^{\text{ten}}$  Landau Niveau mit Spin "auf" die selbe Energie hat wie ein Elektron im  $n^{\text{ten}}$  Landau

Niveau mit Spin "ab". Diese Entartung ist die Folge einer quantenmechanischen Supersymmetrie.

Für  $g \neq 2$  ist diese aber gebrochen.

Die hier dargestellten Resultate stammen im Wesentlichen von L. D. Landau.

### 6.7. Die Clebsch-Gordan Koeffizienten von $SU(2)$ .

Nun kehren wir noch einmal kurz zur Darstellungstheorie der  $SU(2)$  zurück. Hätten wir nämlich schon ein Problem, wie die Alkali-Spektren, behandelt, das nicht triviale Spin-Bahn Wechselwirkungen involviert, so hätten wir gelernt, dass auch für rotationsinvariante Potentiale weder Bahndrehimpuls  $\vec{L}$ , noch Spin  $\vec{S}$  getrennt erhalten sein müssen, sondern nur der totale Drehimpuls  $\vec{J}$  erhalten ist. Für Zustände mit Bahndrehimpuls  $l$  und Spin  $s$  liegt der totale Drehimpuls zwischen  $|l-s|$  und  $l+s$ . In Gl. (72) fanden wir die Clebsch-Gordan Reihe

$$D_l \otimes D_s = \bigoplus_{i=|l-s|}^{l+s} D_j \quad (122)$$

und, entsprechend, die Zerlegung des Darstellungsraumes  $\mathcal{D}_l \otimes \mathcal{D}_s$  in invariante, irreduzible Unterräume:

$$\mathcal{D}_l \otimes \mathcal{D}_s = \bigoplus_{j=|l-s|}^{l+s} \tilde{\mathcal{D}}_j, \quad (123)$$

wo der Unterraum  $\tilde{\mathcal{D}}_j \cong \mathcal{D}_j$  die irreduzible Darstellung  $\mathcal{D}_j$  trägt. Eine natürliche Basis in  $\mathcal{D}_l \otimes \mathcal{D}_s$  ist

$$\{e_{m_1}^l \otimes e_{m_2}^s; -l \leq m_1 \leq l, -s \leq m_2 \leq s\}, \quad (124)$$

wo die Basisvektoren  $e_m^l$  wie in Gl. (25) & (4), Abschnitt 5.4, definiert sind. Eine natürliche Basis in  $\tilde{\mathcal{D}}_j$  ist

$$\{\tilde{e}_m^j; -j \leq m \leq j\}, \text{ wo } J_z \tilde{e}_m^j = m \tilde{e}_m^j, J_+ \tilde{e}_j^j = 0, \quad (125)$$

$$\text{und } \vec{J} \equiv \vec{L} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \vec{S}.$$

Wir wollen nun die Vektoren  $\tilde{e}_m^j$  nach der Basis  $e_{m_1}^l \otimes e_{m_2}^s$  entwickeln und die Entwicklungskoeffizienten, die sog. Clebsch-Gordan Koeffizienten, anschliessend explizit bestimmen:

$$\tilde{e}_m^j = \sum_{m_1=-l}^l \sum_{m_2=-s}^s (l, s, j / m_1, m_2, m) e_{m_1}^l \otimes e_{m_2}^s. \quad (126)$$

Da sowohl die Basis  $\{e_{m_1}^l \otimes e_{m_2}^s; \dots\}$  als auch die Basis  $\{\tilde{e}_m^j; -j \leq m \leq j\}_{j=|l-s|}^{l+s}$  orthonormal sind, ist die

Transformation (126) unitär. Offenbar gilt

$$(l, s, j / m_1, m_2, m) = \langle \tilde{e}_m^j, e_{m_1}^l \otimes e_{m_2}^s \rangle. \quad (127)$$



302

Da  $J_z = L_z \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes S_z$ , folgt aus (127), dass

$$(l, s, j | m_1, m_2, m) = 0, \quad \text{ausser wenn } m = m_1 + m_2. \quad (128)$$

Da

$$\overline{(l, s, j | m_1, m_2, m)} = \langle e_{m_1}^l \otimes e_{m_2}^s, \tilde{e}_m^j \rangle,$$

und (126) unitär ist, sind  $\overline{(l, s, j | m_1, m_2, m)}$  die Matrixelemente der zu (126) inversen Transformation (Umkehrtransformation). Daher gilt:

$$\sum_{m_1=-l}^l \sum_{m_2=-s}^s \overline{(l, s, j | m_1, m_2, m)} (l, s, j' | m_1, m_2, m') = \delta_{jj'} \delta_{mm'}, \quad (129)$$

und

$$\sum_{\substack{l+s \\ j=|l-s|}}^l \sum_{m=-j}^j \overline{(l, s, j | m_1, m_2, m)} (l, s, j | m'_1, m'_2, m) = \delta_{m, m'_1} \delta_{m_2, m'_2} \quad (130)$$

Nun wollen wir die Clebsch-Gordan Koeffizienten

$(l, s, j | m_1, m_2, m)$  explizit berechnen. Dazu gibt es

zwei Methoden, eine rekursive und eine invarianten-

theoretische.

Zuerst skizzieren wir die rekursive Methode:

Da  $\max j = l+s$ ,  $\max m = \max(m_1+m_2) = l+s$ , ist

$$\tilde{e}_{l+s}^{l+s} = e_l^l \otimes e_s^s \quad (131)$$

Für diesen Vektor gilt natürlich

$$J_+ \tilde{e}_{l+s}^{l+s} = 0,$$

und wir können nach Gl. (29), Abschnitt 5.4, oder Gl. (54), Abschnitt 5.5, rekursiv definieren

$$\tilde{e}_m^{l+s} = \frac{1}{\sqrt{(j+m+1)(j-m)}} J_- \tilde{e}_{m+1}^{l+s}, \quad (132)$$

wo  $J_- \equiv L_- \otimes 1 + 1 \otimes S_-$ ,  $j = l+s$ ,  $\hbar = 1$ .

Nach Abschnitt 5.5 spannen die Vektoren  $\{\tilde{e}_m^{l+s}\}_{m=-(l+s)}^{l+s}$

$\tilde{\mathcal{D}}_{l+s}$  auf. Der Operator  $J_z$  hat genau zwei linear unabhängige Eigenvektoren zum Eigenwert  $m = l+s-1$ :

$e_{l-1}^l \otimes e_s^s$  und  $e_l^l \otimes e_{s-1}^s$ . Auch die Vektoren

$$\tilde{e}_{l+s-1}^{l+s} = \frac{1}{\sqrt{2(l+s)}} J_- (e_l^l \otimes e_s^s) = \frac{1}{\sqrt{2(l+s)}} (\sqrt{l} e_{l-1}^l \otimes e_s^s + \sqrt{s} e_l^l \otimes e_{s-1}^s), \quad (133)$$

und

$$\tilde{e}_? = \frac{1}{\sqrt{2(l+s)}} (\sqrt{s} e_{l-1}^l \otimes e_s^s - \sqrt{l} e_l^l \otimes e_{s-1}^s) \quad (134)$$

sind daher Eigenvektoren von  $J_z$  zum Eigenwert  $l+s-1$ .

Der Vektor  $\tilde{e}_{l+s-1}^{l+s}$  in (133) gehört zu  $\tilde{\mathcal{D}}_{l+s}$ . Da das

Spektrum von  $J_z / \tilde{\mathcal{D}}_{l+s}$  einfach ist, muss (134) orthogonal zu

$\tilde{\mathcal{D}}_{l+s}$  sein. Daher muss  $\tilde{e}_?$  in (134) der Vektor  $\tilde{e}_{l+s-}$

"höchstes Gewicht" in  $\tilde{\mathcal{D}}_{l+s-1}$  sein! Nun kann man rekursiv definieren (siehe Glw. (29) & (55), Abschnitte 5.4, resp. 5.5):

$$\tilde{e}_m^{l+s-1} = \frac{1}{\sqrt{(j+m+1)(j-m)}} J_- \tilde{e}_{m+1}^{l+s-1}, \quad j=l+s-1, \quad (135)$$

und die Vektoren  $\{\tilde{e}_m^{l+s-1}\}_{m=-(l+s-1)}^{l+s-1}$  spannen  $\tilde{\mathcal{D}}_{l+s-1}$

auf. Hierauf definiert man  $\tilde{e}_{l+s-2}^{l+s-2}$  als den zu

$\tilde{e}_{l+s-2}^{l+s}$  und  $\tilde{e}_{l+s-2}^{l+s-1}$  orthogonalen Eigenvektor in

$\mathcal{D}_l \otimes \mathcal{D}_s$  zum Eigenwert  $l+s-2$  von  $J_z$  und definiert die

Vektoren  $\tilde{e}_m^{l+s-2}$ ,  $-l-s+2 \leq m < l+s-2$ , rekursiv über

eine zu (132), (135) analoge Rekursionsformel. [Man

beachte, dass der Eigenraum von  $J_z$  zum Eigenwert  $l+s-2$  gerade drei-dimensional ist;

$$\text{Span} \{e_l^l \otimes e_{s-2}^s, e_{l-1}^l \otimes e_{s-1}^s, e_{l-2}^l \otimes e_s^s\}$$

ist eine Basis, so dass  $\tilde{e}_{l+s-2}^{l+s-2}$  bis auf eine Phase

eindeutig ist!] Etc.. Vollständige Induktion, die

nach  $n = \min(2l, 2s)$  Schritten abbricht, erledigt

unsere Konstruktion. Die hier skizzierte Methode lässt sich leicht auf allgemeine einfache Liealgebren verallgemeinern.

