

# Quantenmechanik

Vorlesungsmanuskript von R.F. Werner

Version Mai 2019

Die erste Version dieses Skripts geht auf eine Vorlesung an der Universität Osnabrück im WS 95/96 zurück. Es wurde jeweils ergänzt und korrigiert für meine QM-Vorlesungen in Braunschweig (WS 97/98) und Hannover QMII (SS 12), QM I (SS 13), QM II(SS 14) und QM I(SS17). Ich möchte das Skript in absehbarer Zeit insgesamt konsolidieren und als Buch herausbringen. Daher bin ich an jeder Art Rückmeldung sehr interessiert.

Ich habe einige Abschnitte mit einem Stern als “für den zweiten Durchgang gedacht” \*  
markiert. Auch innerhalb der Abschnitte habe ich Passagen mit Randmarkierungen  
wie an diesem Absatz in diesem Sinne gekennzeichnet. Im Inhaltsverzeichnis sieht man  
außer den erwähnten Sternen auch dieses <sup>o</sup>Zeichen, es deutet einen geplanten aber  
noch (fast) leeren Abschnitt an. Einsprengsel der Art [►xxx] zeigen mir, dass noch  
etwas fehlt. \*

Es gibt folgende internen Verweise

(k.n) Formelnummer mit k=Kapitel, n=darin durchlaufend

►x] siehe Abschnitt x

[Ü k.n] siehe Übungsaufgabe n am Ende des laufenden Kapitels k

[Ü!] Rechnen Sie dies zur Übung selbst nach. Oft in Verbindung mit “wie man leicht sieht”.

►H] Am Ende einer Übungsaufgabe: Hierzu gibt es einen kurzen Lösungshinweis (am Ende gesammelt)

[xxx] Literaturzitat. (Viele fehlen noch.)

**n** fettgedruckte Seitenzahl im Index: Hier finden Sie am ehesten eine Definition



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Hinführung zur Quantenmechanik</b>	<b>9</b>
1.1	Geschichte . . . . .	9
1.2	Wellen, Teilchen, Wahrscheinlichkeit . . . . .	11
1.3	Polarisationsexperimente . . . . .	13
1.4	Dichtematrizen . . . . .	15
1.5	Schrödingergleichung . . . . .	18
1.6	Vertauschungsrelationen . . . . .	20
1.7	Postulate und Interpretation . . . . .	22
1.8	*Keine Postulate . . . . .	26
1.8.1	Projektionswertigkeit . . . . .	27
1.8.2	Projektionspostulat . . . . .	29
1.8.3	Sonderrolle für reine Zustände . . . . .	30
	Anmerkungen . . . . .	31
	Aufgaben . . . . .	31
<b>2</b>	<b>Technisches Vorspiel</b>	<b>33</b>
2.1	Wahrscheinlichkeit . . . . .	33
2.1.1	Was ist Wahrscheinlichkeit? . . . . .	33
2.1.2	Stichprobenräume, Maße, Momente . . . . .	36
2.1.3	* <sup>o</sup> Maßtheorie . . . . .	40
2.1.4	Unabhängigkeit und Fehlerbalken . . . . .	41
2.2	Hilbertraum . . . . .	44
2.2.1	Geometrie . . . . .	44
2.2.2	Abstrakte und konkrete Hilberträume . . . . .	46
2.2.3	Operatoren . . . . .	49
2.2.4	Diagonalisierung und Funktionalkalkül . . . . .	53
2.2.5	Positivität . . . . .	57
2.2.6	Unbeschränkte Operatoren . . . . .	59
2.3	Konvexität . . . . .	62
2.4	Fourier-Transformation . . . . .	64
2.4.1	Diagonalisierung des Impulses . . . . .	64
2.4.2	Unitarität . . . . .	65
2.4.3	Gaußsche Integrale . . . . .	66
2.4.4	Vokabel-Liste . . . . .	67
2.4.5	*Charakteristische Funktionen . . . . .	68

Anmerkungen . . . . .	69
Aufgaben . . . . .	69
<b>3 Komplementarität und Unschärfe</b>	<b>71</b>
3.1 Rückschau: die klassische Welt . . . . .	71
3.2 *Bohr und Heisenberg . . . . .	73
3.3 Präparierunschärfe . . . . .	75
3.4 Messunschärfe . . . . .	78
3.5 *Kovariante gemeinsame Messungen . . . . .	83
Anmerkungen . . . . .	85
Aufgaben . . . . .	85
<b>4 Potentialprobleme in einer Dimension</b>	<b>87</b>
4.1 Freie Teilchen . . . . .	87
4.1.1 Dispersionsrelationen . . . . .	87
4.1.2 Zerfließen des Wellenpakets . . . . .	88
4.2 Teilchen im Kasten . . . . .	90
4.3 Harmonischer Oszillator . . . . .	93
4.3.1 Leiteroperatoren . . . . .	94
4.3.2 Hermite-Polynome . . . . .	96
4.3.3 Heisenberg-Bewegungsgleichungen . . . . .	96
4.4 Potentialtopf . . . . .	97
4.5 Rayleigh-Ritzsches Variationsprinzip . . . . .	100
4.6 Eigenwerte allgemeiner Töpfe . . . . .	102
4.7 Streutheorie . . . . .	105
4.7.1 Streumatrix . . . . .	105
4.7.2 Streuung an Topf oder Stufe . . . . .	108
4.7.3 °Tunneln und Hartmann-Effekt . . . . .	109
4.8 Punktwechselwirkungen . . . . .	109
4.8.1 Das $\delta$ -Potential . . . . .	109
4.8.2 *°Erweiterung symmetrischer Operatoren . . . . .	110
Anmerkungen . . . . .	114
Aufgaben . . . . .	115
<b>5 Drehungen und andere Symmetrien</b>	<b>117</b>
5.1 Symmetrie-Transformationen des Zustandsraums . . . . .	117
5.2 Erzeuger und Vertauschungsrelationen . . . . .	119
5.3 Bahndrehimpuls . . . . .	122
5.4 Spin . . . . .	126
5.5 Zentralpotentiale . . . . .	128
5.5.1 Coulomb-Potential . . . . .	131
5.5.2 Realer Wasserstoff . . . . .	134
5.6 °Streuung im Zentralpotential . . . . .	135
5.7 Periodische Potentiale . . . . .	135
5.7.1 Periodische Funktionen . . . . .	136

5.7.2	Blochtransformation . . . . .	138
5.7.3	$\circ$ Zustandsdichte . . . . .	139
5.8	Eichsymmetrie: Bewegung im Magnetfeld . . . . .	139
5.8.1	$\circ$ *Bündelableitungen . . . . .	140
5.8.2	Konstantes Magnetfeld . . . . .	140
5.8.3	[old text] . . . . .	141
5.9	Phasenraum-Symmetrie . . . . .	143
5.9.1	*Faltungen und Fourier-Transformierte von Operatoren . . . . .	147
5.9.2	$\circ$ Halbklassische Spektralregel . . . . .	149
5.10	Spiegelungen . . . . .	150
	Anmerkungen . . . . .	152
	Aufgaben . . . . .	153
<b>6</b>	<b>Zusammengesetzte Systeme</b>	<b>155</b>
6.1	Tensorprodukt . . . . .	155
6.2	Interpretation durch statistische Experimente . . . . .	159
6.3	$\circ$ Verschränkte Zustände . . . . .	162
6.4	* $\circ$ Komplemente und Kommutanten . . . . .	164
6.5	$\circ$ Addition von Drehimpulsen . . . . .	165
6.6	Wechselwirkung zusammengesetzter Systeme . . . . .	165
	Anmerkungen . . . . .	169
	Aufgaben . . . . .	169
<b>7</b>	<b>Identische Teilchen</b>	<b>171</b>
7.1	Symmetrisierungs-Postulat . . . . .	171
7.2	Fockraum . . . . .	176
7.3	Basen, Erzeuger, Vernichter . . . . .	178
7.4	Zähl-Observable . . . . .	182
7.5	Spurformel und Quasifreie Zustände . . . . .	185
7.6	Hartree-Fock Zustände . . . . .	188
7.7	*Höhere Momente . . . . .	190
7.8	$\circ$ Stabilität der Materie . . . . .	192
	Anmerkungen . . . . .	192
	Aufgaben . . . . .	193
<b>8</b>	<b>Störungstheorie</b>	<b>195</b>
8.1	Störungstheorie für isolierte Eigenwerte . . . . .	195
8.2	Unbeschränkte Störungen . . . . .	198
8.3	Störungen in Resolventensprache . . . . .	199
8.4	Niveau-Abstoßung und mehrere Kontrollparameter . . . . .	201
8.5	Störungen vom endlichen Rang . . . . .	202
8.5.1	$\circ$ Störung durch Randbedingungen . . . . .	204
8.6	$\circ$ Stabilität des Spektrums . . . . .	204
8.7	Zeitabhängige Störungen . . . . .	204
	Anmerkungen . . . . .	207

Aufgaben . . . . .	207
<b>9 °Classical Limit</b>	<b>209</b>
9.1 Norm limit of observables . . . . .	209
9.2 Stationary phase integrals . . . . .	209
9.3 WKB-Approximation . . . . .	209
<b>10 Das Bellsche Theorem</b>	<b>211</b>
10.1 Verborgene Variable: Ist Quantenmechanik etwas Neues? . . . . .	211
10.2 Zwei Ableitungen . . . . .	213
10.2.1 Korrelationstabellen und Ungleichungen . . . . .	213
10.2.2 Der Satz vom Bellschen Telefon . . . . .	218
10.3 Das Bellsche Theorem . . . . .	221
10.3.1 Zusammenfassung des Bellschen Theorems . . . . .	221
10.3.2 Experimente . . . . .	223
10.3.3 °Absoluter Zufall . . . . .	225
10.3.4 °Unmögliche Maschinen . . . . .	225
10.4 °Zustandstrennung und Steering . . . . .	225
10.4.1 °Einstein, Podolsky und Rosen . . . . .	225
<b>11 Interpretationen und Paradoxien</b>	<b>227</b>
11.1 °Grundfragen der Interpretation . . . . .	228
11.1.1 Was geschieht zwischen Präparation und Messung? . . . . .	228
11.1.2 Ersetzt die Quantenmechanik alle klassischen Theorien? . . . . .	229
11.1.3 Kann man den Beobachter eliminieren? . . . . .	232
11.2 Alternative Ansätze . . . . .	232
11.2.1 Kopenhagener Interpretation . . . . .	232
11.2.2 Einzelzustands-Interpretation . . . . .	234
11.2.3 Bohmsche Mechanik . . . . .	238
11.2.4 Viele Welten . . . . .	243
11.2.5 Consistent Histories . . . . .	243
11.2.6 Dynamischer Kollaps . . . . .	243
11.2.7 Esoterik und Bewusstsein . . . . .	243
Anmerkungen . . . . .	243
<b>12 Symmetrien und Observable elementarer Systeme</b>	<b>245</b>
12.1 Gruppen und Darstellungen . . . . .	246
12.1.1 Topologische und Lie-Gruppen . . . . .	246
12.1.2 Irreduzibilität und Darstellung kompakter Gruppen . . . . .	251
12.1.3 Projektive Darstellungen . . . . .	256
12.2 Kovariante Observable: der projektionswertige Fall . . . . .	258
12.3 Charakterisierung von Teilchen . . . . .	262
12.3.1 Darstellung affiner Gruppen . . . . .	262
12.3.2 Darstellungen der Poincaré-Gruppe . . . . .	264
12.3.3 Darstellungen der Galilei-Gruppe . . . . .	266

12.4 Kovariante Observable: POVMs . . . . .	268
12.4.1 Observable mit Dichte . . . . .	268
12.4.2 Naimark-Dilatation . . . . .	269
12.4.3 <sup>◦</sup> Ortsobservable für relativistische Teilchen . . . . .	272
12.4.4 <sup>◦</sup> Phasenraum-Observable . . . . .	272
12.4.5 <sup>◦</sup> Kovariante Zeitobservable und Auffangschirme . . . . .	272
<b>13 Irreversible Dynamik und Messprozess</b>	<b>273</b>
13.1 <sup>◦</sup> Vollständig positive Operationen . . . . .	273
13.1.1 <sup>◦</sup> Stinespring-Dilatation . . . . .	274
13.1.2 <sup>◦</sup> Wiederholte Messungen . . . . .	274
13.2 Ankunftszeit-Observable . . . . .	274
13.3 <sup>◦</sup> Vollständig positive Zeitentwicklungen . . . . .	274
<b>14 Quanten- Informationstheorie</b>	<b>275</b>
14.1 <sup>◦</sup> Aufgaben und Ressourcen . . . . .	275
14.2 <sup>◦</sup> Verschränkung . . . . .	275
14.3 <sup>◦</sup> Kompression und Kodierung . . . . .	275
14.4 <sup>◦</sup> Kryptographie . . . . .	275
14.5 <sup>◦</sup> Quantenrechner . . . . .	275
<b>Hinweise zu den Aufgaben</b>	<b>277</b>
<b>Lernhinweise</b>	<b>279</b>
<b>Literatur</b>	<b>279</b>
<b>Index</b>	<b>289</b>





# Kapitel 1

## Hinführung zur Quantenmechanik

### 1.1 Geschichte

Zur Vorgeschichte der Quantenmechanik gehören die Arbeiten von Planck (1900) zur Schwarzkörperstrahlung, Einstein (1905) zum Photoeffekt, Bohr (1913) zum Wasserstoffatom und de Broglie (1924) zur Wellennatur von Teilchen. Demnach zeigte das Licht gelegentlich Eigenschaften von Teilchen (Energie  $E = \hbar\omega$ ) und andererseits zeigten Teilchen auch Welleneigenschaften wie Interferenz. Das Geburtsjahr der Quantenmechanik ist

1926.