Um allgemeine Formeln für die Clebsch-Gordan Koeffizienten herzuleiten, ist die invarianten-theoretische Methode jedoch wirksamer. Wir betrachten drei Kopien

von  $\mathcal{D}_{1/2} = \mathbb{C}^2$ ,  $\mathbb{C}_x^2$ ,  $\mathbb{C}_y^2$  und  $\mathbb{C}_z^2$  mit den Basen

$$x_+, y_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, x_-, y_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \text{ und} \quad (136)$$

$$\bar{z}_+ = (1, 0), \bar{z}_- = (0, 1).$$

Nun gilt nach Abschnitt 5.4, Gln. (4) und (25), dass

die Vektoren

$$\begin{aligned} e_m^l(x) &:= \sqrt{\binom{2l}{l+m}} x_+^{\otimes_s(l+m)} \otimes x_-^{\otimes_s(l-m)}, \quad -l \leq m \leq l, \\ e_m^s(y) &:= \sqrt{\binom{2s}{s+m}} y_+^{\otimes_s(s+m)} \otimes y_-^{\otimes_s(s-m)}, \quad -s \leq m \leq s, \end{aligned} \quad (137)$$

orthonormale Basen in  $\mathcal{D}_l$ , resp.  $\mathcal{D}_s$ , bilden, und

die Vektoren

$$\overline{e_m^j(z)} := \sqrt{\binom{2j}{j+m}} \bar{z}_+^{\otimes_s(j+m)} \otimes \bar{z}_-^{\otimes_s(j-m)}, \quad -j \leq m \leq j, \quad (138)$$

bilden die zu  $\{e_m^j\}_{m=-j}^j$  duale Basis des Dualraums

von  $\mathcal{D}_m^j$ .

Für  $|l-s| \leq j \leq l+s$  betrachten wir nun die  $SU(2)$ .

Invariante

$$\begin{aligned} I_j(x, y, \bar{z}) := & \left( x_+ \otimes y_- - x_- \otimes y_+ \right)^{\otimes_s(l+s-j)} \\ & \otimes_s \left( x_+ \otimes \bar{z}_+ + x_- \otimes \bar{z}_- \right)^{\otimes_s(l-s+j)} \\ & \otimes_s \left( y_+ \otimes \bar{z}_+ + y_- \otimes \bar{z}_- \right)^{\otimes_s(s-l+j)} \end{aligned} \quad (139)$$

Man verifiziert leicht, dass

$$I_j(Ux, Uy, \bar{z}U^*) = I_j(x, y, \bar{z}), \quad \forall U \in SU(2); \quad (140)$$

(man beachte Glw. (1), (2) und (3), Abschnitt 5.4).

Der erste Faktor auf der R. S. von (139) multipliziert sich mit  $(\det U = 1)^{l+s-j}$ ,  $\forall U \in SU(2)$ , die zwei letzten Faktoren sind invariant unter  $U$ , da  $U \in SU(2)$  eine unitäre  $2 \times 2$  Matrix ist. In Abschnitt 5.4, Glw.

(5), (11), (14), haben wir gezeigt, dass

$$e_m^j(Uz) =: \sum_{m'} D^j(U)_{m'm} e_{m'}^j(z) \quad (141)$$

die irreduzible unitäre Darstellung von  $SU(2)$  zum

Spin  $j$  definiert. Die Invariante  $I_j$  ist ein Polynom vom Grade  $2j$  in  $\bar{z}_+, \bar{z}_-$  von der Form

$$I_j(x, y, \bar{z}) = \sum_{m=-j}^j \underbrace{\sqrt{\binom{2j}{j+m}} \bar{z}_+^{\otimes_s(j+m)} \otimes \bar{z}_-^{\otimes_s(j-m)}}_{= e_m^j(z)} \otimes E_m^j, \quad (142)$$

mit  $E_m^j = E_m^j(x, y)$ . Da  $I_j$ , laut (140),  $SU(2)$ -

invariant ist und auf grund von (141), müssen

die Koeffizientenvektoren  $E_m^j$  in (142) eine Basis

für den Darstellungsraum  $\tilde{\mathcal{D}}_j \cong \mathcal{D}_j$  in  $\mathcal{D}_\ell \otimes \mathcal{D}_s$

zum Spin  $j$  bilden. Nun haben wir:

$$\begin{aligned} (x_+ \otimes y_- - x_- \otimes y_+)^{\otimes_s(l+s-j)} \\ = \sum_{\alpha=0}^{l+s-j} (-1)^\alpha \binom{l+s-j}{\alpha} (x_+ \otimes y_-)^{\otimes_s(l+s-j-\alpha)} (x_- \otimes y_+)^{\otimes_s \alpha}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (x_+ \otimes \bar{z}_+ + x_- \otimes \bar{z}_-)^{\otimes_s(l-s+j)} \\ = \sum_{\beta=0}^{l-s+j} \binom{l-s+j}{\beta} (x_+ \otimes \bar{z}_+)^{\otimes_s(l-s+j-\beta)} \otimes (x_- \otimes \bar{z}_-)^{\otimes_s \beta}, \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
 & (y_+ \otimes \bar{z}_+ + y_- \otimes \bar{z}_-)^{\otimes_s (s-l+j)} \\
 &= \sum_{\gamma=0}^{s-l+j} \binom{s-l+j}{\gamma} (y_+ \otimes \bar{z}_+)^{\otimes_s \gamma} \otimes (y_- \otimes \bar{z}_-)^{\otimes_s (s-l+j-\gamma)} \quad (143)
 \end{aligned}$$

Nun setzen wir  $m_1 = l - \alpha - \beta$ ,  $m_2 = \gamma + \alpha - s$  und erhalten aus (139) und (143):

$$\begin{aligned}
 I_j(x, y, \bar{z}) &= \sum_{m_1, m_2} \sum_{\alpha} (-1)^\alpha \binom{l+s-j}{\alpha} \binom{l-s+j}{l-m_1-\alpha} \binom{s-l+j}{s+m_2-\alpha} \\
 &\quad x_+^{\otimes_s (l+m_1)} \otimes x_-^{\otimes_s (l-m_1)} \otimes y_+^{\otimes_s (s+m_2)} \otimes y_-^{\otimes_s (s-m_2)} \\
 &\quad \bar{z}_+^{\otimes_s (j+m_1+m_2)} \otimes \bar{z}_-^{\otimes_s (j-m_1-m_2)} \\
 &\equiv (l+s-j)! (l-s+j)! (s-l+j)! \\
 &\quad \times \left( \sum_{m_1, m_2} c^j_{m_1, m_2} e^l_{m_1}(x) \otimes e^s_{m_2}(y) \otimes \overline{e^j_{m_1+m_2}(z)} \right) \quad (144)
 \end{aligned}$$

Durch Koeffizientenvergleich finden wir mit (137)

$$c^j_{m_1, m_2} = \sum_{\alpha} (-1)^\alpha \frac{1}{\alpha!} \frac{\left[ \binom{2l}{l+m_1} \binom{2s}{s+m_2} \binom{2j}{j+m_1+m_2} \right]^{-1/2}}{(l+s-j-\alpha)! (l-m_1-\alpha)! (j-s+m_1+\alpha)! (s+m_2-\alpha)! (j-l-m_2+\alpha)!}$$

Wir schliessen aus (142) und (144), dass die Vektoren

$$\tilde{e}^j_m(x, y) := \int_m^j \sum_{\substack{m_1, m_2 \\ m_1+m_2=m}} c^j_{m_1, m_2} e^l_{m_1}(x) \otimes e^s_{m_2}(y) \quad (145)$$

Eigenvektoren von  $J_z$  zum Eigenwert  $m$ ,  $-j \leq m \leq j$ , sind und nach der Darstellung  $D_j$  transformieren, wobei wir  $\rho_m^j$  so wählen, dass  $\tilde{e}_m^j$  auf 1 normiert ist.

Der Clebsch-Gordan Koeffizient  $(l, s, j | m_1, m_2, m)$  ist nun durch

$$(l, s, j | m_1, m_2, m) = \rho_m^j C_{m_1, m_2}^j$$

gegeben. Nach ca. zwei Seiten Rechnungen findet man

$$(l, s, j | m_1, m_2, m) = [(l+s+j+1)!]^{-1/2} [(2j+1)(j+l-s)! (j-l+s)! (l+s-j)! (l+m_1)! (l-m_1)! (s+m_2)! (s-m_2)! (j+m)! (j-m)!]^{1/2} \left\{ \sum_{\alpha=0}^{l+s-j} \frac{(-1)^\alpha}{\alpha!} [(l+s-j-\alpha)! (l-m_1-\alpha)! (j-s+m_1+\alpha)! (s+m-\alpha)! (j-l-m_2+\alpha)!]^{-1} \right\} \quad (146)$$

$m = m_1 + m_2$ ,  $|l-s| \leq j \leq l+s$ . Mit den hier gewählten

Phasen sind die Clebsch-Gordan Koeffizienten reell.

Sie sind ausführlich tabelliert. (Für mehr Details konsultiere man ein Buch.)



Irreduzible Darstellungen der Permutationsgruppe  $S_N$ .

Betrachten die Gruppenalgebra,  $R$ , von  $S_N$

$$R := \sum_{\pi \in S_N} K \pi \equiv \left\{ \sum_{\pi \in S_N} \lambda_{\pi} \pi : \lambda_{\pi} \in K \right\}, \text{ wo}$$

$K = \mathbb{R}$ , oder  $= \mathbb{Q}$ , oder  $= \mathbb{C}$ .

$R$  enthält Linksideale. Jedes Linksideal von  $R$  ist

( eine direkte Summe minimaler Linksideale. Die minimalen Linksideale tragen irreduzible Darstellungen

von  $S_N$ , (definiert durch Linksmultiplikation mit  $\pi \in S_N$ ). Jedes Linksideal wird von einem Projektor

(Idempotenten) in  $R$  erzeugt. Minimale Projektoren

entsprechen irreduziblen Darstellungen und werden, im Fall

von  $S_N$ , durch Young'sche Diagramme charakterisiert:

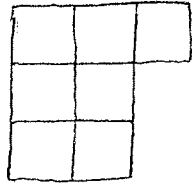
Wir schreiben die Ziffern  $1, \dots, N$  in  $h$  Zeilen von

Kästchen so, dass in der  $v^{\text{ten}}$  Zeile  $\alpha_v$  Kästchen

Platz finden, mit

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 &\geq \alpha_2 \geq \dots \geq \alpha_h, \text{ und} \\ \sum_{v=1}^h \alpha_v &= N. \end{aligned} \right\} \quad (8.21)$$

Bsp.



$$(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = (3, 2, 2), \quad N = 7.$$

Wir bezeichnen ein solches Diagramm von Kästchen mit  $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_h)$ , das mit Ziffern von 1 bis  $N$  gefüllte Young'sche Diagramm mit  $\Sigma_\alpha$ ; dabei soll  $\alpha$  (8.21) genügen.

Auf den Diagrammen  $\alpha$  definieren wir eine Ordnung

$$\alpha > \beta, \text{ falls } \alpha_v - \beta_v > 0,$$

für das kleinste  $v$  für welches die Differenz nicht verschwindet. z. B. für  $N=5$ :

$$(5) > (4, 1) > (3, 2) > (3, 1, 1) > (2, 2, 1) > (2, 1, 1, 1) > (1, 1, 1, 1, 1).$$

Für ein vorgegebenes Young'sches Diagramm  $\Sigma_\alpha$

bezeichne  $P(\Sigma_\alpha)$  die Untergruppe aller Per-

mutationen, die nur die Ziffern innerhalb der

Zeilen vertauschen, die Zeilen insgesamt aber invariant lassen. Ebenso bezeichne  $Q(\Sigma_\alpha)$  die UG derjenigen Permutationen, die nur die Ziffern innerhalb der Kolonnen vertauschen.

Für  $\pi \in S_N$ , bezeichne  $\pi \Sigma_\alpha$  das Young Diagramm, das man aus  $\Sigma_\alpha$  durch Anwendung von  $\pi$  erhält. Für  $q \in Q(\Sigma_\alpha)$  läßt  $\pi q \pi^{-1}$  die Kolonnen von  $\pi \Sigma_\alpha$  invariant, d.h.

$$Q(\pi \Sigma_\alpha) = \pi Q(\Sigma_\alpha) \pi^{-1} \quad (8.22)$$

Die Gruppenalgebra  $R$  enthält die Elemente

$$\left. \begin{aligned} S(\Sigma_\alpha) &= \sum_{p \in P(\Sigma_\alpha)} p \\ A(\Sigma_\alpha) &= \sum_{q \in Q(\Sigma_\alpha)} \text{sign}(q) \cdot q \end{aligned} \right\} \quad (8.23)$$

Man verifiziert sofort, dass

$$\left. \begin{aligned} p S(\Sigma_\alpha) &= S(\Sigma_\alpha) p = S(\Sigma_\alpha), \quad \forall p \in P(\Sigma_\alpha) \\ q A(\Sigma_\alpha) \operatorname{sign}(q) &= A(\Sigma_\alpha) q \operatorname{sign}(q) = A(\Sigma_\alpha), \\ \forall q &\in Q(\Sigma_\alpha). \end{aligned} \right\} \quad (8.24)$$

$$\Rightarrow S(\Sigma_\alpha)^2 = f_\alpha S(\Sigma_\alpha), \text{ und } A(\Sigma_\alpha)^2 = f'_\alpha A(\Sigma_\alpha),$$

für Konstanten  $f_\alpha, f'_\alpha \in \mathbb{Z}$ .

Lemma 1. Seien  $\Sigma_\alpha, \Sigma_\beta$  zwei Young Diagramme, mit  $\alpha \geq \beta$ . Falls es in  $\Sigma_\alpha$  in keiner Zeile zwei Ziffern gibt, die in  $\Sigma_\beta$  in der gleichen Kolonne vorkommen, dann gilt, dass

$$\alpha = \beta,$$

und  $\Sigma_\alpha$  wird durch eine Permutation  $p \cdot q$ ,  $p \in P(\Sigma_\alpha), q \in Q(\Sigma_\alpha)$ , in  $\Sigma_\beta$  übergeführt, d.h.

$$\Sigma_\beta = p \cdot q \Sigma_\alpha. \quad (8.25)$$

Beweis.  $\alpha \geq \beta \Rightarrow \alpha_1 \geq \beta_1. \quad (8.26)$

Falls die  $\alpha_1$  Ziffern in der ersten Zeile von  $\Sigma_\alpha$

197

in verschiedenen Kolonnen von  $\Sigma_\beta$  vorkommen,  
dann hat  $\Sigma_\beta$  mindestens  $\alpha_1$  Kolonnen.

$$\Rightarrow \alpha_1 \leq \beta_1 \Rightarrow \alpha_1 = \beta_1, \text{ wegen (8,26)!}$$

Die Ziffern der ersten Zeile von  $\Sigma_\alpha$  können  
alle in die erste Zeile von  $\Sigma_\beta$  gebracht  
werden, indem man eine Permutation  $q'_1 \in Q(\Sigma_\beta)$   
anwendet.

Weiter impliziert nun  $\alpha \geq \beta$ , dass  $\alpha_2 \geq \beta_2$ .

In der 2. Zeile von  $\Sigma_\alpha$  sind  $\alpha_2$  Ziffern.

Falls diese in verschiedenen Kolonnen von

$q'_1 \Sigma_\beta$  sitzen, dann muss  $q'_1 \Sigma_\beta \setminus \{1. \text{ Zeile} \}$

immer noch mind.  $\alpha_2$  Kolonnen haben.

Also  $\alpha_2 \leq \beta_2$ , und daher  $\alpha_2 = \beta_2$ .

Diese Ziffern kann man in die 2. Zeile von  
 $\Sigma_\beta$  bringen durch eine Permutation  $q'_2$ , die  
die Kolonnen von  $q'_1 \Sigma_\beta$  und dessen 1. Zeile

invariant lässt.

Nun fährt man so weiter und erhält schließlich ein Diagramm  $q' \Sigma_\beta = q'_h q'_{h-1} \dots q'_1 \Sigma_\beta$  dessen Zeilen mit denjenigen von  $\Sigma_\alpha$  übereinstimmen. Daher existiert ein  $p \in P_\alpha$  so, dass

$$p \Sigma_\alpha = q' \Sigma_\beta.$$

Nun lässt  $q'$  die Kolonnen von  $\Sigma_\beta$  invariant:

$q'$  lässt also auch die Kolonnen von  $q' \Sigma_\beta = p \Sigma_\alpha$  invariant. Daher ex.  $q$  so, dass

$$q' = p q^{-1} p^{-1}, \quad q \in Q(\Sigma_\alpha)$$

Also

$$p q^{-1} p \Sigma_\beta = p \Sigma_\alpha,$$

oder

$$\Sigma_\beta = p q \Sigma_\alpha, \quad p \in P(\Sigma_\alpha), q \in Q(\Sigma_\alpha)$$

Q.E.D.

Korollar 2.

$$A(\Sigma_\beta) S(\Sigma_\alpha) = 0, \quad \text{falls } \alpha > \beta. \quad (8.27)$$

Beweis. Falls  $\alpha > \beta$ , dann gibt es nach dem

Lemma zwei Ziffern, die in einer einzigen Zeile von  $\Sigma_\alpha$  auftreten und die in der gleichen Kolonne von  $\Sigma_\beta$  sind. Sei  $t$  die Transposition die diese zwei Ziffern vertauscht. Nach (8.24) gilt dann

$$\begin{aligned} A(\Sigma_\beta) S(\Sigma_\alpha) &= A(\Sigma_\beta) t t^{-1} S(\Sigma_\alpha) \\ &= \text{sign}(t) A(\Sigma_\beta) S(\Sigma_\alpha) \\ &= -A(\Sigma_\beta) S(\Sigma_\alpha) \Rightarrow A(\Sigma_\beta) S(\Sigma_\alpha) = 0! \\ &\quad \text{Q.E.D.} \end{aligned}$$

Genauso zeigt man, dass

$$S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\beta) = 0, \text{ falls } \alpha > \beta. \quad (8.28)$$

Weiter folgt, dass für  $\alpha > \beta$

$$S(\Sigma_\alpha) \pi A(\Sigma_\beta) \pi^{-1} = 0, \quad \forall \pi \in S_N, \quad (8.29)$$

da  $\pi A(\Sigma_\beta) \pi^{-1} = A(\pi \Sigma_\beta)$  zu  $\pi \Sigma_\beta$  gehört.