In diesem Jahr löst Schrödinger in einer spannenden Reihe von Arbeiten [Sch26] die Proportionsgleichung

$$\frac{\text{Wellenoptik}}{\text{Geometrische Optik}} = \frac{\text{X-Wellenmechanik}}{\text{Klassische Mechanik}} \quad (1.1)$$

oder als Suche nach einer Gleichung geschrieben:

$$\frac{\text{Maxwell-Gl.}}{\text{Eikonal-Gl.}} = \frac{\text{X-Wellengl.}}{\text{Hamilton-Jacobi-Gl.}} \quad (1.2)$$

Ein paralleler Zugang begann 1925 mit Überlegungen von Heisenberg [Hei25] über die Messbarkeit von Phasenbeziehungen von Teilchen im Bohrschen Atommodell. Diese Arbeit hat zwei Teams zur Aufstellung von Versionen der Quantenmechanik inspiriert, nämlich einerseits Born und Jordan mit Heisenberg zur so genannten Matrizenmechanik und andererseits Dirac. Noch 1926 zeigt Schrödinger die Äquivalenz beider Zugänge. Die statistische Interpretation der Theorie wird von Born (ebenfalls 1926) geliefert. Damit ist die Grundlage der Theorie abgeschlossen und Begriffe wie “Welle-Teilchen Dualismus” sind obsolet geworden.

Fast gleichzeitig wurde die Theorie in ihre heutige mathematische Form gebracht. So ließ sich Born von Norbert Wiener dabei beraten, aus Matrizen Operatoren zu machen und so auch “aperiodische Probleme” ohne vorgegebene Basis, also z.B. ein freies Teilchen, zu behandeln. Hilbert hielt im WS 1926/27 in Göttingen eine Vorlesung über Quantenmechanik, wobei sein junger Assistent John von Neumann parallel den Hilbertraum, Dichtematrizen und die Entropie für Quantenzustände einführt und die Mehrheit der mathematischen Grundtatsachen der Theorie bewies. Die Rolle der Gruppentheorie wurde von Wigner und Weyl geklärt.

Es beginnen die “goldenen Jahre der Quantentheorie”, so genannt, weil jeder der brillanten Studenten, die damals durch Göttingen zogen, eine gute Chance hatte, sich einen Nobelpreis zu verdienen. Wichtige Entwicklungen sind: Diracs relativistische Theorie des Elektrons (1928), die Klärung der Permutationssymmetrie identischer Teilchen (Dirac 1926, Heisenberg 1926, Wigner 1927), erste Anwendungen auf Quantenchemie (Born und Oppenheimer, 1927) und Festkörperphysik (Bloch 1928).

Bemerkenswert ist, dass trotz der phantastischen Erfolge der Theorie die Interpretation umstritten blieb. Insbesondere Einstein und Schrödinger, die sich mit der grundsätzlich statistischen Interpretation nicht abfinden mochten, wurden von jungen Herren wie Heisenberg und Pauli als senil beschimpft. Mit der Arbeit von Einstein-Podolsky-Rosen (“EPR”, 1935 [EPR35]) gelang es Einstein, einige seiner Bedenken gut auf den Punkt zu bringen [10.4.1]. Schrödinger publizierte umgehend seine Analyse dieser Arbeit [Sch35], in der er den Begriff “Verschränkung” prägte und dies als den wesentlich neuen Zug der Quantenmechanik gegenüber der klassischen Theorie identifizierte. Die gesamte spätere Entwicklung der Quanteninformationstheorie hat hier ihre Wurzel. Aus heutiger Sicht kann man also

1935

als das zweite Geburtsjahr der Quantenmechanik bezeichnen. Dennoch hat damals kaum jemand die EPR-Arbeit gelesen. Zu sehr war man im physikalischen Goldrausch dieser Jahre gefangen, um die Bedenken eines alten Mannes anzuhören. Die Erwiderung wurde von Niels Bohr übernommen. Bohr übersah die neuen Gedanken der EPR-Arbeit vollständig und tadelte die Autoren lediglich für die Nicht-Übernahme seines Komplementaritäts-Standpunkts. Gelesen hat auch diese Arbeit vermutlich kaum jemand. Aber es reichte die Tatsache der Erwiderung, dass man zum Tagesgeschäft übergehen konnte. Seit man Bohr so zum Papst in Sachen Interpretation gemacht hat, ist die begriffliche Auseinandersetzung mit der Quantenmechanik auf den Hund gekommen. Ein Lieblingsmotto von Bohr war: “Das Gegenteil einer einfachen Wahrheit ist eine falsche Aussage. Das Gegenteil einer tiefen Wahrheit ist dagegen auch eine tiefe Wahrheit”. Das kann man auch als eine fatale Einladung dazu lesen, Tiefsinn zu schwafeln, anstatt so klar wie möglich zu sagen, was klar zu sagen ist. Manche Kollegen gefallen sich jedenfalls darin, die Quantenmechanik als zwar überaus erfolgreich, aber ansonsten als “unverstehbar” zu bezeichnen. Daraus ergibt sich dann das Motto “shut up and calculate”. Ich finde es da besser, erst mal das zu erklären, was man braucht, um an den Erfolgen der Theorie teilzuhaben: Das kann man nämlich alles genauso gut

verstehen wie andere Teile der Physik. Von da aus kann man dann auch viel präziser sagen, was an der Quantenmechanik der Alltagsintuition zuwider läuft und wie manche Physiker mit diesen “Paradoxien” umgegangen sind. Wir werden uns im Kapitel 11 damit beschäftigen.

## 1.2 Wellen, Teilchen, Wahrscheinlichkeit

Die experimentellen Befunde zur Quantenmechanik sind heute um vieles klarer als zur Zeit ihrer Entwicklung. Man kann einfach Beugungsbilder von Röntgenlicht und Neutronen nebeneinander halten und sieht so unmittelbar, dass “Teilchen” auch Welleneigenschaften wie Interferenz zeigen. Umgekehrt werden die Teilcheneigenschaften von Licht evident dadurch, dass man einzelne Photonen im Photomultiplier, mit “avalanche photo diodes” oder supraleitenden Detektoren nachweisen kann.

Betrachten wir ein gewöhnliches optisches Experiment mit (fast) monochromatischem Licht der Kreisfrequenz  $\omega$ , das durch die klassische Elektrodynamik gut beschrieben wird, also etwa ein Beugungsexperiment oder ein Experiment mit polarisiertem Licht. Als Detektor verwenden wir aber keine Photoplatte, sondern eine Batterie von Zählern, die auch einzelne Photonen nachweisen können. Der Vergleich von Theorie (Lösung der Maxwell-Gl.) und Experiment (Zählraten) wird nach folgender **Korrespondenzregel** hergestellt:

$$\text{Photonen-Zählrate} = \frac{\text{Energiestromdichte des elektromagnetischen Feldes}}{\hbar\omega}, \quad (1.3)$$

wobei natürlich die Energiestromdichte am Ort des Zählers gemeint ist, gegebenenfalls noch gewichtet mit der Polarisations- und spektralen Empfindlichkeit des Zählers. Die Konstante auf der rechten Seite ist das (“reduzierte”) Plancksche Wirkungsquantum  $\hbar = 1.054571726 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ . Alle Größen in Gleichung (1.3) liegen damit fest und diese Gleichung lässt sich experimentell überprüfen. Sie bewährt sich hervorragend.

Wenn wir die Gesamtintensität der optischen Quelle nun um einen Faktor reduzieren, vermindern sich alle Zählraten um den gleichen Faktor. Wir müssen also dann lediglich länger warten, um die gleiche Zählstatistik zu erhalten. Im Extremfall können wir die Intensität so weit reduzieren, dass wir sicher sein können, dass zu jeder Zeit höchstens ein “Photon” in der Apparatur ist. Aus unserem klassischen optischen Experiment ist damit ein Experiment mit *einzelnen Photonen* geworden.

Es ist klar, dass die Zählereignisse für diese einzelnen Photonen sich nicht im Einzelfall vorhersagen lassen: Sie müssen sich ja letzten Endes (nach vielen gleichartigen Experimenten dieser Art, bzw., nach langer Laufzeit des Strahls) zu den bekannten Zählhäufigkeiten summieren. Aus Experimenten dieser Art bekommen wir also **Wahrscheinlichkeitsaussagen** über einzelne Photonen. Der Witz bei dieser Betrachtungsweise ist nun, dass wir die Wahrscheinlichkeiten für solche Experimente schon aus der

klassischen Elektrodynamik (oder aus Experimenten mit großen Intensitäten) kennen: Wir wissen also eigentlich schon eine Menge über Photonen. In diesem Sinne werden wir einige Grundzüge der Quantenmechanik aus der Elektrodynamik ableiten. Diese Grundzüge werden dann auch für andere Teilchen gelten. Um Missverständnissen vorzubeugen, soll aber festgehalten werden, dass die Quantenoptik sich nicht insgesamt aus dieser Betrachtung ableiten lässt: Besonders bei Korrelationsexperimenten wird es noch wesentliche neue Aspekte geben.

Der Klassiker unter den einfachen optischen Experimenten ist der **Doppelspalt-Versuch**, bei dem eine ebene Welle auf einen Schirm trifft, in den zwei Spalten oder Löcher geschnitten sind und das durchgelassene Licht im Fernfeld detektiert wird. Der Schirm ist hier als Randbedingung an die Maxwell-Gleichung zu berücksichtigen, was keine einfache Übungsaufgabe ist. Man erhält aber schon ein qualitativ richtiges Bild, wenn man die optischen Weglängen von den beiden Spalten aus betrachtet und so hinter den Spalten Gebiete konstruktiver und destruktiver Interferenz ausmacht. Insbesondere sieht man so, dass bei Öffnung beider Spalten ein Interferenzmuster entsteht, während sich bei nur einem Spalt eine eher breite Verteilung ergibt. Vom Standpunkt der Elektrodynamik ist das kaum mysteriös. Merkwürdig wird es aber schon, wenn man den Effekt im Teilchenbild deuten will. Offenbar gibt es ja zwei Sorten Teilchen: Die, die durch Spalt A gegangen sind, und die, die durch B gegangen sind. Deren Verteilungen kennen wir jeweils aus den Versuchen mit Einzelspalten. Wenn wir beide Gruppen zusammen laufen lassen, sollte sich also eine breite Verteilung ergeben, im Widerspruch zur Theorie und zum Experiment. Man wird der Sache nicht Herr, wenn man dies als Beleg dafür sieht, dass die Teilchen durch beide Löcher gleichzeitig gehen, sich also irgendwie aufspalten. Nichts weist darauf hin, dass hier irgend eine neue Sorte “aufgespaltener” Teilchen unterwegs ist. Für die erfolgreiche theoretische Beschreibung, also die Vorhersage aller einschlägigen Wahrscheinlichkeitsmuster ist ein solcher Begriff, oder die Beantwortung der Frage “Durch welches Loch?” offenbar auch nicht nötig. Das ist ein deutlicher Kontrast zur klassischen Mechanik, wo jede Erklärung darauf basiert, die Teilchenbahnen im Einzelnen zu verfolgen. Dies wird uns auch später immer wieder begegnen: Die Quantenmechanik kommt zu ihren Wahrscheinlichkeits-Vorhersagen, ohne Geschichten zu erzählen über die Entwicklung diverser physikalischer Größen, die man vielleicht hätte messen können, aber nicht gemessen hat. Im Doppelspalt-Versuch ist der Ort eine solche Größe. Dass die Quantenmechanik über die Frage “Durch welches Loch?” keine Auskunft gibt, kann man frustrierend finden oder einen Mangel der Theorie. Am besten geht man dieser Frage nach, wie ein Physiker so etwas tun sollte: durch Nachforschen. Zum Beispiel kann man das Experiment so modifizieren, dass der Durchgang durch Loch A oder B auch erfasst wird. Sobald eine konkrete Anordnung vorgegeben ist, ist dann die Quantenmechanik auch wieder zuständig. Sie sagt, dass jede zusätzliche Wechselwirkung, die die Frage zu entscheiden erlaubt, dazu führt, dass das Interferenzmuster zerstört wird. Wir werden den Zusammenhang von Messung und Störung in den Abschnitten 3.4 und ►] noch allgemeiner und genauer anschauen. Aber dafür müssen wir die Theorie erst besser kennenlernen.

## 1.3 Polarisationsexperimente

Wir betrachten die einfachste Situation: einen möglicherweise polarisierten Lichtstrahl. Die Lösung der Maxwell-Gleichungen setzen wir also als ebene Welle in 3-Richtung an:

$$E_\mu(\vec{x}, t) = \Re(\Psi_\mu e^{i(kx_3 - \omega t)}) \quad \text{und} \quad B_\mu(\vec{x}, t) = \Re(\Phi_\mu e^{i(kx_3 - \omega t)}) , \quad (1.4)$$

wobei  $\Psi_\mu, \Phi_\mu \in \mathbb{C}$ , für  $\mu = 1, 2, 3$ , komplexe Zahlen sind. Aus den Maxwell-Gleichungen<sup>1</sup> bekommt man sofort, dass  $\Psi_3 = \Phi_3 = 0$  und dass  $\Phi_1 = -\Psi_2/c$  und  $\Phi_2 = \Psi_1/c$ . Die Lösungen sind also parametrisiert durch die beiden komplexen Parameter  $\Psi_1$  und  $\Psi_2$ . Wir fassen diese zusammen zu einem Vektor mit zwei komplexen Komponenten:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2 . \quad (1.5)$$

Außer in der Wahl der Buchstaben steckt hierin noch keine Quantenmechanik. Die Energiestromdichte  $I$  ist durch den Poynting-Vektor  $(E \times B)/\mu_0$  gegeben. Er hat einen konstanten Term, der in die 3-Richtung zeigt und einen, der mit Kreisfrequenz  $2\omega$  oszilliert. Im Zeitmittel ergibt das als Energiestromdichte in Ausbreitungsrichtung  $[\dot{U}]$

$$I = \frac{1}{2c\mu_0} \|\Psi\|^2 . \quad (1.6)$$

Dabei ist

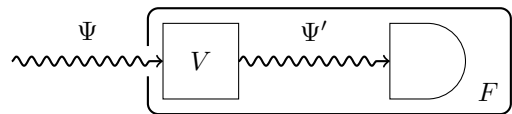
$$\|\Psi\|^2 = \sum_{i=1}^2 |\Psi_i|^2 = \langle \Psi, \Psi \rangle , \quad (1.7)$$

mit  $\langle \Psi, \Phi \rangle = \overline{\Psi_1} \Phi_1 + \overline{\Psi_2} \Phi_2$ , dem Skalarprodukt für Vektoren in  $\mathbb{C}^2$ .