Nun multipliziere man (8.29) mit  $\pi$  und summiere die erhaltenen Gleichungen,

multipliziert mit beliebigen reellen Zahlen, über  $\pi \in S_N$ . Dann folgt, dass

$$S(\Sigma_\alpha) R A(\Sigma_\beta) = 0, \quad \forall \alpha > \beta.$$

D.h. die Linksideale  $R A(\Sigma_\beta)$  werden von allen  $S(\Sigma_\alpha)$ , mit  $\alpha > \beta$ , annihiliert.

$$\Rightarrow S(\Sigma_\alpha) / R A(\Sigma_\beta) = 0. \quad (8.30)$$

Wir bemerken nun, dass der lineare Raum

$V(\Sigma_\beta) := R A(\Sigma_\beta)$  eine durch Linksmultiplikation

mit  $\pi \in S_N$  definierte Darstellung,  $\rho_{\Sigma_\beta}$ , von  $S_N$

trägt. In dieser Darstellung sind die Operatoren

$S(\Sigma_\alpha)$ , für alle  $\Sigma_\alpha$  mit  $\alpha > \beta$ , gleich 0.

Hingegen gilt, dass  $S(\Sigma_\alpha) / V(\Sigma_\alpha) \neq 0$ . Um das

zu zeigen, genügt es nachzuweisen, dass

$$S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \neq 0, \quad (8.31)$$

da  $A(\Sigma_\alpha) \in V(\Sigma_\alpha)$ .

Zum Beweis von (8.31) rechnen wir mit (8.23)



nach, dass

$$\begin{aligned}
 S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) &= 1 + \left( \sum_{1 \neq p \in P(\Sigma_\alpha)} p \right) A(\Sigma_\alpha) \\
 &\quad + S(\Sigma_\alpha) \left( \sum_{1 \neq q \in Q(\Sigma_\alpha)} \text{sign}(q) q \right) \\
 &= 1 + \sum_{1 \neq \pi \in S_N} \lambda_\pi \pi \neq 0 !
 \end{aligned}$$

Hier sind die  $\lambda_\pi$  gewisse reelle Zahlen.

Aus (8.30) und (8.31) folgt, dass die Darstellung

$\rho_{\Sigma_\alpha}$  von  $S_N$  auf  $V(\Sigma_\alpha)$  eine irreduzible Darstellung  $\rho_{\Sigma_\alpha}^\circ$  von  $S_N$  enthalten muss, die in keiner

der Darstellungen  $\rho_{\Sigma_\beta}$  mit  $\beta < \alpha$  auftreten kann.

Die Äquivalenzklasse der Darstellung  $\rho_{\Sigma_\alpha}^\circ$  soll

nun bestimmt werden. Bevor wir dazu kommen,

wollen wir uns aber überlegen, dass die Darstellungen

$\rho_{\pi \Sigma_\alpha}$  und  $\rho_{\Sigma_\alpha}$  zueinander äquivalent sind.

Diese Äquivalenz wird eine Äquivalenz zwischen

irreduziblen Teildarstellungen,  $\rho_{\pi \Sigma_\alpha}^\circ$  und  $\rho_{\Sigma_\alpha}^\circ$ ,

nach sich ziehen.

Wir definieren eine 1-1, invertierbare Abbildung

$$I_\pi : V(\Sigma_\alpha) \rightarrow V(\pi \Sigma_\alpha), \quad (8.32)$$

indem wir setzen

$$I_\pi r A(\Sigma_\alpha) = \pi r \pi^{-1} A(\pi \Sigma_\alpha), \quad \forall r \in \mathcal{R}. \quad (8.33)$$

Falls  $r A(\Sigma_\alpha) \neq 0$ , dann ist auch

$$\pi r A(\Sigma_\alpha) \pi^{-1} = \pi r \pi^{-1} \pi A(\Sigma_\alpha) \pi^{-1}$$

$$\stackrel{(8.23)}{=} \pi r \pi^{-1} A(\pi \Sigma_\alpha) \neq 0!$$

Also ist  $I_\pi$  wohl definiert. Weiter ist  $I_\pi$  invertierbar, denn  $I_\pi^{-1} = I_{\pi^{-1}}$  auf  $V(\pi \Sigma_\alpha)$ .

Nun gilt auf grund von (8.33), dass

$$\begin{aligned} \rho_{\pi \Sigma_\alpha}(\pi) \rho_{\pi \Sigma_\alpha}(\pi') \rho_{\pi \Sigma_\alpha}(\pi^{-1}) I_\pi r A(\Sigma_\alpha) \\ \stackrel{(8.33)}{=} \pi \pi' \pi^{-1} (\pi r \pi^{-1}) A(\pi \Sigma_\alpha) \\ = \pi (\pi' r) \pi^{-1} A(\pi \Sigma_\alpha) \\ \stackrel{(8.33)}{=} I_\pi \pi' r A(\Sigma_\alpha) = I_\pi \rho_{\Sigma_\alpha}(\pi') r A(\Sigma_\alpha), \end{aligned}$$

also

$$\rho_{\Sigma_\alpha}(\cdot) = I_\pi^{-1} \rho_{\pi \Sigma_\alpha}(\pi) \rho_{\pi \Sigma_\alpha}(\cdot) \rho_{\pi \Sigma_\alpha}(\pi)^{-1} I_\pi, \quad (8.34)$$

was die Äquivalenz beweist.

Die Darstellungen  $\rho_{\Sigma_\alpha}$  sind also für festes  $\alpha$  alle zueinander äquivalent!

Nun suchen wir die oben erwähnte, irreduzible Teildarstellung  $\rho_{\Sigma_\alpha}^\circ$  von  $\rho_{\Sigma_\alpha}$ . Dazu rechnen wir mit (8.23):

$$S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) = \sum_{p \in P(\Sigma_\alpha)} \sum_{q \in Q(\Sigma_\alpha)} p q \operatorname{sign}(q).$$

Wegen (8.24) gilt, dass

$$p S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) q \operatorname{sign}(q) = S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha), \quad (8.35)$$

$\forall p \in P(\Sigma_\alpha), q \in Q(\Sigma_\alpha)$ . Wir zeigen nun, dass  $S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha)$ , bis auf Multiplikation mit  $\lambda \in \mathbb{R}$ , das einzige Element von  $\mathcal{R}$  ist, das (8.35) erfüllt.

Lemma 3. Sei  $a \in \mathcal{R}$  ein Element, das

$$p a q \operatorname{sign}(q) = a,$$

$\forall p \in P(\Sigma_\alpha), q \in Q(\Sigma_\alpha)$ , erfüllt. Dann gilt:

$$a = \lambda S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha), \lambda \in \mathbb{R}.$$

(8.36)

Beweis. Wir haben immer eine Entwicklung

$$a = \sum_{\pi \in S_N} \lambda_\pi \pi, \quad \lambda_\pi \in \mathbb{R}. \quad (8.37)$$

Wenn (8.37) in (8.36) eingesetzt wird, findet man, dass

$$\sum_{\pi \in S_N} \lambda_\pi \pi = \sum_{\pi \in S_N} \lambda_\pi \operatorname{sign}(q) p \pi q. \quad (8.38)$$

Auf der linken Seite von (8.38) hat der einzige Term  $\propto pq$  den Koeffizienten  $\lambda_{pq}$ . Auf der rechten Seite hat der einzige Term  $\propto pq$  den Koeffizienten  $\lambda_1 \operatorname{sign}(q)$ , (entspr.  $\pi = 1$ ). Also

$$\lambda_{pq} = \lambda_1 \operatorname{sign}(q), \quad (8.39)$$

$\forall p \in P(\Sigma_\alpha), q \in Q(\Sigma_\alpha)$ . ( $\Rightarrow \lambda_{pq}$  unabh. von  $p$ .)

Sei  $\pi \in S_N$  nicht von der Form  $p \cdot q$ , mit

$p \in P(\Sigma_\alpha), q \in Q(\Sigma_\alpha)$ . Dann ist

$$\pi \Sigma_\alpha \neq p \cdot q \Sigma_\alpha, \quad \forall p \in P(\Sigma_\alpha), q \in Q(\Sigma_\alpha).$$

Nach Lemma 1 gibt es dann zwei Ziffern,  $i$  und  $j$ ,

die in einer einzigen Zeile von  $\Sigma_\alpha$  und in einer einzigen Kolonne von  $\pi \Sigma_\alpha$  sitzen.

Sei  $t$  die Transposition von  $i$  und  $j$ . Dann ist

$$t' := \pi^{-1} t \pi \quad (8.40)$$

die Transposition von  $\pi^{-1}i$  und  $\pi^{-1}j$ , die in der gleichen Kolonne von  $\pi^{-1}(\pi \Sigma_\alpha) = \Sigma_\alpha$  sitzen.

Es folgt, dass

$$t \in P(\Sigma_\alpha), \quad t' \in Q(\Sigma_\alpha).$$

In (8.38) können wir daher  $p = t$  und  $q = t'$  setzen.

Für das oben gewählte Element  $\pi \in S_N$  folgt

dann mit (8.40):

$$\left. \begin{aligned} p \pi q &= t \pi t' = t \pi \pi^{-1} t \pi = t^2 \pi = \pi, \\ \text{und} \quad \text{sign}(q) &= \text{sign}(t') = -1. \end{aligned} \right\} \quad (8.41)$$

Vergleich der Beiträge  $\propto \pi$  auf der linken und der rechten Seite von (8.38) ergibt mit (8.41),

$$\text{dass} \quad \lambda_\pi = -\lambda_\pi, \text{ also } \lambda_\pi = 0. \quad (8.42)$$

Also sind die Koeffizienten aller Permutationen

$\pi \notin P(\Sigma_\alpha) Q(\Sigma_\alpha)$  gleich 0! Mit (8.39) folgt nun, dass

$$\alpha = \sum_{\substack{p \in P(\Sigma_\alpha) \\ q \in Q(\Sigma_\alpha)}} \lambda_1 \operatorname{sign}(q) p \cdot q = \lambda_1 S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha).$$

Q.E.D.

#### Korollar 4.

Sei  $r \in \mathbb{R}$  beliebig. Dann gilt

$$S(\Sigma_\alpha) r A(\Sigma_\alpha) = \lambda_r S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha),$$

für ein  $\lambda_r \in \mathbb{R}$ .

Beweis. Seien  $p \in P(\Sigma_\alpha)$ ,  $q \in Q(\Sigma_\alpha)$ . Dann

gilt nach (8.24), dass

$$p S(\Sigma_\alpha) r A(\Sigma_\alpha) q \operatorname{sign}(q) = S(\Sigma_\alpha) r A(\Sigma_\alpha),$$

$\forall p \in P(\Sigma_\alpha)$ ,  $q \in Q(\Sigma_\alpha)$ . Nach Lemma 3 gilt

dann, dass

$$S(\Sigma_\alpha) r A(\Sigma_\alpha) = \lambda_r S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha),$$

für ein  $\lambda_r \in \mathbb{R}$ .

Q.E.D.

$$\Rightarrow S(\Sigma_\alpha) \mathcal{R} A(\Sigma_\alpha) = \mathcal{R} \cdot S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha). \quad (8.43)$$

Daher, da  $A(\Sigma_\alpha)$  und  $S(\Sigma_\alpha)$  in  $\mathcal{R}$ ,

$$\begin{aligned} & (S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \mathcal{R} (S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha))) \\ &= S(\Sigma_\alpha) (A(\Sigma_\alpha) \mathcal{R} S(\Sigma_\alpha)) A(\Sigma_\alpha) \\ &= S(\Sigma_\alpha) \mathcal{R} A(\Sigma_\alpha) = \mathcal{R} S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha). \quad (8.4) \end{aligned}$$

Nun behaupten wir, dass  $\mathcal{R} S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha)$  ein

minimales Linksideal ist, und daher der

lineare Raum  $\mathcal{R} S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha)$  eine irreduzible

Darstellung,  $\rho_{\Sigma_\alpha}^0$ , von  $S_N$  trägt.

Um dies zu sehen, nehmen wir an, es sei  $\mathcal{J}$  ein Teilideal von  $\mathcal{R} S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha)$ . Dann folgt aus

(8.44), dass

$$\underbrace{\underbrace{S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \mathcal{J}}_{\in \mathcal{R}}}_{\subset \mathcal{J}} \subseteq \mathcal{R} S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha).$$

Daraus folgt, dass entweder

$$S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \mathcal{J} = \mathcal{R} \cdot S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha),$$

oder

$$S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \mathcal{J} = 0.$$

Im ersten Fall folgt dann, dass

$$R S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) = R S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \mathcal{I} \subseteq \mathcal{I},$$

und daher, da  $\mathcal{I}$  ein Teilideal von  $R S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha)$ ,

ist, dass

$$R S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) = \mathcal{I}.$$

Im zweiten Fall folgt, dass

$$\mathcal{I}^2 \subseteq R S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \mathcal{I} = 0, \text{ also } \mathcal{I} = 0,$$

da es ausser  $\{0\}$  keine nilpotenten Linksideale gibt. Damit ist bewiesen, dass  $R S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha)$  minimal ist.

Wir behaupten nun, dass die minimalen Links-  
ideale  $R S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha)$  und  $R S(\Sigma_\beta) A(\Sigma_\beta)$ , mit  
 $\alpha > \beta$ , inequivalente Darstellungen von  $S_N$ ,  
 $\rho_{\Sigma_\alpha}^0$ , resp.  $\rho_{\Sigma_\beta}^0$ , tragen. Denn es folgt aus  
(8.30), dass für  $\alpha > \beta$

$$S(\Sigma_\alpha) R S(\Sigma_\beta) A(\Sigma_\beta) \subseteq S(\Sigma_\alpha) R A(\Sigma_\beta) = 0,$$

und daher für jedes  $v \in R S(\Sigma_\beta) A(\Sigma_\beta)$ , dass



$$S(\Sigma_\alpha) v = 0. \quad (8.45)$$

Falls die Darstellungen auf  $\mathcal{R} S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha)$  und  $\mathcal{R} S(\Sigma_\beta) A(\Sigma_\beta)$  äquivalent wären, schlossen wir aus (8.45), dass

$$S(\Sigma_\alpha) w = 0, \quad \forall w \in \mathcal{R} S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha). \quad (8.46)$$

Setzen wir aber  $w = S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha)$ , so finden wir auf grund von  $S(\Sigma_\alpha)^2 = f_\alpha S(\Sigma_\alpha)$  (siehe S. 196, nach (8.24)), mit  $f_\alpha \neq 0$ , dass

$$S(\Sigma_\alpha) w = f_\alpha S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) = f_\alpha w \neq 0,$$

was (8.46) widerspricht!

Weiter behaupten wir, dass die Darstellungen  $\rho_{\Sigma_\alpha}^\circ$  und  $\rho_{\pi \Sigma_\alpha}^\circ$  für alle  $\pi \in S_N$  äquivalent sind. Auf grund der Definition von  $I_\pi$  gilt, dass

$$\begin{aligned} I_\pi \cdot S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) &= \pi \cdot \pi^{-1} \pi S(\Sigma_\alpha) \pi^{-1} A(\pi \Sigma_\alpha) \\ &= \pi \cdot \pi^{-1} S(\pi \Sigma_\alpha) A(\pi \Sigma_\alpha), \quad (8.47) \end{aligned}$$

d. h.  $I_\pi$  bildet den Darstellungsraum von  $\rho_{\Sigma_\alpha}^\circ$  1-1 auf den Darstellungsraum von  $\rho_{\pi \Sigma_\alpha}^\circ$  ab.

Weiter folgt aus (8.33) und (8.47), dass

$$\begin{aligned}
 \rho_{\pi \Sigma_\alpha}^\circ(\pi) \rho_{\pi \Sigma_\alpha}^\circ(\pi') \rho_{\pi \Sigma_\alpha}^\circ(\pi^{-1}) I_\pi r S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \\
 = \pi \pi' \pi^{-1} \pi r S(\Sigma_\alpha) \pi^{-1} A(\pi \Sigma_\alpha) \\
 = I_\pi \pi' r S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \\
 = I_\pi \rho_{\Sigma_\alpha}^\circ(\pi') r S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha). \quad (8.48)
 \end{aligned}$$

Offensichtlich folgt unsere Behauptung aus (8.47) und (8.48); (siehe auch (8.34)).

Damit haben wir gezeigt, dass jedes Links ideal  $r S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha)$  eine irreduzible Darstellung,  $\rho_{\Sigma_\alpha}^\circ$ , von  $S_N$  trägt, und

$$\rho_{\Sigma_\alpha}^\circ \sim \rho_{\pi \Sigma_\alpha}^\circ, \forall \pi \in S_N, \text{ aber } \rho_{\Sigma_\alpha}^\circ \not\sim \rho_{\Sigma_\beta}^\circ, \text{ für } \alpha \neq \beta.$$

Die Äquivalenzklasse der Darst.  $\rho_{\Sigma_\alpha}^\circ$  werde mit  $\rho_\alpha$  bezeichnet. Dann haben wir gezeigt, dass

$$\# \{ \rho_\alpha \} = \# \text{ der Lösungen der Bedingungen } \alpha_1 \geq \alpha_2 \geq \dots \geq \alpha_h, \text{ mit } \sum_{v=1}^h \alpha_v = N. \quad (8.49)$$

(Siehe (8.21)!) Nun ist es aber wohl bekannt,

dass jede Lösung  $\alpha$  von (8.49) genau einer Konjugationsklasse von Permutationen entspricht nämlich derjenigen Klasse von Permutationen mit Zyklen der Längen  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_h$ .

Es ist aber für jede endliche Gruppe die Zahl der inäquivalenten, irreduziblen Darstellungen gleich der Zahl der Konjugationsklassen von Gruppenelementen. Demnach auf Grund des Peter-Weyl Theorems sind ja die inäquivalenten, irreduziblen Charaktere vollständig im Raum der Klassenfunktionen, dessen Dimension gleich der Anzahl der Konjugationsklassen ist. Damit folgt dass wir alle irreduziblen Darstellungen von  $S_N$  gefunden haben!

Nun konstruieren wir schliesslich die Idempotenten, oder Projektoren,  $P_\alpha$ , in  $R$ , die

auf die in der regulären Darstellung von  $S_N$

auf  $R$  enthaltenen Teildarstellungen  $n_\alpha \rho_\alpha :=$

$\underbrace{\rho_\alpha \oplus \dots \oplus \rho_\alpha}_{n_\alpha}$  projizieren, wo  $n_\alpha = \dim \rho_\alpha$  die

Multiplizität von  $\rho_\alpha$  in der regulären Darstellung bezeichnet.