Interessant wird ein solches Experiment natürlich erst, wenn wir auch verschiedene Polarisationen unterscheiden können. Wir erlauben alle Detektoren, die aus irgendwelchen Polarisatoren,  $\lambda/4$ -Plättchen, Strahlteilern, Linsen, Spiegeln und ähnlichen Stücken aus dem Arsenal der linearen Optik bestehen, gefolgt von einem Photomultiplier als End-Detektor (siehe Abb. 1.1). Jeder dieser Detektor-Vorsätze wird also durch eine lineare Transformation  $V$  der  $\Psi$ -Vektoren beschrieben:  $\Psi' = V\Psi$ , oder in Komponenten ausgeschrieben:

$$\begin{pmatrix} \Psi'_1 \\ \Psi'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11}\Psi_1 + V_{12}\Psi_2 \\ V_{21}\Psi_1 + V_{22}\Psi_2 \end{pmatrix} . \quad (1.8)$$

Zum Beispiel wird ein linearer Polarisator in  $x_1$ -Richtung einfach die 1-Komponente des  $\Psi$ -Vektors belassen und die 2-Komponente Null setzen. Das entspricht dem ersten



**Abb. 1.1:** Aufbau der hier betrachteten Detektoren

<sup>1</sup>in SI-Einheiten

Eintrag der folgenden Zusammenstellung von Polarisator-Bauelementen und den zugehörigen Matrizen  $V$ :

$$\begin{array}{ll}
 \text{Linear-}x & : \quad V = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \text{Linear-}y & : \quad V = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 \text{Linear-}\alpha & : \quad V = \begin{pmatrix} (\cos \alpha)^2 & \cos \alpha \sin \alpha \\ \cos \alpha \sin \alpha & (\sin \alpha)^2 \end{pmatrix} \\
 \text{Zirkular-Rechts} & : \quad V = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} & \text{Zirkular-Links} & : \quad V = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \\
 \lambda/4\text{-Plättchen} & : \quad V = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}
 \end{array}$$

Die Zählrate unseres Detektors ist also gegeben durch  $I' = \|\Psi'\|^2$ . Man kann diesen Ausdruck noch etwas besser zusammenfassen, indem man die Matrix  $F = V^*V$ , d.h.,

$$F_{\mu\nu} = \sum_{\alpha=1,2} \overline{V_{\alpha\mu}} V_{\alpha\nu} \quad (1.9)$$

eingführt. Dann ist  $I' = (1/2c\mu_0)\langle\Psi, F\Psi\rangle$ . Die Matrix  $F$  enthält also nun die gesamte Information über den Detektor. Wir fassen zusammen:

Ein Polarisations-Detektor ist charakterisiert durch eine  $2 \times 2$ -Matrix  $F$ . In einem Lichtstrahl mit der komplexen Amplitude  $\Psi \in \mathbb{C}^2$  ist

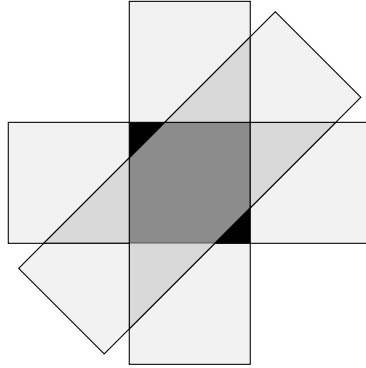
$$p = \frac{I'}{I} = \frac{\langle\Psi, F\Psi\rangle}{\langle\Psi, \Psi\rangle} \quad (1.10)$$

die Wahrscheinlichkeit (Häufigkeit pro Photon) dafür, dass der Detektor anspricht.

Es ist klar, dass nur Matrizen  $F$  in Frage kommen, für die bei beliebigem  $\Psi$  auch  $0 \leq p \leq 1$  gilt. Matrizen mit der Eigenschaft  $\langle\Psi, F\Psi\rangle \geq 0$ , für alle  $\Psi$ , heißen *positiv* (symbolisch:  $F \geq 0$ ). Wir können also diese Bedingung auch kurz als  $0 \leq F \leq \mathbb{1}$  schreiben.

All das scheint erst einmal nicht weiter aufregend und völlig im Rahmen klassischer Theorien verständlich: Wir betrachten hier eben eine Sorte Teilchen, die sich in ihren Polarisations-eigenschaften unterscheiden. Sicher haben nicht alle Photonen die gleichen Eigenschaften, sonst würden ja an einem Polarisationsfilter stets entweder alle oder kein Photon durchkommen. Die Polarisations-eigenschaften sind also statistisch verteilt und die Filter lassen jeweils nur Photonen mit den passenden Eigenschaften durch. Aber irgendetwas stimmt an dieser einfachen “Theorie” nicht: Nach einer solchen Vorstellung müsste das Einführen eines zusätzlichen Filters ja immer eine verschärfte Anforderung an die Polarisations-eigenschaften für durchgelassene Photonen bedeuten und damit ein Abnehmen der Intensität (bzw. der Zählrate). Das stimmt aber nicht: Wegen der Linearität der Maxwell-Gleichungen kommt durch eine Anordnung mit drei Linearpolarisatoren in Winkeln  $0, 45^\circ, 90^\circ$  etwas durch, aber nichts mehr, wenn der mittlere Polarisator ausgelassen wird (siehe Abb. 1.2). Es lässt sich allgemeiner zeigen, dass die Vorstellung von einem Polarisationsfilter als einem Instrument, das Photonen

nach irgendwelchen “Eigenschaften” aussondert nicht mit dem Kosinusetz für die Winkelabhängigkeit der durchgelassenen Intensität verträglich ist. Ähnlichen Schwierigkeiten begegnet man bei dem Versuch, Photonen allzu naiv als Teilchen zu sehen, auf Schritt und Tritt und in *jedem* Interferenzexperiment, wie dem bereits diskutierten Doppelspalt-Experiment.

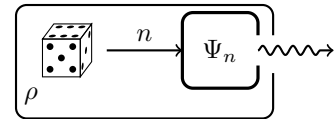


**Abb. 1.2:** Drei lineare Polarisationsfilter, gestapelt im Winkel  $0^\circ, 45^\circ, 90^\circ$ . Zwei rechtwinklig gekreuzte Filter lassen kein Licht durch. Der schräg dazwischen geschobene macht es wieder heller [Ü1.1].

Was aber in all diesen Fällen möglich ist und darüber hinaus in komplizierten Anordnungen von Photonen-Koinzidenz-Zählern, ebenso wie für Materieteilchen, ist eine Beschreibung der Ansprechhäufigkeiten durch Operatoren wie die Matrix  $F$ . Die Berechnung solcher Häufigkeiten ist die Aufgabe der Quantenmechanik.

## 1.4 Dichtematrizen

Bisher haben wir angenommen, dass der Lichtstrahl durch eine fest gewählte Lösung der Maxwell-Gleichungen gegeben ist. Das ist aber oft nicht der Fall. Nichts hindert uns, unsere Detektoren auch auf natürliches Licht anzuwenden, das höchstens unvollständig polarisiert ist. Solche Lichtquellen lassen sich gut statistisch beschreiben: Wir nehmen also an, dass in jedem Einzelexperiment eine bestimmte Lösung der Maxwell-Gleichungen vorliegt. Welche es aber ist, liegt nur mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit fest. Nehmen wir also an, dass nur  $N$  Lösungen mit den komplexen Amplituden  $\Psi_1, \dots, \Psi_N$  vorkommen, und zwar mit den Wahrscheinlichkeiten  $p_n$  (es muss also gelten:  $p_n \geq 0$  und  $\sum_{n=1}^N p_n = 1$ ). Dann bekommen wir für die Ansprechrate des Detektors



**Abb. 1.3:** Aufbau einer gemischten Quelle  $\rho$

$$I' = \sum_{n=1}^N p_n \langle \Psi_n, F \Psi_n \rangle, \quad (1.11)$$

und einen entsprechenden Ausdruck mit  $F = 1$  für die Gesamtzählrate. So, wie wir schon das statistische Verhalten des Detektors in einer einzigen Matrix zusammengefasst haben, können wir jetzt auch bei der Beschreibung der Quelle vorgehen: Wir führen die  $2 \times 2$ -Matrix

$$\rho_{\nu\mu} = I^{-1} \sum_n p_n (\Psi_n)_\nu \overline{(\Psi_n)_\mu} \quad (1.12)$$

ein. Dann ist die Ansprechrate des Detektors

$$I' = I \cdot \sum_{\mu,\nu=1,2} \rho_{\nu\mu} F_{\mu\nu} = I \cdot \text{tr}(\rho F) , \quad (1.13)$$

wobei  $\text{tr}(A) = \sum_\nu A_{\nu\nu}$  die Spur, d.h. die Summe der Diagonalelemente einer Matrix bezeichnet und in der Spur das Matrixprodukt gebildet wird. Man rechnet leicht nach, dass  $\rho$  eine positive Matrix ist und da wir die Gesamtintensität als Faktor herausgezogen haben, gilt auch  $\text{tr}(\rho) = 1$ . Matrizen mit dieser Eigenschaft heißen **Dichtematrizen**. Zusammenfassend:

Die Polarisationsstatistik eines allgemeinen Lichtstrahls ist charakterisiert durch eine  $2 \times 2$ -Dichtematrix  $\rho$ . Ein einzelnes Photon dieses Strahls spricht auf den durch  $F$  charakterisierten Detektor an mit der Wahrscheinlichkeit

$$p = \frac{I'}{I} = \text{tr}(\rho F) . \quad (1.14)$$

Diese Aussage gilt entsprechend auch für alle Quantensysteme: Die Angabe der Dichtematrix bestimmt die Wahrscheinlichkeiten für alle möglichen Messungen. Man bezeichnet daher Dichtematrizen auch als **Zustände** des Systems. Leider suggeriert dieser Ausdruck, es handele sich hierbei um eine Eigenschaft der einzelnen Photonen. Das ist aber irreführend und gibt zu einigen Pseudoparadoxien der Quantenmechanik Anlass. Um es also noch einmal zu betonen: Ein “Zustand”, gegeben durch eine Dichtematrix  $\rho$ , charakterisiert die statistischen Eigenschaften des ganzen Strahls, also letzten Endes die Präparation des Strahls.

Wir betrachten die Menge der  $2 \times 2$ -Dichtematrizen, also die Menge der möglichen “Polarisationszustände” etwas genauer. Zunächst ist aufgrund der Konstruktion (1.12) klar, dass  $\overline{\rho_{\nu\mu}} = \rho_{\mu\nu}$ . (Dies folgt auch schon aus  $\rho \geq 0$ ). Berücksichtigen wir noch die Normierungsbedingung  $\text{tr}(\rho) = 1$ , so können wir jedes  $\rho$  schreiben als

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + r_3 & r_1 - ir_2 \\ r_1 + ir_2 & 1 - r_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\mathbb{1} + r_1 \sigma_1 + r_2 \sigma_2 + r_3 \sigma_3) , \quad (1.15)$$

wobei

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

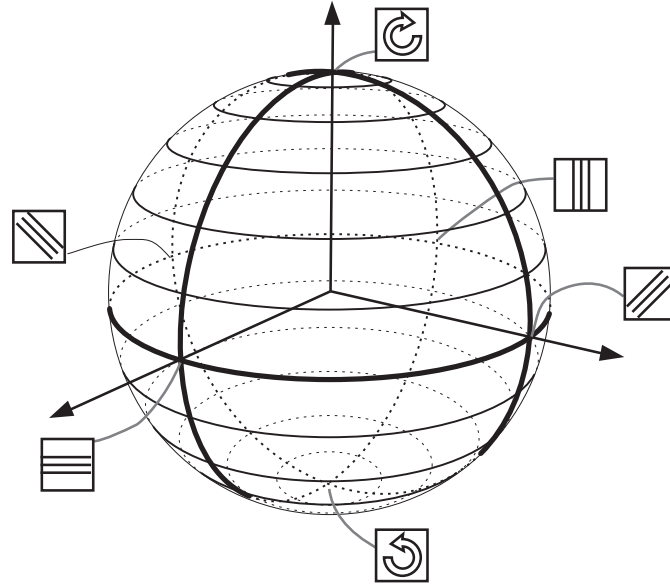
die sogenannten Pauli-Matrizen sind und die  $r_n$  drei *reelle* Parameter. Wir müssen noch die Bedingung  $\rho \geq 0$  auswerten. Sie ist, wie wir später noch ausführlich sehen werden, äquivalent zur Positivität der Eigenwerte von  $\rho$ . Die Summe der Eigenwerte



(also die Spur  $\text{tr}(\rho) = 1$ ) ist ja positiv. Es reicht also, sicherzustellen, dass auch das Produkt der Eigenwerte (also die Determinante  $\det \rho = (1 - r_3^2 - r_1^2 - r_2^2)$ ) positiv ist. Als Bedingung an die  $r_n$  erhalten wir also

$$r_1^2 + r_2^2 + r_3^2 \leq 1 . \quad (1.17)$$

Die möglichen Zustände (Dichtematrizen) bilden also in diesen Koordinaten eine Vollkugel in  $\mathbb{R}^3$ , den **Zustandsraum** des Polarisationsfreiheitsgrades. In der Optik heißt



**Abb. 1.4:** Der Zustandsraum des Polarisationsfreiheitsgrades. Eingetragen sind die verschiedenen linearen und zirkulären Polarisationen.

diese Kugel auch die Poincaré-Kugel und die drei Koordinaten  $r_1, r_2, r_3$  heißen Stokes-Parameter. In der Festkörperphysik, speziell für den Spinfreiheitsgrad von Elektronen, heißt sie Bloch-Kugel.

Zur Kartierung dieser Kugel betrachten wir zunächst die Lichtstrahlen aus dem letzten Abschnitt, die also durch eine feste komplexe Amplitude  $\Psi$  gegeben sind. Dann hat (1.12) nur einen einzigen Term und

$$\rho_\Psi = \frac{1}{I} \begin{pmatrix} |\Psi_1|^2 & \Psi_1 \overline{\Psi_2} \\ \Psi_2 \overline{\Psi_1} & |\Psi_2|^2 \end{pmatrix} . \quad (1.18)$$

Ein solcher Operator (mit  $\|\Psi\| = 1$ ) wirkt auf einen Vektor  $\Phi \in \mathbb{C}^2$  als

$$\rho_\Psi \Phi = \langle \Psi, \Phi \rangle \Psi , \quad (1.19)$$

d.h. als Projektor auf den Unterraum der Vielfachen von  $\Psi$ . Die Eigenwerte sind also 0 und 1 und, wie man auch direkt aus (1.18) sofort sieht, gilt für eine solche Matrix  $\det(\rho_\Psi) = 0$ . Die Positivitätsbedingung ist also gerade eben erfüllt: Solche Dichtematrizen entsprechen genau den Punkten auf der Oberfläche der Kugel. Alle Punkte im

Inneren erhält man übrigens schon mit zwei Termen in (1.12): Durch Variation der Gewichte  $p_1$  und  $p_2$  erhält man genau die Verbindungsstrecke zwischen zwei Oberflächenpunkten. Die Tatsache, dass zu je zwei Zuständen auch die ganze Verbindungsstrecke wieder aus Zuständen besteht, bezeichnet man als Konvexität des Zustandsraums. Die Punkte, die sich nicht als Konvexkombinationen darstellen lassen, die also auf keiner nicht-trivialen Verbindungsstrecke liegen, bezeichnet man in der Geometrie konvexer Mengen als Extrempunkte. Die Extrempunkte des Zustandsraums heißen auch **reine Zustände**: Sie sind genau die Oberflächenpunkte, also die Dichtematrizen der Form (1.18), also die eindimensionalen Projektoren.

## 1.5 Schrödingergleichung

Die Statistik einfacher Photonenexperimente lässt sich nach (1.3) aus den Maxwell-Gleichungen ableiten. Dabei sind Interferenzeffekte eine direkte Folge der Linearität der Maxwell-Gleichungen, des *Superpositionsprinzips*. Nach dem experimentellen Befund, dass auch bei Materieteilchen Interferenzen zu beobachten sind, suchen wir also eine lineare Wellengleichung für Teilchen. Beginnen wir mit der Gleichung  $E = \hbar\omega$  und lesen sie so, dass jedem Teilchen der Energie  $E$  irgendwie eine Schwingung der Frequenz  $\omega$  zukommt. Betrachten wir diese Schwingung aus einem fahrenden Zug, so bedeutet dies nach den Transformationseigenschaften der Relativitätstheorie, dass wir auch jedem Impuls  $p$  eine räumliche Schwingung (Welle) der Wellenzahl  $k = p/\hbar = 2\pi/\lambda$  zuordnen müssten (dieser Gedanke stammt von de Broglie).

Betrachten wir ein klassisches Teilchen in einem (zunächst konstanten) Potential  $V$ . Die Energie ist  $E = \vec{p}^2/(2m) + V$ . Nach dem Gesagten setzen wir dafür eine ebene Welle der Form

$$\Psi(\vec{x}, t) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x} - i\omega t} \quad (1.20)$$

an, wobei  $\hbar\omega = E$  und  $\hbar\vec{k} = \vec{p}$ . Dann ist

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hbar\omega \Psi = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mu=1}^3 k_{\mu}^2 \Psi + V\Psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \sum_{\mu=1}^3 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_{\mu}^2} + V\Psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V\Psi . \quad (1.21)$$

In einem langsam veränderlichen Potential sollte diese Gleichung immer noch gelten, wenn wir an jeder Stelle  $x$  den passenden Wert des Potentials einsetzen. Danach liegt es nahe allgemein das Potential in dieser Gleichung als ortsveränderlich zuzulassen. Wir bekommen also die **Schrödingergleichung**

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}) \Psi(\vec{x}, t) .} \quad (1.22)$$

Eine häufig verwendete Kurzform dieser Gleichung ist

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi , \quad (1.23)$$

wobei  $H$  der **Hamiltonoperator** ist.  $H$  ist also die lineare Abbildung, die aus einer Wellenfunktion  $\Psi(\vec{x}, t)$  die rechte Seite von (1.22) macht. Gleichung (1.23) wird für alle Systeme gelten, die wir betrachten. Der Hamiltonoperator gehört zur Definition der Systemsorte. Hier sind es einzelne Teilchen im Potential, später auch Systeme von mehreren Teilchen, auch im Magnetfeld und mit relativistischen Korrekturen.

Schrödingers eigene Ableitung seiner Gleichung (siehe (1.2)) war etwas tiefsinniger. Aber auch er hatte das Problem: Was bedeutet diese Gleichung nun eigentlich? Was ist  $\Psi$ ? Man rechnet leicht nach (durch partielle Integration), dass die Größe

$$\int d^3x |\Psi(\vec{x}, t)|^2 \quad (1.24)$$

zeitunabhängig ist. Die naheliegendste Erhaltungsgröße für Elektronen war die Ladung, sodass Schrödinger die Größe  $|\Psi(\vec{x}, t)|^2$  erst einmal als Ladungsdichte des Elektrons interpretierte. Schon in seiner nächsten Arbeit sah er aber ein, dass diese Interpretation nicht haltbar ist. Es war Born, der dann die richtige Interpretation lieferte:  $|\Psi(\vec{x}, t)|^2$  ist die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, das Teilchen zur Zeit  $t$  am Ort  $\vec{x}$  anzutreffen.

Nach unseren Vorüberlegungen ist diese Interpretation ohnehin beinahe klar: Die Wellengleichung (1.22) war ja entwickelt als Analogon zu den Maxwell-Gleichungen und deren photonentheoretische Interpretation war nach der Korrespondenzregel (1.3), dass die Absolutquadrate der komplexen Feldgrößen die Häufigkeiten in statistischen Experimenten liefern.

Wir können die Entsprechung zwischen den “Wellenfunktionen”  $\Psi$  in der Schrödingergleichung (bei festem  $t$ ) und den Amplituden  $\Psi$  aus Abschnitt 1.3 noch weiter präzisieren. In beiden Fällen bilden die möglichen  $\Psi$  einen Vektorraum. (Ein vornehmer Ausdruck dafür ist: Es gilt das “Superpositionsprinzip”). Ferner gibt es in beiden Fällen ein Skalarprodukt  $\langle \Psi, \Phi \rangle$ , das für die Wellenfunktionen durch

$$\langle \Psi, \Phi \rangle = \int d^3x \overline{\Psi(\vec{x})} \Phi(\vec{x}) \quad (1.25)$$

definiert ist und das die Normierungsbedingung  $\langle \Psi, \Psi \rangle = \|\Psi\|^2 = 1$  bestimmt. Nach Born ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in einem Raumgebiet  $G \subset \mathbb{R}^3$  anzutreffen,

$$p = \int_{x \in G} d^3x |\Psi(\vec{x})|^2 = \langle \Psi, F\Psi \rangle, \quad (1.26)$$

wobei der Operator  $F$  definiert ist durch

$$(F\Psi)(\vec{x}) = \begin{cases} \Psi(\vec{x}) & , \text{ wenn } \vec{x} \in G \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (1.27)$$

Die Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation führt also auf die gleiche Art von Detektorbeschreibung, die wir schon für Polarisationsexperimente kennengelernt hatten, nur dass eben für Ortsmessungen der entsprechende Detektoroperator  $F$  eingesetzt werden muss.

Eine Zeitabhängigkeit kam bei den Polarisationsexperimenten nicht vor, es sei denn, man simuliert sie durch die Ortsabhängigkeit der Polarisation in einem optisch aktiven Medium. Systeme mit einem zweidimensionalen Raum von Wellenfunktionen treten aber oft auch als näherungsweise Beschreibung komplexerer Systeme auf. Die Schrödingergleichung für ein solches System hat ebenfalls die Form (1.23), wobei  $H$  eine beliebige hermitesche  $2 \times 2$ -Matrix sein kann.

Die Schrödingergleichung bestimmt die Zeitabhängigkeit von Wellenfunktionen, also von reinen Zuständen im Sinne von Abschnitt 1.4. Nach den dort angegebenen Formeln ist dann aber auch klar wie die Zeitentwicklung einer Dichtematrix zu berechnen ist, also für statistisch gemischte Zustände: Wir müssen einfach in (1.12) die zeitabhängigen Wellenfunktionen einsetzen, d.h.,

$$\rho_{\nu\mu}(t) = I^{-1} \sum_n p_n (\Psi_n(t))_\nu \overline{(\Psi_n(t))_\mu} , \quad (1.28)$$

wobei jedes  $\Psi_n(t)$  eine Lösung der Schrödingergleichung ist. Eine Bewegungsgleichung für  $\rho$  bekommt man durch Differenzieren nach  $t$  und Verwendung der Produktregel:

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{i}{\hbar}(\rho H - H\rho) . \quad (1.29)$$

Die Lösung der Schrödingergleichung zur Zeit  $t$  hängt linear von der Anfangsbedingung  $\Psi_0$  ab. Es gibt also einen linearen Operator  $U_t$ , genannt **Zeitentwicklungsoperator**, sodass  $\Psi_t = U_t \Psi_0$ . Wegen der Wahrscheinlichkeitserhaltung ist  $U_t$  unitär und wir können (in einem später zu präzisierenden Sinn) schreiben:

$$U_t = e^{-itH/\hbar} . \quad (1.30)$$

Die Zeitabhängigkeit von Dichtematrizen ist dann gegeben durch  $\rho_t = U_t \rho U_t^*$ .

## 1.6 Vertauschungsrelationen

Unsere Ableitung des Hamiltonoperators ist ein Beispiel für ein Verfahren, wie aus klassischen Größen “entsprechende” quantenmechanische gewonnen werden können: Dabei werden aus Funktionen der klassischen Variablen Ort und Impuls Operatoren im Raum der Wellenfunktionen. Wie wir bei der Energie vorgegangen sind, erhält man als **Impulsoperator**, genauer für die  $j$ -te Komponente des Impulses, den Ausdruck

$$\boxed{(P_j \Psi)(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x_j} .} \quad (1.31)$$

und weiter die folgende Korrespondenz-Tabelle:

klassisch		→	quantenmech.	Operator wirkt wie
Ort <sub>j</sub>	$x_j$	→	$Q_j$	$(Q_j\Psi)(x) = x_j\Psi(x)$
Potential	$V$	→	$V$	$(V\Psi)(x) = V(x)\Psi(x)$
Impuls <sub>j</sub>	$p_j$	→	$P_j$	$(P_j\Psi)(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x_j}$
kin.Energie	$p^2/2m$	→	$P^2/2m$	$(P^2/2m)\Psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \Psi$
Energie	$E$	→	$H$	$H\Psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V\Psi$
Drehimpuls	$\vec{L}$	→	$\vec{L}$	$L_1 = Q_2 P_3 - Q_3 P_2$
allgemein??	$f(q, p)$	→	$f(Q, P)$	?? : [Ü1.4]

Kurz gesagt also, lautet die Regel: Ersetze in jedem klassischen Ausdruck die Ortskoordinaten durch Multiplikationsoperatoren und die Impulskoordinaten durch  $(-i\hbar \times)$  Differentiationsoperatoren. Diese Regel ist recht nützlich und man sollte sie sich unbedingt merken. Es gibt aber eine entscheidende Einschränkung: Klassisch ist der Ausdruck  $(p_j q_k - q_k p_j) = 0$ . Mit den oben eingeführten Operatoren dagegen erhält man

$$((P_j Q_k - Q_k P_j)\Psi)(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial (x_k \Psi(x))}{\partial x_j} - x_k \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x_j} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial x_k}{\partial x_j} \Psi(x) = \frac{\hbar}{i} \delta_{kj} \Psi(x), \quad (1.32)$$

oder

$$\boxed{\frac{i}{\hbar} [P_j, Q_k] = \delta_{jk} \mathbb{1}}, \quad (1.33)$$

wobei  $[A, B] = AB - BA$  den “Kommutator” zweier Operatoren bezeichnet. Dies sind die so genannten *kanonischen Vertauschungsrelationen*. Für das Ausfüllen der obigen Korrespondenztabelle bedeuten sie einfach, dass es keine allgemein gültige “Quantisierungsvorschrift” für klassische Größen gibt [Ü1.4]. Die konkreten Einträge in der Tabelle sind übrigens gerade solche Funktionen von  $p$  und  $q$ , bei denen solche “Operatorordnungsprobleme” keine Rolle spielen.

Eine Sammlung von Operatoren mit bestimmten Vertauschungsrelationen ist typisch für den Zugang der Matrizenmechanik nach Heisenberg, Born und Jordan. Auch hier war die Interpretation der Grundgrößen zunächst nicht evident. Sie ergab sich dann ebenfalls aus der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation: Wenn  $|\Psi(x)|^2$  die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum ist, dann ist der Erwartungswert der  $j$ -ten Koordinate

$$\int d^3x \, x_j |\Psi(x)|^2 = \langle \Psi, Q_j \Psi \rangle. \quad (1.34)$$

Allgemeiner sind also Ausdrücke  $\langle \Psi, A \Psi \rangle$  als **Erwartungswerte** von Wahrscheinlichkeitsverteilungen zu interpretieren. Insbesondere ist  $\langle \Psi, H \Psi \rangle$  der Erwartungswert der Energie.

Entsprechend kann man auch die Erwartungswerte von Potenzen eines Operators bestimmen, also zum Beispiel  $\langle \Psi, H^n \Psi \rangle$ . Dies reicht dann aus, um die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die messbare Größe “Energie” im Zustand  $\Psi$  vollständig zu bestimmen. Übrigens ist auch die Formel  $\langle \Psi, F \Psi \rangle$  für die Ansprechwahrscheinlichkeit eines durch  $F$  beschriebenen Zählers als Erwartungswert zu interpretieren: nämlich von einer Größe, die 1 für den Fall des Ansprechens ist und 0 sonst.