Lemma 5.

Die gesuchten zentralen Projektoren,  $P_\alpha \in R \cap R'$ , sind durch

$$\begin{aligned} P_\alpha &= \gamma_\alpha \sum_{\pi \in S_N} \pi^{-1} S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \pi \\ &= \gamma_\alpha \sum_{\pi \in S_N} S(\pi^{-1} \Sigma_\alpha) A(\pi^{-1} \Sigma_\alpha) \end{aligned}$$

gegeben, wo  $\gamma_\alpha$  eine reelle (tatsächlich eine rationale) Zahl ist.

Beweis.

(1) Offensichtlich ist  $P_\alpha \in R$ . Weiter vertauscht

$P_\alpha$  mit  $R$ , (d.h.  $P_\alpha \in R'$ ). Denn

$$\pi' P_\alpha = \gamma_\alpha \sum_{\pi \in S_N} \underbrace{(\pi' \pi^{-1})}_{\pi''} S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \underbrace{(\pi' \pi^{-1})^{-1}}_{(\pi'')^{-1}} \pi'$$

$$= P_\alpha \pi' \Rightarrow r P_\alpha = P_\alpha r, \quad \forall r \in R.$$

Jeder Operator  $A \in R$ , der mit allen Operatoren von  $R$  vertauscht, wird ein zentraler Operator genannt. (Deswegen nennt man die Projektoren  $P_\alpha$  zentrale Projektoren.) Die zentralen Operatoren bilden eine abelsche Unter algebra von  $R$ , das sogenannte Zentrum,  $Z(R)$ , von  $R$ . Diese Begriffe können allgemein in der Untersuchung von Algebren benützt werden.

(2) Nun behaupten wir, dass  $P_\alpha P_\beta = 0$ ,

für  $\alpha \neq \beta$ . Denn

$$P_\alpha P_\beta = \delta_\alpha \delta_\beta \left\{ \sum_{\pi \in S_N} \sum_{\pi' \in S_N} \underbrace{S(\pi^{-1} \Sigma_\alpha) A (\pi^{-1} \Sigma_\alpha) S((\pi')^{-1} \Sigma_\beta)}_{=0, \text{ nach Kor. 2}} \times A ((\pi')^{-1} \Sigma_\beta) \right\}$$

$$= 0, \quad \text{für } \alpha \neq \beta.$$

(3) Nun zeigen wir, dass für geeignet gewählte Konstanten  $\gamma_\alpha$

$$P_\alpha^2 = P_\alpha.$$

Zum Beweis rechnen wir:

$$P_\alpha^2 = \sum_{\pi, \pi' \in S_N} S(\pi^{-1} \Sigma_\alpha) A(\pi^{-1} \Sigma_\alpha) S((\pi')^{-1} \Sigma_\alpha) A((\pi')^{-1} \Sigma_\alpha) \quad (8.50)$$

Aus dem Beweis von Korollar 2 und Lemma 1 lernen wir, dass

$$A(\pi^{-1} \Sigma_\alpha) S((\pi')^{-1} \Sigma_\alpha) = 0, \quad (8.51)$$

außer wenn

$$\pi^{-1} \Sigma_\alpha = p' q' (\pi')^{-1} \Sigma_\alpha, \quad (8.52)$$

für  $p' \in P((\pi')^{-1} \Sigma_\alpha)$ ,  $q' \in Q((\pi')^{-1} \Sigma_\alpha)$

Gl. (8.52) impliziert, dass

$$\pi^{-1} \Sigma_\alpha = (\pi')^{-1} p q \Sigma_\alpha, \quad (8.53)$$

für  $p \in P(\Sigma_\alpha)$ ,  $q \in Q(\Sigma_\alpha)$

Setzt man (8.51) und (8.53) in (8.50) ein, so findet man, dass

$$\begin{aligned}
P_\alpha^2 &= \gamma_\alpha^2 \sum_{\substack{\pi' \in S_N \\ p \in P(\Sigma_\alpha) \\ q \in Q(\Sigma_\alpha)}} S((\pi')^{-1} p q \Sigma_\alpha) A((\pi')^{-1} p q \Sigma_\alpha) \\
&\quad \times S((\pi')^{-1} \Sigma_\alpha) A((\pi')^{-1} \Sigma_\alpha) \\
&= \gamma_\alpha^2 \sum_{\substack{\pi' \in S_N \\ p, q}} (\pi')^{-1} p q S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) q^{-1} p^{-1} \pi' \\
&\quad \times (\pi')^{-1} S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \pi' \quad (8.54)
\end{aligned}$$

Nun haben wir von (8.24), dass

$$A(\Sigma_\alpha) q^{-1} = A(\Sigma_\alpha) \text{sign}(q^{-1}) = A(\Sigma_\alpha) \text{sign}(q)$$

und

$$p^{-1} S(\Sigma_\alpha) = S(\Sigma_\alpha).$$

Also folgt mit (8.54), dass

$$\begin{aligned}
P_\alpha^2 &= \gamma_\alpha^2 \sum_{\pi' \in S_N} (\pi')^{-1} \left\{ \left( \sum_{\substack{p \in P(\Sigma_\alpha) \\ q \in Q(\Sigma_\alpha)}} p q \text{sign}(q) \right) \right. \\
&\quad \times S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \left. \right\} \pi' \\
&\stackrel{(8.23)}{=} \gamma_\alpha^2 \sum_{\pi' \in S_N} (\pi')^{-1} \left\{ S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \right\}^3 \pi'. \quad (8.55)
\end{aligned}$$

Nach Korollar 4 wissen wir aber, dass

$$S(\Sigma_\alpha) \underbrace{(A(\Sigma_\alpha) S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) S(\Sigma_\alpha))}_{\in \mathcal{R}} A(\Sigma_\alpha)$$

$$= \lambda_\alpha S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha), \lambda_\alpha \in \mathbb{R}. \quad (8.56)$$

Setzen wir (8.56) in (8.55) ein, so finden wir,

dass

$$P_\alpha^2 = \gamma_\alpha \lambda_\alpha P_\alpha \quad (8.57)$$

Wählen wir  $\gamma_\alpha = \lambda_\alpha^{-1}$ , so folgt, dass

$$P_\alpha^2 = P_\alpha.$$

Um den Beweis von Lemma 5 zu beschliessen,

muss noch gezeigt werden, dass  $P_\alpha \neq 0$ ,  $\lambda_\alpha \neq 0$ .

(4)  $P_\alpha \neq 0$ ,  $\lambda_\alpha \neq 0$ .

$$P_\alpha = \gamma_\alpha \sum_{\pi \in S_N} \pi^{-1} S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \pi$$

In jedem Term  $\pi^{-1} S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \pi$  hat der

Koeffizient des Einselements,  $1 \in S_N$ , den Wert 1

Denn



$$\pi^{-1} S(\Sigma_\alpha) A(\Sigma_\alpha) \pi$$

$$= \sum_{\substack{p \in P(\Sigma_\alpha) \\ q \in Q(\Sigma_\alpha)}} \pi^{-1} p q \pi \operatorname{sign}(q)$$

Wenn nun  $\pi^{-1} p q \pi = 1$ , dann ist  $p q = 1$ ,

d.h.  $p = q^{-1}$ . Da  $P(\Sigma_\alpha) \cap Q(\Sigma_\alpha) = \{1\}$ , folgt

dann, dass  $p = q = 1$ . D.h.

$$P_\alpha = \gamma_\alpha N! \cdot 1 + \gamma_\alpha \sum_{\substack{\pi \in S_N \\ \pi \neq 1}} \lambda_\pi^\alpha \pi,$$

für reelle Zahlen  $\lambda_\pi^\alpha$ . Daraus folgt, dass

für  $\gamma_\alpha \neq 0$   $P_\alpha$  nicht  $= 0$  sein kann.

Nun gehört aber  $P_\alpha$  zum Zentrum,  $\mathcal{Z}(R)$ ,

von  $R$ , und  $\mathcal{Z}(R)$  ist eine abelsche  $^*$ Algebra.

Eine abelsche  $^*$ Algebra enthält aber keine

nilpotenten Elemente. Daher folgt, dass wenn

$\gamma_\alpha \neq 0$ , dann  $P_\alpha^2 \neq 0$ . Mit (8.57) schliessen

wir, dass für  $\gamma_\alpha \neq 0$

$$P_\alpha^2 = \gamma_\alpha \lambda_\alpha P_\alpha \neq 0$$

und, da  $\gamma_\alpha \neq 0$  und  $P_\alpha \neq 0$ , finden wir nun, dass für  $\gamma_\alpha \neq 0$  auch  $\lambda_\alpha \neq 0$ . Daher können wir  $\gamma_\alpha = \lambda_\alpha^{-1}$  setzen, und der Beweis von Lemma 5 ist vollständig.