## 1.7 Postulate und Interpretation

In jedem der bisherigen Abschnitte kam irgendwo die Wahrscheinlichkeitsinterpretation zum Tragen. Hier wollen wir eine vorläufige Bilanz ziehen und einige Postulate der Quantenmechanik in einer Form vorstellen, wie wir sie später verwenden werden. Die dabei vorkommenden mathematischen Ausdrücke gehören daher schon zum Teil zu einer Sprache, die wir genauer erst noch entwickeln werden.

Die Zahlen, die die Quantenmechanik als Ergebnis liefert, sind **Wahrscheinlichkeiten** oder, etwas allgemeiner, **Erwartungswerte**. Da in den bisherigen Theorievorlesungen von solchen Größen wohl wenig die Rede war, müssen wir kurz darauf eingehen, wie solche Ergebnisse zu interpretieren, d.h., mit dem Experiment zu vergleichen sind. Die allgemeine Vorschrift für statistische Experimente ist, dass ein solches Experiment genügend häufig zu wiederholen ist.

Für ein Wahrscheinlichkeitsexperiment muss dabei im Voraus festgelegt sein, welche Ergebnisse als “Treffer” zu werten sind. Die von der Theorie gelieferte “Wahrscheinlichkeit” ist dann zu vergleichen mit der Anzahl der Treffer, dividiert durch die Gesamtzahl der Wiederholungen. Entsprechend werden Erwartungswerte von Experimenten gemessen, bei denen jedes einzelne Experiment einen Zahlenwert liefert: Der Erwartungswert ist zu vergleichen mit der Summe der Messwerte, dividiert durch die Gesamtzahl der Wiederholungen. Was dabei als “genügend häufige” Wiederholung für eine angestrebte Genauigkeit gilt, wird in dem als Statistik bekannten Zweig der Wahrscheinlichkeitstheorie behandelt. Die Berechnung der statistischen Konfidenzintervalle entbindet aber den Experimentalphysiker nicht von der Pflicht, sich zu vergewissern, dass die Theorie überhaupt anwendbar ist, dass also die so gewonnenen Häufigkeiten tatsächlich reproduzierbar und frei von systematischen Fluktuationen sind, also zum Beispiel nicht abhängig von irgendwelchen Aktivitäten im Nachbarlabor schwanken. Das ist bei Wahrscheinlichkeitsmessungen nicht anders als bei allen anderen Messungen auch.

Zu erläutern wäre noch, was denn nun eigentlich als Wiederholung “des gleichen” Experiments gilt. Hier gelten die Kriterien der Experimentalphysik: Zwei innerhalb gegebener Toleranzen nach den gleichen Plänen aufgebaute Experimente gelten als gleich. Es muss also nicht etwa dieselbe Apparatur verwendet werden (wegen Abnutzungerscheinungen könnte dies sogar verboten sein). Entscheidend ist also das experimentelle **Verfahren**. Dies muss natürlich genügend präzise spezifiziert sein, wenn Reproduzier-

barkeit von Wahrscheinlichkeiten gewährleistet werden soll.

In den Experimenten der Quantenmechanik sind grundsätzlich zwei Teile zu unterscheiden: die **Präparation** und die **Messung**. Für die Polarisationsexperimente bestand die Präparation in der Herstellung des Strahls und die Messung in der Anwendung der Filter, zusammen mit dem Photonen-zähler. Das Ziel der Theorie ist nun die Berechnung der Wahrscheinlichkeiten für praktisch beliebige Kombinationen von Präparation und Messung. Die Theorie muss also mindestens enthalten: (1) Größen zur Beschreibung der Präpariervorgänge, (2) Größen zur Beschreibung der Messverfahren und (3) eine Formel zur Berechnung der Wahrscheinlichkeiten für jede Kombination.

Wie wir in Abschnitt 2.1 und 3.1 noch genauer sehen werden, gilt all dies genauso für die wahrscheinlichkeitstheoretische Beschreibung rein klassischer Systeme (wie beispielsweise Brownscher Teilchen). Was in der Quantenmechanik anders ist, sind die verwendeten mathematischen Strukturen zur Beschreibung der Grundgrößen. Der mathematische Hintergrund wird als erster abgesteckt:

**Postulat 1**

*Jeder Sorte quantenmechanischer Systeme wird ein Hilbertraum  $\mathcal{H}$  zugeordnet.*

Dies ist der Raum der Wellenfunktionen  $\Psi$ . Im Fall der Polarisationsexperimente (Abschnitt 1.3) war also  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ . Für ein freies Teilchen (Abschnitt 1.5) war  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$  der Raum der Funktionen  $\Psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ , mit  $\int dx |\Psi(x)|^2 < \infty$ . Wesentliches Strukturelement eines Hilbertraums ist das Skalarprodukt  $\langle \Phi, \Psi \rangle \in \mathbb{C}$ , definiert für beliebige  $\Phi, \Psi \in \mathcal{H}$ . Wir hatten gesehen, wie die zugehörige Norm  $\|\Psi\|^2 = \langle \Psi, \Psi \rangle$  die Normierung von Wahrscheinlichkeiten angibt, also eine direkte physikalische Bedeutung besitzt. Ein **Operator** auf  $\mathcal{H}$  ist eine lineare Abbildung  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ . Dabei lassen wir ausdrücklich zu, dass der Operator nur auf einem etwas kleineren Definitionsbereich definiert ist (wie etwa der Differentiationsoperator  $P_j$ , der nur angewendet auf differenzierbare Funktionen einen Sinn ergibt, oder der Multiplikationsoperator  $Q_j$ , dessen Anwendung die Quadratintegrierbarkeit einer Funktion zerstören kann). In diesem Fall gehört die Angabe des Definitionsbereichs zur Spezifikation des Operators dazu. Einen Operator  $A$  nennen wir **positiv**, wenn  $\langle \Psi, A\Psi \rangle \geq 0$  gilt für alle  $\Psi$  im Definitionsbereich und **hermitesch**, wenn immer  $\langle \Psi, A\Psi \rangle \in \mathbb{R}$  gilt. Wie für endliche Matrizen kann man für Operatoren eine Spur “tr” definieren [2.2.3], die in einem unendlich dimensional Hilbertraum allerdings auch unendlich sein kann.

**Postulat 2**

*Ein Präpariervorgang wird charakterisiert durch einen **Zustand** bzw. eine **Dichtematrix**. Das ist ein positiver Operator  $\rho$  auf  $\mathcal{H}$ , mit  $\text{tr}(\rho) = 1$ . Speziell für **reine Zustände** ist  $\rho$  ein eindimensionaler Projektor, also gegeben durch eine normierte Wellenfunktion  $\Psi \in \mathcal{H}$ .*

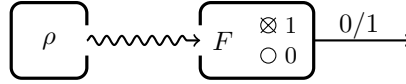
**Postulat 3**

Ein **Detektor**, d.h. ein Messapparat mit den beiden Ansprechmöglichkeiten “ja”(Treffer) und “nein”, ist gegeben durch einen Operator  $F$  mit  $0 \leq F \leq \mathbb{1}$ .

**Postulat 4**

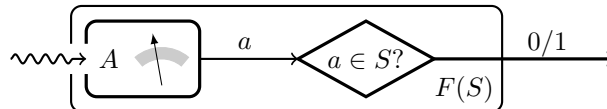
Die Ansprechwahrscheinlichkeit eines Detektors  $F$  an gemäß  $\rho$  präparierten Teilchen ist  $\text{tr}(\rho F)$ . In einem reinen Zustand spezialisiert sich dieser Ausdruck zu  $\langle \Psi, F \Psi \rangle$ .

Das Grundschema der Theorie, eigentlich jeder statistischen Theorie, ist in Fig. 1.5 dargestellt.



**Abb. 1.5:** Schema eines statistischen Experiments, mit Präparation  $\rho$  und Detektor  $F$  mit den Ausgangswerten 0 oder 1.

Im Allgemeinen kann ein Messapparat in jedem Einzelexperiment ein komplexeres Ergebnis liefern als eine einzelne ja/nein-Entscheidung. Diesen Fall kann man aber auf ja/nein Entscheidungen zurückführen. Nennen wir die Menge der möglichen Ausgänge einer Messung  $X$ . Für jede (messbare [2.1]) Teilmenge  $S \subset X$  können wir nun die Frage stellen: Liegt der Messwert  $x$  in  $S$ ? Dazu muss es also nach Postulat 3 einen Detektoroperator  $F(S)$  geben (siehe Abb. 1.6). Die Menge der Operatoren  $F(S)$  nennen wir dann eine **Observable**. Offensichtlich gilt für disjunkte Mengen  $S_1, S_2 \subset X$  auch  $F(S_1 \cup S_2) = F(S_1) + F(S_2)$ , das heißt,  $F$  ist ein “Maß” ([2.1]) mit Werten in den positiven Operatoren. Wir setzen normalerweise  $F(X) = \mathbb{1}$ , das heißt in jedem Lauf tritt sicher eines der möglichen Ergebnisse ein. Eine Alternative an dieser Stelle wäre, nur die Ungleichung  $F(X) \leq \mathbb{1}$  zu verlangen, was man aber durch Einführung eines zusätzlichen Ergebnisses “\_”, genannt Misserfolg, mit  $F(\{\_\}) = \mathbb{1} - F(X)$  auf den normierten Fall zurückführen kann. Häufig reicht es, endliche Ausgangsmengen  $X$  zu betrachten. Dann ist wegen der Maßeigenschaft alles durch die Operatoren  $F_x = F(\{x\})$  bestimmt, die einfach die Relationen  $F_x \geq 0$  und  $\sum_{x \in X} F_x = \mathbb{1}$  erfüllen müssen.



**Abb. 1.6:** Rückführung der Messung einer Größe  $A$  mit Ausgängen  $a$  auf 0/1-Messungen  $F(S)$ .

Wenn jedes  $F(S)$  ein Projektor ist, also  $F(S)^2 = F(S)$  erfüllt, nennen wir die Observable **projektionswertig**. Ein weiterer wichtiger Spezialfall sind Observable,



die als Ergebnisse reelle Zahlen liefern. Dann können wir den Erwartungswert der Verteilung als  $\text{tr } \rho A$  schreiben, wobei  $A = \sum_{x \in X} x F_x$  ein hermitescher Operator ist. Im projektionswertigen Fall ist nach dem so genannten Spektralsatz die ganze Observable schon aus  $A$  bestimmt. Man liest deshalb häufig als Definition, dass die Observablen genau die hermiteschen Operatoren sind. Warum ich diese Verkürzung nicht mitmache, ist in Abschnitt 1.8.1 nachzulesen.

Wir hatten die Zeitentwicklungsoperatoren  $U_t$  eingeführt, ohne genauer zu klären, was eigentlich die Zeitabhängigkeit von Zuständen bedeuten soll. Ein Zustand charakterisiert ja nicht ein einzelnes System mit irgendwie veränderlichen Eigenschaften, sondern ein Präparierverfahren. Schon allein zur Wiederholung des statistischen Häufigkeitsexperiments muss es zu jeder beliebigen Zeit in Gang gesetzt werden können. Für ein angemessenes Zeitmaß während des Ablaufs eines Experiments wird man also die Uhr zu Beginn jedes Einzelversuchs auf Null stellen. Für den Präparierprozess gibt es dann keine weitere Zeitabhängigkeit. Allerdings können wir uns entschließen die Messung zu verzögern. Dabei zählt nur ein *relativer* Zeitversatz, das heißt, wir stellen den Beginn der Messung nach der zu Beginn Null gesetzten Uhr ein. Würden wir Präparier- und Messprozess

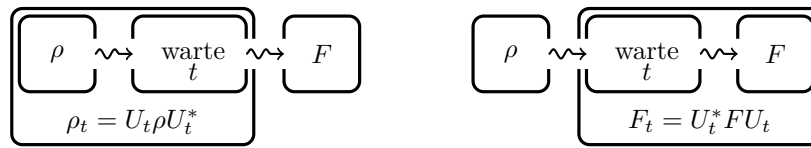
**Postulat 5**

Jede Systemsorte ist weiter charakterisiert durch einen **Hamiltonoperator**  $H$ , der den **Zeitentwicklungsoperator**  $U_t = \exp(\frac{-it}{\hbar} H)$  bestimmt. Wendet man in einem Experiment mit gegebenem Präparier- und Messverfahren die Messung mit einer Verzögerung von  $t$  Sekunden an, so erhält man den Erwartungswert

$$\text{tr}(U_t \rho U_t^* A) = \text{tr}(\rho U_t^* A U_t) . \quad (1.35)$$

Diese Gleichung folgt einfach aus der Eigenschaft  $\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$  der Spur. Sie ist hier aufgenommen, weil die beiden Seiten unterschiedlichen, aber offensichtlich äquivalenten Auffassungen der Zeitentwicklung entsprechen: Auf der linken Seite liegt es nahe,  $\rho_t = U_t \rho U_t^*$  als zeitabhängige Dichtematrix einzuführen und die Observablen als zeitunabhängig zu betrachten. Dies nennt sich das **Schrödingerbild**. Für reine Zustände ergibt sich dann auch für Wellenfunktionen:  $\Psi_t = U_t \Psi_0$ . Die rechte Seite legt die Einführung zeitabhängiger Observablen  $A_t = U_t^* A U_t$ , bei festgehaltenen Zuständen nahe. Dies nennt sich das **Heisenbergbild**. Die mathematisch ohnehin evidente Äquivalenz dieser Bilder bedeutet physikalisch, dass nur die relative Zeit zwischen den Teilen des Experiments wichtig ist (Abb. 1.7).

Eine bedeutende Lücke bleibt in diesen Postulaten: Nirgends ist gesagt, *welche* Operatoren  $\rho$  oder  $F$  man einem gegebenem Experiment zuordnen soll. Dies ist eine Frage, die man tatsächlich nicht durch ein paar allgemeine Postulate klären kann. Der häufigste Zugang ist, ein paar "Standardobservablen" auszuzeichnen, in der Regel durch ihr Transformationsverhalten unter raumzeitlichen Symmetrien [??]. Dies sind dann Größen mit engem Bezug zu klassischen Größen und sie heißen auch so: Ort, Impuls, Energie, Drehimpuls und so weiter, wie in der Korrespondenztabelle in Abschnitt 1.6.



**Abb. 1.7:** Zwei mal des gleiche Experiment mit Präparation  $\rho$  und Detektor  $F$ , der erst nach einer Wartezeit  $t$  getriggert wird. Man kann das Warten äquivalent als Modifikation des Zustands (links: Schrödingerbild) oder des Effekts (rechts: Heisenbergbild) betrachten.

Wer eine genauere Zuordnung von Messgeräte und Operatoren wünscht, muss auch den konkreten Messprozess genauer analysieren, besonders die quantenmechanische Wechselwirkung zwischen dem gegebenen System und Teilen des Apparates, wie zum Beispiel ionisierbaren Testteilchen im Apparat. Für fast alle Fragen in dieser Vorlesung werden wir aber mit der Untersuchung der Standardobservablen auskommen.

Genauso offen bleibt die Wahl des Hamiltonoperators  $H$ . Hier ist das übliche Verfahren, klassische Hamiltonfunktionen zu **quantisieren**, also nach den oben tabellierten Korrespondenzregeln zu übertragen. Das ist nicht eindeutig, funktioniert aber bei den Lehrbuchbeispielen (Elektronen und Protonen mit Coulombwechselwirkung, vielleicht noch mit ein paar äußeren Potentialen) so gut, dass es sich in vielen Köpfen festgesetzt hat, dieser Prozess müsse irgendwie zwingend sein. Selbst die Quantentheorie der Elementarteilchen wird über klassische Feldtheorien herbeiquantisiert, was zu ziemlich schlecht definierten, von Unendlichkeiten geplagten Theorien führt. Dennoch sind es diese fundamentalen Theorien, aus denen man sich letzten Endes die Herleitung des Hamiltonoperators für Wasserstoffatome erhoffen würde. Die “üblichen Ansätze” aus ersten Prinzipien zu rechtfertigen führt so geradewegs in die weißen Flecken im Atlas der Wissenschaft. Wie bei den Ketten von Warum-Fragen, die kleine Kinder gern bilden, muss man die Begründungsversuche oft bald abbrechen und darauf verweisen, dass dieser oder jener Ansatz eben Bestandteil der Theoretischen Physik ist, sich “gut bewährt” hat und eben auch in jedes Lehrbuch gehört.

## 1.8 \*Keine Postulate

Hier folgt eine kleine Sammlung von Aussagen, die zwar häufig zu den Postulaten der Quantenmechanik gezählt werden, die ich aber für überflüssig und irreführend halte. Offenbar ist dieser Abschnitt beim ersten Lesen zu überspringen, denn warum sollte man sich Ballast erst aufladen, nur um ihn gleich wieder abzuwerfen? Er ist aber leider nötig, um den Zusammenhang zur sonstigen Lehrbuchliteratur herzustellen. Natürlich ist die Auswahl von Postulaten auch eine Geschmacksache. Ich folge hier dem Prinzip: So wenig wie möglich. Das heißt, nur das wird zum Postulat gemacht, was von der Interpretation her gebraucht wird. Dass man zu viel gefordert hat, merkt man dann, wenn man auf natürliche Weise auf ein Ergebnis kommt, dass einerseits völlig gradlinig

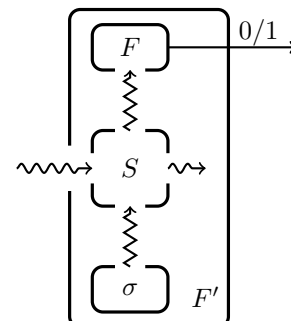
im Rahmen der Quantenmechanik interpretiert werden kann, andererseits aber einem “Postulat” nicht genügt. Das führt dann zu überflüssigen Argumentationsschleifen, die nur der Wiederherstellung des “Postulats” dienen. In Lehrbüchern merkt man dies daran, dass zum Beispiel das Projektionspostulat großartig eingeführt, aber später kaum verwendet wird. In diesem Sinne also die folgende Entrümpelung.

### 1.8.1 Projektionswertigkeit

Wie erwähnt, wird oft der Begriff der Observablen mit dem eines hermiteschen (“selbst-adjungierten”) Operators identifiziert. Darin sind zwei Verkürzungen enthalten. Die erste ist, dass die Ergebnisse eines Experiment stets reelle Zahlen zu sein haben. Einer der dämlichsten Sprüche zu diesem Thema ist, diese Aussage sogar umgekehrt als Begründung dafür heranzuziehen, dass Observable ausgerechnet *hermitesche* Operatoren sein sollen. “Reell” klingt halt irgendwie reell oder real. Tatsächlich spricht nichts gegen beliebige Ausgangsmengen wie “{sicher A, sicher B, weiß nicht}”. Eine der häufigst verwendeten Observablen, die Ortsobservable, liefert als Ergebnis den Ort des Teilchens, also einen Punkt im Raum oder einen Vektor. Es spricht auch nichts gegen komplexe Messwerte, etwa eine Phase, die natürlicherweise auf dem Einheitskreis in  $\mathbb{C}$  liegt. Das Einzige, was hier wirklich zählt, ist die Gültigkeit des Spektralsatzes, der also aus dem Erwartungswert-Operator  $A$  (oder einem Tupel solcher Operatoren, wie beim Ort) die Projektoren  $F(S)$  rekonstruierbar macht. Denn letzten Endes sind wir nicht nur an Erwartungswerten, sondern an der gesamten Ergebnis-Statistik interessiert. Der Spektralsatz hängt aber nicht an der Hermitizität, sondern gilt für eine beliebige Menge vertauschbarer normaler Operatoren [2.2.4].

Die zweite, bedeutendere Verkürzung liegt in der Projektionswertigkeit, also  $F(S)^2 = F(S)$  für jede Menge  $S$  von Ergebnissen. Im Gegensatz zu dieser speziellen Klasse spricht man bei dem nach Postulat 4 eingeführte Begriff, der auf positiv-operatorwertigen Maßen<sup>2</sup> beruht, von “verallgemeinerten” Observablen. Es ist offensichtlich, dass dieser allgemeinere Begriff für die statistische Interpretation der Theorie ausreicht. Deshalb wurde er auch im axiomatischen Aufbau von Ludwig, der sich ausschließlich auf die statistische Interpretation stützt, als der natürliche Begriff eingeführt. Für etwa 20 Jahre musste man für diesen Begriff Überzeugungsarbeit leisten (Ausnahmen: [Hol82, Dav76]). Im jungen Gebiet der Quanteninformationstheorie (ab Anfang der 90er Jahre) wurde er aber von Anfang an als natürlich akzeptiert. Zu häufig kam es vor, dass die optimale Lösung eines Entscheidungsproblems auf eine solche Observable führte. Was sollte dann der Hinweis, diese optimale Lösung sei aber irgendwie nicht zulässig? Wir werden später [12] Beispiele kennenlernen, in denen eine gesuchte kovariante Observable projektionswertig nicht existiert, wohl aber in der allgemeinen Klasse. Beispiele sind Ankunftszeit-Observable, approximative gemeinsame Messun-

<sup>2</sup>Engl.: Jargon POVMs



gen von Ort und Impuls, der Orientierung eines Spins, oder des Ortes masseloser relativistischer Teilchen. Am Grundlegendsten ist aber wohl der Einwand, dass die Klasse der projektionswertigen Observablen nicht abgeschlossen gegenüber **indirekter Messung** ist. Darunter versteht man eine Messung, bei der das Objektsystem zuerst mit einem geeignet präparierten Testsystem in Wechselwirkung gebracht wird, an dem dann seinerseits eine Messung durchgeführt wird (siehe Abb. 1.8). Fast alle konkreten Messungen sind von dieser Art. Aber auch wenn ich die am Testsystem gemessene Observable als projektionswertig ansetzte, ist es die effektiv am Objekt gemessene nur in seltenen Spezialfällen. Mit anderen Worten, eine Theorie des Messprozesses wird durch den verengten Observablenbegriff unnötig erschwert.

Der übliche Ausweg ist hier, die projektionswertigen Messungen “ideal” zu nennen, also das Ergebnis der genaueren Analyse tatsächlicher Messvorgänge für minderwertig zu erklären. Dies ist ein typisches Beispiel dafür, wie zu eng gezogene Postulate zur selbst verschuldeten Beschränktheit führen. Wer also hat’s verbockt? In diesem Fall gilt, dass große Männer auch lange Schatten werfen: Es war Johann von Neumann, der den Spektralsatz für allgemeine selbstadjungierte Operatoren erst gezeigt hat und daher in solchen Operatoren, samt ihrem Funktionalkalkül [2.2.4] das Analogon zu den Variablen klassischer Theorien sah. Nach dem Funktionalkalkül sind dann die Entsprechung der Aussagen die 0/1-wertigen Funktionen, also die Projektoren. Deren Verknüpfungen (bzw. die Verknüpfungen der entsprechenden abgeschlossenen Unterräume) sah er daher als verallgemeinerte Version klassischen Logik: Der Durchschnitt von Unterräumen war dann so etwas wie die UND-Operation und das Orthogonalkomplement mit Projektor  $\mathbb{1} - P$  so etwas wie die Negation. Das Distributivgesetz musste dann abgeschwächt werden, aber das war dann eben die spezifisch quantenmechanische Erweiterung. Die **Quantenlogik** als eine aus diesen Ideen entwickelte Disziplin hat sich allerdings zu einem großen Flop entwickelt und zum Verständnis der Quantenmechanik letzten Endes wenig beigetragen. Man hätte ja beispielsweise erwarten können, dass sie bei der Analyse von Quanten-Algorithmen eine ähnliche Rolle spielen könnte wie die Boolesche Aussagenlogik für klassische Computer. Aber nichts davon hat sich realisiert.

Wenn man die Projektionswertigkeit aufgibt, müssen einige Standard-Aussagen der Lehrbuchliteratur vorsichtiger formuliert werden. Wenn  $A = \sum_x x F_x$  projektionswertig ist, dann sind die möglichen Messwerte  $x$  und die zugehörigen Projektoren  $F_x$  durch den Operator  $A$  eindeutig bestimmt: Die Messwerte sind die Eigenwerte und die  $F_x$  die Projektoren auf die zugehörigen Eigenräume. Wenn ich nach der Messung jeden Wert  $x$  mit einer Funktion  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  weiterverarbeite, bleiben die  $F_x$  gleich, aber die Messwerte der neuen Observablen werden die  $f(x)$ . Deren Erwartungswertoperator wird damit  $\sum_x f(x) F_x = f(A)$  im so genannten Funktionalkalkül [2.2.4]. Speziell

führt also Quadrieren der Messwerte zum Operator-Quadrat  $A^2 = AA$ . Das braucht man zur Berechnung von Varianzen. Im allgemeinen Rahmen ist die Observable mit nachverarbeiteten Messwerten genauso leicht zu bestimmen: Die  $F_x$  bleiben, die Werte werden umgerechnet. Nur folgt eben nicht alles schon aus dem Erwartungswertoperator  $A$ .

## 1.8.2 Projektionspostulat

Über die Projektionswertigkeit hinaus gibt es eine weitere verbreitete Idee, die besagt, dass sich unmittelbar nach der Messung der Observablen  $A$  das System in einem Eigenzustand von  $A$  befinden müsse, nämlich in dem Eigenzustand, der zum entsprechenden Messwert gehört. Dies nennt man das Projektionspostulat und es wird oft zu den Grundpostulaten der Quantenmechanik gerechnet.

Das erste Problem damit ist, dass ja auch entartete Eigenwerte vorkommen, der Eigenzustand also gar nicht eindeutig definiert ist. Dies wurde von Lüders gelöst, der bei Messung einer Observablen  $A = \sum_x x F_x$  mit möglicherweise mehrdimensionalen Projektoren forderte, dass der Zustand nach der Messung mit Ergebnis  $x$  durch den Dichteoperator  $F_x \rho F_x / \text{tr}(\rho F_x)$  gegeben sein sollte. Auch diese Forderung wird oft zum Begriff der idealen Messung gerechnet. Wir haben hier nicht zufällig einen Operator  $A$  mit diskretem Spektrum gewählt. Für  $A$  mit kontinuierlichem Spektrum, also zum Beispiel Ort oder Impuls, gibt es keine Eigenzustände und also auch keine Lüders-Messung. Mit diesen Observablen ist also laut Projektionspostulat etwas faul, aber eher zeigt diese "Schwierigkeit", dass mit dem Projektionspostulat etwas faul ist.

Verbockt hat es wieder von Neumann, unterstützt von Pauli, der eine "ideale Messung erster Art" dadurch definierte, dass eine "sofortige Wiederholung" der Messung zum gleichen Ergebnis führen müsse. Offenbar garantiert das Projektionspostulat diese Eigenschaft. Die Forderung klingt erst mal vernünftig, denn physikalische Messungen sollen ja "reproduzierbar" sein. Mit dieser vernünftigen Forderung hat aber die Wiederholbarkeit rein gar nichts zu tun. Einen Hinweis gibt die Tatsache, dass man sich in aller Regel überhaupt nicht für den Zustand des Systems nach der Messung interessiert. Kleine Teilchen wie Photonen oder auch Elementarteilchen im Beschleuniger sind nach der Detektion in der Regel nicht mehr auffindbar. Das tut der Reproduzierbarkeit der Messung auch gar keinen Abbruch — dafür reicht es, dass ich bei gleicher Präparation und gleicher Messung reproduzierbare Häufigkeiten finde. Davon sind wir auch die ganze Zeit ausgegangen. Wiederholung am gleichen System ist selbst an klassischen Systemen meist nicht das Kriterium für verlässliches Messen. Bei einer Bruchfestigkeitsmessung geht eben auch was zu Bruch.