Bemerkung. Eine  $*$ Algebra  $\mathcal{A}$  ist eine Algebra mit Involution  $*$  :  $A \rightarrow A^*$  ( $A \in \mathcal{A} \Rightarrow A^* \in \mathcal{A}$ ,  $\mathcal{A}$  ist eine  $*$ Algebra: Für  $r = \sum \lambda_\pi \pi \in \mathcal{R}$  setzen wir

$$r^* := \sum \bar{\lambda}_\pi \pi^{-1}; \quad r^* \in \mathcal{R}.$$

$\mathcal{Z}(\mathcal{R})$  ist dann auch eine  $*$ Algebra. Denn

wenn  $A \in \mathcal{R}$

$$[A, B] = 0, \quad \forall B \in \mathcal{R},$$

erfüllt, dann gilt

$$B^* A^* - A^* B^* = 0, \quad \forall B \in \mathcal{R}.$$

Da  $*$  eine Involution auf  $\mathcal{R}$  ist, folgt

$$A^* C - C A^* = 0, \quad \forall C \in \mathcal{R};$$

daher  $A^* \in \mathcal{Z}(\mathcal{R})$ .

Alle endlich-dimensionalen, abelschen  $*$ Algebren sind isomorph zu Algebren von Funktionen auf einer endlichen Menge von Punkten. Daher enthalten sie keine nilpotenten Elemente. Projektoren in einer abelschen  $*$ Algebra sind selbstadjungierte (d.h.  $*$ -invariante) Elemente. Also haben wir, dass

$$P_\alpha^* = P_\alpha.$$

Dies kann auch leicht direkt eingesehen werden:

$$P_\alpha = \gamma_\alpha \sum_{\substack{\pi \\ p \in P(\Sigma_\alpha) \\ q \in Q(\Sigma_\alpha)}} \pi^{-1} p q \operatorname{sign}(q) \pi$$

$$\Rightarrow P_\alpha^* = \overline{\gamma_\alpha} \sum_{\pi, p, q} \pi^{-1} q^{-1} p^{-1} \pi \operatorname{sign}(q)$$

Für feste  $p$  und  $q$  setzen wir  $\pi = q^{-1} \pi'$ .

Dann folgt, dass

$$\begin{aligned}
P_\alpha^* &= \overline{\gamma_\alpha} \sum_{p,q} \sum_{\pi'} (\pi')^{-1} p^{-1} q^{-1} \pi' \operatorname{sign}(q) \\
&= \gamma_\alpha \sum_{p,q} \sum_{\pi'} (\pi')^{-1} p^{-1} q^{-1} \operatorname{sign}(q^{-1}) \pi \\
&= P_\alpha, \quad \text{da } \gamma_\alpha \text{ reell und } \operatorname{sign}(q) = \operatorname{sign}(q^{-1})
\end{aligned}$$


---

Sei nun  $\Delta$  eine Darstellung von  $S_N$  auf einem

Vektorraum  $V_\Delta$ . Diese können wir mit Hilfe

der Projektoren  $P_\alpha$  nun leicht ausreduzieren.

Da  $\dim \mathcal{Z}(\mathcal{R}) = \#$  inäquivalente, irreduzible  
Darstellungen von  $S_N$

$$= \# \alpha, \text{ mit } \alpha_1 \geq \alpha_2 \geq \dots \geq \alpha_h$$

$$\text{und } \sum_{\nu=1}^h \alpha_\nu = N$$

$$= \# \{P_\alpha\},$$

ist

$$\sum_{\alpha} P_\alpha = 1. \quad (8.58)$$

$$\Rightarrow \sum_{\alpha} \Delta(P_\alpha) = 1|_{V_\Delta} \quad (8.59)$$

Weiter ist  $\Delta(P_\alpha)$  ein Projektor, da  $P_\alpha$  ein Projektor ist. Der Projektor  $\Delta(P_\alpha)$  projiziert auf einen Unterraum  $V_\alpha$  von  $V_\Delta$ , der eine Darstellung  $\sim \underbrace{p_\alpha \oplus \dots \oplus p_\alpha}_{n_\alpha(\Delta)}$  trägt.

Sei  $V_\Delta = \underbrace{W \otimes \dots \otimes W}_{N \text{ mal}}$ ,  $\dim W = n$ . (8.6)

Sei  $\Delta$  durch Permutation der Faktoren  $W$  definiert.

Lemma 6.

Unter der Voraussetzung (8.60) gilt, dass

$$\Delta(P_\alpha) = 0,$$

wenn  $\alpha$  ein Diagramm mit mehr als  $n$  Zeilen ( $h > n$ ) ist.

Beweis. Sei  $\vec{e}_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ , eine Basis in  $W$ .

Jeder Vektor  $v \in V_\Delta$  hat eine Darstellung

$$v = \sum_{j_1, \dots, j_N} v(j_1, \dots, j_N) \vec{e}_{j_1} \otimes \dots \otimes \vec{e}_{j_N},$$

$v(j_1, \dots, j_N) \in \mathbb{C}$  (oder  $\in \mathbb{R}$ ),  $j_\ell = 1, \dots, n$ , für

$\ell = 1, \dots, N$ . Nun ist

$$\Delta(P_\alpha) v = \gamma_\alpha \sum_{\pi \in S_N} \sum_{p \in P(\Sigma_\alpha)} \left( \sum_{q \in Q(\Sigma_\alpha)} \text{sign}(q) \right. \\ \left. \times v(j_{\pi p^{-1} q^{-1} \pi^{-1}(1)}, \dots, j_{\pi p^{-1} q^{-1} \pi^{-1}(N)}) \right)$$

Da jedes  $j_\ell$  nur  $n$  Werte annehmen kann, kann man höchstens in  $n$  Variablen antisymmetrisieren wie das durch die Summation über  $q$  geschieht.

Andernfalls ergibt die Antisymmetrisierung  $= 0$ .

Also muss  $h \leq n$  sein, oder es folgt  $\Delta(P_\alpha) = 0$ .

Q.E.D.

Die hier skizzierte Behandlung der Darstellungstheorie von  $S_N$ , insbesondere das Schlüsselergebnis

nis, Lemma 1, wurde von von Neumann gefunden;  
 (sic B.L. van der Waerden, "Group Theory and  
 Quantum Mechanics", Chapter V. Dieses Kap.  
V ist allerdings nicht gerade schön gelungen).

---

Nun kehren wir zur Quantenmechanik von  
 $N$ -Elektron Systemen zurück. In diesem  
 Falle interessieren wir uns für

$$V_{\Delta} = \underbrace{\mathbb{C}^2 \otimes \dots \otimes \mathbb{C}^2}_{N \text{ mal}} = \mathcal{H}_S$$

Es kommen also in der Ausreduktion von

$\Delta = V_S$  nur Darstellungen zu Diagrammen  $\alpha$

mit höchstens zwei Zeilen vor. Die assoziierte

Darstellungen auf dem Bahnraum  $\mathcal{H}_B$  gehören

daher zu Diagrammen mit höchstens 2 Kolonnen

Nun beweisen wir den Satz von Weyl.

Auf  $\mathcal{H}_S$  haben wir die Darstellung  $U_S \otimes V_S$  von  $SU(2) \times S_N$ . Wir definieren

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{A}_S &= U_S(\mathcal{G}), \\ \mathcal{B}_S &= V_S(\mathcal{R}), \end{aligned} \right\} \quad (8.61)$$

wo  $\mathcal{G}$  die Gruppenalgebra der  $SU(2)$  ist.

Die Algebra  $\mathcal{A}_S$  besteht aus (Grenzwerten von) Operatoren der Form

$$\sum_j \lambda_j \underbrace{A_j \otimes \dots \otimes A_j}_{N \text{ mal}}, \quad A_j \in SU(2), \lambda_j \in \mathbb{C}. \quad (8.62)$$

Den Satz von Weyl kann man wie folgt formulieren:

Satz 7.

$$\mathcal{A}_S' = \mathcal{B}_S. \quad (8.63)$$

Hier bedeutet  $\mathcal{A}_S'$  die Kommutante von  $\mathcal{A}_S$ .



Wenn  $\mathcal{O}$  eine auf einem Vektorraum  $\mathcal{H}$  dargestellte Algebra ist, so definiert man

$$\mathcal{O}' = \{A \in \text{End}(\mathcal{H}) : [A, B] = 0, \forall B \in \mathcal{O}\}$$

und nennt  $\mathcal{O}'$  die Kommutante von  $\mathcal{O}$ . Im endlich-dimensionalen Fall gilt offenbar, dass

$$(\mathcal{O}')' \equiv \mathcal{O}'' = \mathcal{O}. \quad (8.64)$$

Aus (8.63) schliessen wir nun, dass

$$\mathcal{Z}(\mathcal{O}_S) = \mathcal{O}_S \cap \mathcal{O}_S' \stackrel{(8.63)}{=} \mathcal{O}_S \cap \mathcal{B}_S$$

$$\stackrel{(8.64)}{=} \mathcal{B}_S' \cap \mathcal{B}_S = \mathcal{Z}(\mathcal{B}_S) \quad (8.65)$$

Reduzieren wir also  $V_S$  mit Hilfe der minimalen Projektoren in  $\mathcal{Z}(\mathcal{O}_S)$  in Darstellungen aus, die direkte

Summen einer irreduziblen Darstellung  $\pi_s$ ,

$(\binom{0}{\frac{1}{2}} \leq s \leq \frac{N}{2})$ , sind, so reduzieren wir auto-

matisch  $V_S$  in Darstellungen aus, die direkte

Summen einer Darstellung  $\Delta_s$  sind, d.h.

$$U_S \otimes V_S = \bigoplus_s \pi_s \otimes \Delta_s,$$

und die minimalen Projektoren in  $\mathcal{J}(\mathcal{B}_S) =$

$\mathcal{J}(\mathcal{B}_S)$  projizieren auf Unterräume, die zu

einer der Darstellungen  $\pi_s \otimes \Delta_s$  gehören.