Die "sofortige" Wiederholung zeugt auch von einer reichlich naiven Sicht vom Zeitablauf von Messungen. Ein Messprozess ist eben nicht instantan und alle beteiligten Systeme unterliegen weiter einer Zeitentwicklung. Wann genau also soll ich was wiederholen? Irrig ist auch die Vorstellung, dass eine wiederholbare Messung das Sys-

tem minimal stört. Dafür sagt man auch “non-demolition measurement”. Eine Lüders-Projektion ist ein ziemlich brutaler Eingriff, der die Erwartungswerte aller anderen Observablen massiv verändert. Wir werden dies später (...) genauer studieren und sehen, dass jede Messung, die nicht-triviale Information über den Input liefert das System stören muss. Dies gilt auch in dem quantitativen Sinn, dass bei kleiner Störung auch nur wenig zu erfahren ist. Solche Messungen mit kleiner Störung spielen eine wichtige Rolle, wenn es um fortlaufende Messungen geht. Wenn ich nicht lange beobachte, lerne ich wenig, störe das System aber auch kaum. Wer an das Problem kontinuierlicher Messungen mit der Brille des Projektionspostulats herangeht, wird an häufig wiederholte Lüders-Messungen denken. Bei diesen friert aber die Zeitentwicklung in einem Eigenraum der gemessenen Observablen ein. Dies nennt man auch das Quanten-Zeno-Paradoxon, oder den Wachhund-Effekt. Auf Englisch auch “A watched pot never boils”. Sobald man für diesen Fall aber das Projektionspostulat aufgegeben hat, gelingt die Beschreibung fortlaufender Messungen mühelos [3].

Wie bei der Projektionswertigkeit von Observablen geht es nicht darum, Lüders-Messungen grundsätzlich auszuschließen. Es mag ja ganz nett sein, wenn man sie hat. Nur ist es eben kontraproduktiv, sie zur Norm zu erklären.

### 1.8.3 Sonderrolle für reine Zustände

Viele Lehrbücher behandeln Dichtematrizen als exotische Spezialität, die man eigentlich erst in der statistischen Mechanik braucht. Unterschieden wird auch gern zwischen einerseits der grundlegenden Quanten-Zufälligkeit, die schon in einer einzelnen Wellenfunktion steckt und andererseits einer zusätzlichen Zufälligkeit, die daraus resultiert, dass ich eben die Wellenfunktion nicht genau kenne. Dies wird dann zum Anlass genommen, Dichteoperatoren gar nicht erst einzuführen, denn wir können ja erst mal annehmen, dass der Experimentator sein System optimal, also in einem reinen Zustand präpariert. In den Postulaten der Quantenmechanik ist dann erst mal nur von reinen Zuständen die Rede. Der Unterschied zwischen reinen und gemischten Zuständen hat aber nichts mit der möglichen Schlampigkeit des Experimentators zu tun. Reine Zustände eines zusammengesetzten Systems sind, eingeschränkt auf ein Teilsystem, ebenfalls gemischt. Genauer: Die Einschränkung ist umso gemischter, je verschränkter der Zustand des zusammengesetzten Systems war. Auch hier: Eine Reinheits-Annahme hat in den Postulaten der Quantenmechanik nichts zu suchen.

Natürlich sind die reinen Zustände ein wichtiger Spezialfall. Auch in diesem Buch wird oft Reinheit angenommen, schon weil oft aus der Analyse der reinen Zustände entsprechende Aussagen für gemischte folgen. In Fragen der statistischen Interpretation jedoch gibt es keinen Unterschied. Genauer wird die Einzelzustands-Interpretation in Kapitel 11 diskutiert.

## Anmerkungen zum Kapitel 1

### Zu Abschnitt 1.1 (Geschichte)

Sich ein wenig mit der Geschichte der Quantenmechanik zu befassen, ist sehr hilfreich, auch wenn man nur die “fertige” Quantenmechanik lernen möchte. Physik wird nun mal von Menschen gemacht und wenn man sieht, was die Pioniere umtrieb, lernt man manche ihrer Durchbrüche mehr zu schätzen. Zum Teil besteht die Geschichte auch aus Geschichten, die man sich ohne große geistige Anstrengung als Feierabendlektüre vornehmen kann. Ein guter Anfang ist Heisenberg [Hei73] und der Briefwechsel zwischen Born und Einstein [BE69]. Wenn man nebenbei die Theorie selber erlernt, ist es natürlich interessant auch die Entwicklung der Ideen und ihrer mathematischen Ausformulierung nachzulesen. Die Originalarbeiten von Schrödinger [Sch26], Heisenberg [Bor62] und Born [BHJ62] sind durchaus lesbar. Eine zusammenfassende Darstellung, in der die Ideen auch aus der Rückschau verständlicher werden ist zum Beispiel [Wu86].

### Zu Abschnitt 1.3 und 1.4 (Polarisationsexperimente)

Dieser Zugang findet sich inzwischen in verschiedenen Büchern, zum Beispiel [Bay71] oder dem Artikel [KM]. Die Stokes-Parameter werden natürlich auch in der traditionellen Optik behandelt, z.B. in [BW59].

### Zu Abschnitt 1.7 (Postulate)

Meine Betonung der statistischen Interpretation und die Beschränkung auf möglichst wenige, operational bedeutsame Postulate geht auf meine Ausbildung in Marburg [Lud78] zurück.

### Zu Abschnitt 1.8 (Keine Postulate)

Diese Auswahl ist natürlich sehr subjektiv gefärbt und wird bei vielen Kollegen auf Widerspruch stoßen. Auch die abwertenden Bemerkungen über Quantenlogik und die Theorie des idealen Messprozesses sind Geschmacksache. Jedenfalls gibt es aus beiden Arbeitsgebieten auch gute Bücher (z.B. [BLM91]).

## Aufgaben zum Kapitel 1

**Aufgabe 1.1:** Berechnen Sie für die Segmente in Abb. 1.2 die Durchlasswahrscheinlichkeiten, indem Sie die entsprechenden Matrizen  $V$  aus Abschnitt 1.3 multiplizieren und Beleuchtung mit unpolarisiertem Licht ( $\rho = (1/2)\mathbb{1}$ ) annehmen.

**Aufgabe 1.2:** Berechnen Sie zu einem durch die Matrix  $V$  beschriebenen Polarisationsfilter den Filter  $V'$  für einen Stahl in Gegenrichtung oder äquivalent, für den Filter den Sie durch Drehen des Filters um  $180^\circ$  um die  $x_1$ -Achse erhalten. Sie dürfen verwenden, dass die Abbildung  $V \mapsto V'$  linear ist. Überlegen Sie, was bei Drehungen um die Strahlachse passiert, und dass  $(V_1 V_2)' = V_2' V_1'$  gelten muss. [H]

**Aufgabe 1.3:** Beim RealD 3D-Verfahren zur Projektion von 3D-Filmen erhält man eine Brille mit zwei verschiedenen Polarisationsfiltern. Experimentieren Sie mit zwei solchen Brillen und stellen Sie die zugehörigen  $2 \times 2$ -Matrizen auf. Erklären Sie, was

Sie sehen, wenn Sie sich mit einer solchen Brille vor den Spiegel stellen und ein Auge zukneifen.

**Aufgabe 1.4:** Zeigen Sie, dass die Regel, klassische Variable  $p, q$  durch Operatoren  $P, Q$  zu ersetzen, schon für Polynome beliebig vieldeutig ist. Sei also ein klassisches Polynom  $f(q, p)$  und ein nicht-kommutatives Polynom  $g(Q, P)$  beliebig gegeben. Dabei bedeutet “nicht-kommutatives Polynom” einfach eine Kombinationen aus Summen und Produkten der Variablen, bei denen verschiedene Reihenfolge der Faktoren als verschieden gelten. Finden Sie nun ein nicht-kommutatives Polynom  $h$  von zwei Variablen, sodass einerseits  $h(q, p) = f(q, p)$ , also  $h$  eine zulässige nichtkommutative Version von  $f$  ist und andererseits  $h(Q, P) = g(Q, P)$ . Für diese Gleichungen dürfen natürlich die jeweiligen Vertauschungsrelationen benutzt werden.

Beim Ausfüllen der Korrespondenztabelle haben wir also gewissermaßen mit der eigenen Phantasielosigkeit argumentiert. Etwas feiner ausgedrückt sind es zusätzliche Kriterien der “Einfachheit”, die aber im Allgemeinen schwer zu formalisieren sind. [H]



# Kapitel 2

## Technisches Vorspiel

### 2.1 Wahrscheinlichkeit

Wenn die mit dem Experiment vergleichbaren Ergebnisse der Quantenmechanik Wahrscheinlichkeiten sind, ist es nützlich, ein paar Fakten über Wahrscheinlichkeitsverteilungen zusammenzustellen. Hoffentlich hilfreich ist auch der Vergleich mit den Postulaten aus dem letzten Abschnitt: Die klassische Wahrscheinlichkeitstheorie ist eben auch eine statistische Theorie und wo immer sie in der Physik angewendet wird, können wir Präparation, Messung und Wahrscheinlichkeitsauswertung genauso wie in der Quantenmechanik wiederfinden. Nebenbei werden wir dabei auch ein paar Vokabeln aus der Maß- und Integrationstheorie kennenlernen, die uns das Umgehen mit Hilberträumen etwas erleichtern. Insbesondere bekommen wir eine Sprache, in der Summen und Integrale zwei Aspekte der gleichen Sache sind.

#### 2.1.1 Was ist Wahrscheinlichkeit?

Wenn einer sagt “Die Wahrscheinlichkeit des Ereignisses  $x$  ist 0,7”, was ist damit eigentlich behauptet? Es kann natürlich einfach die Lösung einer Rechenaufgabe im Rahmen der mathematischen Wahrscheinlichkeitstheorie sein, wie wir sie im Rest dieses Abschnitts anschauen. Das ist aber hier nicht gemeint. Auch nicht als Antwort in Frage kommt daher der so genannte Laplacesche Wahrscheinlichkeitsbegriff, auf dem meist die Unterrichtseinheiten “Stochastik” in der gymnasialen Oberstufe basieren. Danach wäre 0,7 das Verhältnis der günstigen Fälle zur Zahl der möglichen Fälle: eine rein kombinatorische Aufgabe, die von vornherein unterstellt, alle elementaren “Fälle” seien gleich wahrscheinlich. Das ist bei Spielkarten-Anordnungen und regelmäßigen Würfeln plausibel, versagt aber schon bei unregelmäßigen Würfelkörpern. Mit anderen Worten: dieser Begriff taugt ein bisschen zum Üben, aber auf keinen Fall als Grundbegriff für die Physik.

Wir haben im ersten Kapitel Wahrscheinlichkeiten schon mit den relativen Häufigkeiten  $N_+/N$  einer Serie von  $N$  ja/nein Experimenten mit  $N_+$  ja-Ergebnissen zusammengebracht. Grob gesprochen wäre also die Aussage  $p = 0,7$  zu übersetzen mit “ $N_+/N \approx 0,7$  für genügend großes  $N$ ”. Dies nennt man die **Häufigkeitsinterpretation** der Wahrscheinlichkeit und ist erstmalig im Detail durch Richard von Mises [vM28] ausgearbeitet worden. Die Wahrscheinlichkeitstheorie als physikalische Theorie ist eine Theorie der **Zufallsexperimente**. Dies sind Experimente, die bei jeder Durchführung ein anderes Ergebnis liefern können, wobei sich aber die relativen Häufigkeiten der Ergebnisse stabilisieren. Wiederholbarkeit ist also eine Grundvoraussetzung und man sieht ein solches Experiment am besten dadurch definiert, was als “Wiederholung des Gleichen” gelten soll. Das ist nicht unbedingt das Experiment am gleichen Objekt: Würfel können sich abnutzen, sodass es eher um die Spezifikationen geht, nach denen die Würfel hergestellt werden sollen. Zu den Grundannahmen (Axiomen) gehört nicht nur, dass die relativen Häufigkeiten konvergieren, denn das täten sie auch in der offenbar nicht zufälligen Folge  $0, 1, 0, 1, 0, \dots$ . Von Mises fordert zusätzlich, dass die Häufigkeiten selbst dann noch gegen den gleichen Wert konvergieren, wenn man nach irgend einer Regel auf Grund der bisherigen Ergebnisse entscheiden darf, ob man das nächste Element zur Folge rechnen möchte oder nicht. Mit anderen Worten: wenn ich durch ein Wettsystem die Häufigkeit verändern kann, ist die Folge nicht zufällig. Ob ein gegebenes Experiment tatsächlich diese Axiome erfüllt ist, wie auch sonst in der Physik, nicht abschließend zu überprüfen. Natürlich kann man sich gegen offensichtliche Verletzungen der Axiome durch statistische Tests absichern, aber das kann man nicht beliebig weit treiben. In vielen Anwendungen sind die Axiome auch tatsächlich nicht streng erfüllt, z.B. schon weil eine beliebige Wiederholbarkeit nicht gegeben ist. Zum Beispiel ist es durchaus sinnvoll, von der Wahrscheinlichkeit gewisser Eigenschaften der Sterne zu reden, auch wenn der Sternenkatalog endlich ist und nicht beliebig erweitert werden kann. Auch verwendet man Rechner-generierte Pseudozufallszahlen, die streng genommen das genaue Gegenteil eines von Mises-Kollektivs sind, es aber eventuell doch gut simulieren. In solchen Fällen ist die Wahrscheinlichkeitstheorie eine Idealisierung der tatsächlichen Situation, die mehr oder weniger adäquate Modelle liefert. Dies ist ganz analog zu anderen physikalischen Theorie-Anwendungen (etwa die Theorie des Freien Falls unter Vernachlässigung der Reibung). Für die Quantenmechanik braucht man solche Einschränkungen nicht zu machen: Es gibt keine Hinweise auf eine Verletzung der Zufälligkeit quantenmechanischer Experimente. Noch stärker: Es gibt Anordnungen, in denen man (unter einer Kausalitätsannahme) aus verschränkten Quantenzuständen physikalisch zertifizierte Zufallszahlen erzeugen kann.