All dies sind einfache Folgerungen aus (8.63).

Beweis von Satz 7.

Sei  $T$  eine lineare Abbildung von  $\mathcal{H}_S$  auf sich selbst.  $T$  hat eine Matrix-Darstellung, die man durch Wahl einer Basis in  $\mathcal{H}_S$  konstruiert: Wir benutzen die in (8.17) eingeführte Basis, d.h.  $\chi \in \mathcal{H}_S$  wird nach der Basis  $\{\vec{e}_{s_1} \otimes \dots \otimes \vec{e}_{s_N}\}_{s_j = \pm 1}$  entwickelt,

$$\chi = \sum_{\substack{s_j = \pm 1 \\ j=1, \dots, N}} \chi(s_1, \dots, s_N) \vec{e}_{s_1} \otimes \dots \otimes \vec{e}_{s_N}. \quad (8.66)$$

In dieser Basis hat  $T$  die Matrix-Darstellung

$$T\chi = \sum_s \left( \sum_{s'} T_{s_1 \dots s_N}^{s'_1 \dots s'_N} \chi(s'_1, \dots, s'_N) \right) \vec{e}_{s_1} \otimes \dots \otimes \vec{e}_{s_N}, \quad (8.67)$$

wo  $s = (s_1, \dots, s_N)$ ,  $s' = (s'_1, \dots, s'_N)$ .

Wir nehmen nun an  $T$  vertausche mit allen Permutationen  $V_s(\pi)$ ,  $\pi \in S_N$ ; siehe (8.18).

Es sei

$$\chi_T(s_1, \dots, s_N) = \sum_{s'} T_{s_1 \dots s_N}^{s'_1 \dots s'_N} \chi(s'_1, \dots, s'_N). \quad (8.68)$$

Es soll nun gelten, dass

$$\chi_T(s_{1'}, \dots, s_{N'}) = \sum_{s'} T_{s_1 \dots s_N}^{s'_1 \dots s'_N} \chi(s'_{1'}, \dots, s'_{N'}), \quad (8.69)$$

wo  $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & N \\ 1' & 2' & \dots & N' \end{pmatrix}$  eine beliebige Permutation in  $S$ ,

ist. Indem man auf der R. S. von (8.68) die Summa-

tionsindices umbenennt, findet man

$$\sum_{s'} T_{s_{1'} \dots s_{N'}}^{s'_{1'} \dots s'_{N'}} \chi(s'_{1'}, \dots, s'_{N'}) = \sum_{s'} T_{s_1 \dots s_N}^{s'_1 \dots s'_N} \chi(s'_{1'}, \dots, s'_{N'}), \quad (8.70)$$

$\forall \chi$ . Daraus folgt, dass

$$T_{s'_1 \dots s'_{N'}}^{s'_1 \dots s'_{N'}} = T_{s_1 \dots s_N}^{s'_1 \dots s'_{N'}} \quad , \quad \text{oder}$$

$$T_{\sigma'_1 \dots \sigma'_{N'}} = T_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \quad , \quad (8.71)$$

$$\text{für } \sigma_j := \begin{pmatrix} s'_j \\ s_j \end{pmatrix}.$$

Nun studieren wir die Aktion der Darstellung

(  $U_S$  von  $SU(2)$  auf  $\chi$  :

$$U_S(A) \chi = \sum_s \left( \sum_{s'} A_{s_1}^{s'_1} \dots A_{s_N}^{s'_N} \chi(s'_1, \dots, s'_N) \right) \times \vec{e}_{s_1} \otimes \dots \otimes \vec{e}_{s_N} \quad , \quad (8.72)$$

wo  $A \in SU(2)$ . Wir benutzen die Schreibweise

$$A_{\sigma} = A_s^{s'} \quad , \quad \sigma := \begin{pmatrix} s' \\ s \end{pmatrix}.$$

( Wir behaupten nun, dass jede Abbildung

$T \in \text{End}(\mathcal{H}_S)$  die mit allen  $V_S(\pi)$ ,  $\pi \in S_N$ ,

vertauscht, d.h.  $T \in \mathcal{B}'_S$ , und deren Matrix-

Darstellung daher (8.71) erfüllt, sich als endli-

che Summe von Produkten  $A \otimes \dots \otimes A$ ,  $A \in SU(2)$ ,

schreiben lässt. Daraus folgt, dass  $T \in \mathcal{A}_S$ , und dies beweist Satz 7. In Matrix-Schreibweise,

$$T_{\epsilon_1 \dots \epsilon_N} = \sum_i \lambda_i A_{\epsilon_1}^i \dots A_{\epsilon_N}^i, \quad A^i \in SU(2), \quad (8.72)$$

$\lambda_i \in \mathbb{C}, \forall i$ , falls  $T_{\epsilon_1 \dots \epsilon_N}$  (8.71) erfüllt.

Zum Beweis von (8.72) fasse man  $A \in SU(2)$  als Vektor auf der 3-Sphäre auf:

$$A = a_0 \mathbb{1} + i \vec{a} \cdot \vec{\sigma}, \quad a_0^2 + \vec{a}^2 = 1. \quad (8.73)$$

(Die Parameter  $a_0, \vec{a}$  sind die Euler-Klein-Cayley'schen Parameter).

Wir definieren nun

$$T(l, m, n) := T_{\epsilon_1 \dots \epsilon_N}, \quad \text{falls}$$

$$\epsilon_i = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{für } l \text{ Werte von } i,$$

$$\epsilon_i = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{" } m \quad \text{" } \quad \text{" } i,$$

$$\epsilon_i = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{" } n \quad \text{" } \quad \text{" } i, \quad \text{und}$$

$$\epsilon_i = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{" } N-l-m-n \text{ Werte von } i,$$

mit  $l+m+n \leq N$ . Da  $T$  nach (8.71) total symmetrisch ist, hängt  $T(l,m,n)$  tatsächlich nur von  $l, m$  und  $n$  ab. Die Zahlen  $T(l,m,n)$  durchlaufen alle komplexen Zahlen, falls  $T$  den Raum der total symmetrischen Tensoren durchläuft. Falls

$$T_{\epsilon_1 \dots \epsilon_N} = A_{\epsilon_1} \dots A_{\epsilon_N}, \quad A \in SU(2),$$

dann ist nach (8.73)

$$\begin{aligned} T(l,m,n) &= (a_0 + ia_3)^l (ia_1 - a_2)^m (ia_1 + a_2)^n (a_0 - ia_3)^{N-l-m-n} \\ &= z^l \bar{z}^{N-l-m-n} w^m (-\bar{w})^n, \end{aligned} \quad (8.74)$$

wo  $z = a_0 + ia_3$ ,  $w = -a_2 + ia_1$ ; ( $z, w$  beliebige

komplexe Zahlen, falls  $A$  durch  $\lambda A$  ersetzt wird,  $\lambda \in \mathbb{C}$ ).

Sei nun  $T$  ein total symmetrischer Tensor, der zu allen Tensoren der Form (8.74) "orthogonal" ist, d.h.

$$\sum_{\substack{l, m, n \\ l+m+n \leq N}} \overline{T(l, m, n)} z^l \bar{z}^{N-l-m-n} w^m (-\bar{w})^n = 0, \quad \text{(8.7)} \quad \text{231.}$$

$\forall z, w \in \mathbb{C}$ . Dann folgt sofort, dass

$$T(l, m, n) = 0, \quad \forall l, m, n.$$

Also  $T = 0$ . Das beweist, dass die Tensoren der Form (8.74) den Vektorraum der total symmetrischen Tensoren erzeugen, d.h. es folgt (8.72). Damit ist Satz 7 (der Weyl'sche Satz, bewiesen).

### Bemerkungen.

- 1) Der gleiche Satz gilt auch für die 2-dimensionalen Darstellungen von  $U(2)$ ,  $SL(2)$ ,  $GL(2)$ , was trivial ist.
- 2) Ein analoger Satz gilt auch für die  $n$ -dimensionalen Darstellungen von  $SU(n)$ ,  $U(n)$ ,  $SL(n)$ ,  $GL(n)$ , jedoch nicht für  $SO(n)$

Der Beweis ist eine einfache Verallgemeinerung des angeführten Beweises; ("unitärer Trick" von H. Weyl, Math. Zeitschr. 23, 271 (1925)).

3) Der Satz ist falsch für die höher-dimensionalen Darstellungen von  $SU(n)$ , ...

All dies beruht auf der Diskussion einfacher Verallgemeinerungen von (8.75).

Schlussbemerkung zur QM der  $N$ -Elektronensysteme: Der Satz von Weyl und das Pauli-Prinzip implizieren, dass der totale Spin,  $s$ , die Rasse,  $\tilde{\Delta}(s)$ , der Bahnwellenfunktion eines  $N$ -Elektronensystems festlegt. Die Rasse  $\tilde{\Delta}(s)$  aber bestimmt wesentlich den Wert der "Austauschintegrale", also die Energie des Zustandes. So beeinflusst also der Spin  $s$  indirekt die Energie



eines Zustandes.

Anwendung dieser Einsicht in der Physik der kondensierten Materie: Magnetische Eigenschaften, die vom Spin abhängen, wie Ferro-  
magnetismus, sind Folgen der Austauschwechselwirkungen und daher durch die Rasse der Zustände tiefer Energie bestimmt.