Sobald man im Geltungsbereich der Axiome der Wahrscheinlichkeitstheorie ist, sagt die Theorie dann auch, wie man Wahrscheinlichkeiten zu messen und die Ergebnisse in Abhängigkeit von der Stichprobengröße  $N$  mit Fehlerbalken zu versehen hat. Darauf kommen wir noch in Abschnitt 2.1.4 zurück.

---

✱

Dass der Begriff “Wahrscheinlichkeit” einfach als Limes definiert sei, ist ein Missverständnis. Das wäre eine dämliche Definition, denn es könnte sich ja nach unendlich langer Zeit ärgerlicherweise auch herausstellen, dass der Limes gar nicht existiert. Man

braucht also den Kontext der Axiome, um sinnvoll mit Wahrscheinlichkeiten umgehen zu können: Wahrscheinlichkeit ist ein “theoretischer Term”, wie fast alle interessanten Größen der Physik auch. Dennoch hat die angebliche Unerreichbarkeit der Wahrscheinlichkeit zu dem Versuch geführt, Wahrscheinlichkeit als subjektive Einschätzung zu definieren. Danach wäre also “Peter meint  $p \geq 0,7$ ” zu übersetzen mit “Peter ist bereit eine Wette einzugehen, bei der er  $\leq 0,7\$$  einsetzt und im *ja*-Fall 1\$ Gewinn ausgezahlt bekommt”. Hauptbegründer dieser **subjektiven Wahrscheinlichkeitsinterpretation** ist Bruno de Finetti [?].

Die meisten Physiker finden die Einführung des Subjekts “Peter” in die Physik abstoßend, während (für mich persönlich merkwürdig) viele Wissenschaftstheoretiker der subjektivistischen Auffassung zuneigen. Wegen der grundsätzlichen Bedeutung der Wahrscheinlichkeit für die Quantenmechanik schlägt eine veränderte Auffassung an dieser Stelle auch direkt auf die Interpretation der Quantenmechanik durch. Zum Beispiel verändert sich dadurch, was eigentlich damit ausgesagt ist, wenn ich einen quantenmechanischen Zustand  $\rho$  angebe: Im einen Fall eine Aussage über mögliche statistische Experimente, im anderen eine Absichtensammlung für Wetten darüber. Es gibt durchaus Physiker, die Quantenmechanik unter dieser Perspektive betreiben [FMS14]. Wir werden aber gleich sehen: Der Unterschied ist kleiner, als er auf den ersten Blick erscheint.

Zunächst muss man sehen, dass die Frage der Anwendbarkeit der Wahrscheinlichkeitstheorie immer ein subjektives Element enthält, da sie sich durch keine endliche Beobachtung beweisen lässt. Andererseits: Auch wenn der subjektive Begriff oberflächlich einfacher oder voraussetzungsärmer erscheinen mag, verflüchtigt sich dies schnell bei der weiteren Entwicklung der Theorie. Zunächst geht es bald nicht mehr um Peter und seine persönliche Wettbereitschaft. Menschen gehen eben auch irrationale Wetten ein (z.B. Lotto), bei denen sie im Mittel verlieren. Schon um die Additivität von Wahrscheinlichkeiten zu zeigen, muss man aber ein “rationales Subjekt” unterstellen, das eben nicht verlieren möchte. Diese Rationalitätsregeln gehen so weit, dass man schließlich bei Wetten auf eine Zufallsquelle, die man lange beobachtet hat, nach der sogenannten Bayesschen Regel eben doch auf den beobachteten Mittelwert setzen sollte. Das abstrakte “rationale Subjekt”, von dessen Wetten die Theorie letzten Endes handelt, folgt also bei gut beobachtbaren Quellen eh der Häufigkeitsregel. Einen echten Unterschied zwischen den Wahrscheinlichkeitsinterpretationen gibt es also nur bei Quellen, für die weder die Häufigkeitsdaten durch Beobachtung zu bekommen sind, noch Wahrscheinlichkeiten durch Modellierung aus überprüfbaren Häufigkeiten erschließbar sind. In solchen Fällen (und wenn brauchbare Daten einfach nicht vorliegen) geht die subjektive Interpretation davon aus, dass der rationale Peter dennoch eine Wahrscheinlichkeitsbewertung vornimmt (“a priori Wahrscheinlichkeit”), also irgendwie herumspekuliert. Mit Physik hat das wenig zu tun und wir folgen daher im Folgenden der Häufigkeitsinterpretation.

Zu erwähnen wäre noch, dass ein denkbarer Gegenpol zur “subjektiven” Interpretation eine “objektive” sein könnte. An der Häufigkeitsinterpretation ist der objektive

Zug die Betonung, dass Wahrscheinlichkeiten eine physikalische Konsequenz des Versuchsaufbaus sind und keine Geschmacksache. Man könnte aber noch weiter gehen und die Wahrscheinlichkeiten direkt den Objekten (z.B. einem Würfel) als Eigenschaften zuordnen. Das ergibt ein Problem, weil ein und dasselbe Objekt als Einzelfall verschiedener statistischer Experimente betrachtet werden kann. Dazu reicht es schon nach einem korrelierten Merkmal zu selektieren, also zum Beispiel die Wahrscheinlichkeit für ein Pokerblatt unter der Voraussetzung zu betrachten, dass der Gegner vier Asse hat. Das verändert die Wahrscheinlichkeit zu einer bedingten Wahrscheinlichkeit und eigentlich ist jede Wahrscheinlichkeit bedingt auf die Anordnung, die Fragestellung oder, in der oben verwendeten Formulierung, auf die Wiederholungsbedingungen. Dieses subjektive Element wird man nicht los.

— \*

### 2.1.2 Stichprobenräume, Maße, Momente

Wir wenden uns jetzt dem mathematischen Teil der Wahrscheinlichkeitstheorie zu, der von Kolmogoroff [?] axiomatisiert wurde. In der Wahrscheinlichkeitstheorie wird jedem System eine Menge  $X$  zugeordnet, die man **Elementarereignisraum** oder **Stichprobenraum** nennt. (Vergl. die Form unseres Postulats 1).

Nehmen wir den einfachsten Fall, in dem  $X$  eine endliche Menge ist, beispielsweise die Menge  $X = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ , der möglichen Augenzahlen eines Würfels. Eine **Präparation** wird durch die Angabe einer Wahrscheinlichkeit  $p(x)$  für jedes  $x \in X$  charakterisiert. Für einen fairen Würfel ist  $p(x) = 1/6$  für alle  $x$ , aber es gibt bekanntlich auch andere. Die einzigen Einschränkungen an die  $p(x)$  sind

$$p(x) \geq 0, \quad \text{und} \quad \sum_{x \in X} p(x) = 1. \quad (2.1)$$

Eine **Messung** (Observable) wird beschrieben durch eine Funktion  $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ , im Fall des Würfels beispielsweise die Augenzahl  $f(x) = x$ . Im Jargon der Wahrscheinlichkeitstheorie sind dies **Zufallsvariable**. Der Wert  $f(x)$  wird als derjenige Messwert interpretiert, der sich ergibt, wenn man sicher weiß, dass das Elementarereignis  $x$  vorliegt. Wenn dieses Ereignis bei sehr vielen (z.B.  $N$ ) Messungen circa  $N \cdot p(x)$  mal vorliegt (so ist ja  $p(x)$  zu interpretieren), dann ergibt sich als Summe der Messwerte  $\sum_x Np(x) \cdot f(x)$ . Dividiert durch  $N$  bekommen wir die Formel

$$\text{Erwartungswert} = \mathbb{E}(f) = \sum_{x \in X} p(x)f(x). \quad (2.2)$$

Ein Spezialfall sind Zufallsvariable  $f$ , die nur die Ergebnisse 0 oder 1 ergeben können. Diese sind eineindeutig charakterisiert durch die Menge  $S = \{x \in X \mid f(x) = 1\}$ , nämlich als

$$f(x) = \chi_S(x) = \begin{cases} 1 & x \in S \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.3)$$

Solche Funktionen nennt man **Indikatorfunktionen**<sup>1</sup>. Die Teilmengen  $S \subset X$  nennt man auch Ereignisse (nicht mehr “*Elementarereignisse*”). Der Erwartungswert

$$\mathbb{P}(S) = \mathbb{E}(\chi_S) = \sum_x p(x) \chi_S(x) = \sum_{x \in S} p(x) \quad (2.4)$$

ist die Wahrscheinlichkeit des Ereignisses  $S$ . Die Funktion  $\mathbb{P}$  hat charakteristische Eigenschaften, die sich sofort aus der Definition ergeben: So ist  $\mathbb{P}(\bigcup_i S_i) = \sum_i \mathbb{P}(S_i)$ , wenn die  $S_i \subset X$  disjunkte Teilmengen sind. Mathematisch gesprochen:  $\mathbb{P}$  ist ein **Maß**, bzw. ein “Wahrscheinlichkeitsmaß”, wenn man die Normierung  $\mathbb{P}(X) = 1$  betonen will. Wenn man die “Mengenfunktion”  $\mathbb{P}$  kennt, kann man auch das Erwartungswertfunktional  $\mathbb{E}$  ausrechnen. Wir schreiben dies als

$$\mathbb{E}(f) = \int \mathbb{P}(dx) f(x) . \quad (2.5)$$

Gleichung (2.4) sagt uns sofort, wie das Integral für “Stufenfunktionen”, d.h. auf endlichen Linearkombinationen von Indikatorfunktionen (2.3) auszuwerten ist. Da bei endlichem  $X$  alle Funktionen solche Stufenfunktionen sind, ist damit das Integral schon definiert und ergibt wieder die Summe (2.2). Die Mengenfunktion  $\mathbb{P}$  und das lineare Funktional  $\mathbb{E}$  sind offenbar zwei Arten, das Gleiche auszudrücken, nämlich die Präparation. So gesehen ist es kaum zu rechtfertigen, dafür verschiedene, nicht erkennbar verknüpfte Notationen zu verwenden. Um den Zusammenhang zu betonen, schreiben wir für jedes Maß  $\mathbb{P}$  das zugehörige Funktional  $\mathbb{E}$  einfach als “ $\mathbb{P}$  mit eckigen Klammern”, also

$$\mathbb{P}[f] = \int \mathbb{P}(dx) f(x) \text{ und } \mathbb{P}(S) = \mathbb{P}[\chi_S] . \quad (2.6)$$

Der Grund dafür, diese Größen als grundlegend zu nehmen und nicht die Wahrscheinlichkeiten  $p_x = \mathbb{P}(\{x\})$  der Punkte ist, dass sie auch für den nun zu diskutierenden Fall kontinuierlicher Mengen sinnvoll bleiben.

Für unendliche Mengen  $X$  ist oft  $\mathbb{P}(\{x\}) = 0$ . Der Prototyp eines Maßes mit dieser Eigenschaft ist das **Lebesguemaß**  $\lambda$  auf  $[0, 1] \subset \mathbb{R}$ , das durch  $\lambda([x, y]) = (y - x)$  für Intervalle  $[x, y]$  mit  $x \leq y$  bestimmt ist. Integrale bezüglich  $\lambda$  schreiben wir einfach als  $\int dx \dots$ . Völlig analog ist die mehrdimensionale Variante, die auf achsenparallelen Quadern statt Intervallen basiert. Integration schreibe ich dann oft als  $\int d^n x \dots$ . Daraus kann man viele weitere Beispiele machen, indem man das Lebesguemaß mit einer Dichtefunktion  $p$  multipliziert, also

$$\mathbb{P}[f] = \int d^n x p(x) f(x) . \quad (2.7)$$

Auch wenn der Raum  $X$  durch kontinuierliche Parameter gegeben ist, betrachten wir oft Maße, die auf wenige Punkte konzentriert sind. Das **Punktmaß**  $\delta_y$  zu einem Punkt  $y \in X$  ist gegeben durch  $\delta_y(S) = \chi_S(y)$  oder  $\delta_y[f] = f(y)$ . Der Buchstabe erinnert an Diracs  $\delta$ -Funktion, die formale Dichte eines solchen Maßes ( $\delta_y(dx) =$

<sup>1</sup>Ich vermeide hier den Ausdruck “charakteristische Funktion”, der eine zweite Bedeutung als Fouriertransformation einer Wahrscheinlichkeitsdichte hat [2.4.5].

$\delta(x-y)dx$ ), die sicher keine Funktion ist, sondern eine sog. Distribution. Bei endlichem  $X$  sieht man leicht, dass Punktmaße genau die Extrempunkte der Menge der Wahrscheinlichkeitsmaße sind, also die “reinen Zustände” der klassischen Theorie. Summen der Art

$$\mathbb{P} = \sum_x p(x)\delta_x \quad (2.8)$$

nennt man **diskrete Wahrscheinlichkeitsmaße**. (Dabei sind höchstens abzählbar viele  $p(x) \neq 0$  und auf endlichem  $X$  ist jedes Maß diskret). Sie treten in der Quantenmechanik gerade als Folge der “Quantisierung” auf: Wenn nur diskrete Energieniveaus vorkommen, so muss die Verteilung der Energie ein diskretes Maß sein, wobei  $p(x)$  nur auf den erlaubten Werten von Null verschieden sein kann. Für fast alle Zwecke werden wir mit einer Kombination von diskreten Maßen und solchen mit einer Dichte bezüglich des Lebesguemaßes auskommen.

Für Maße auf  $\mathbb{R}^n$  ist es oft besonders einfach, die Erwartungswerte der Koordinatenfunktionen und ihrer Potenzen zu berechnen, die sogenannten **Momente**. Für ein Wahrscheinlichkeitsmaß  $\mathbb{P}$  auf  $\mathbb{R}$  nennt man

$$M_n = \int \mathbb{P}(dx) x^n = \mathbb{P}[x^n] , \quad (2.9)$$

das  $n$ -te Moment von  $\mathbb{P}$ . Es ist immer  $M_0 = 1$ , wegen der Normierung auf Gesamtwahrscheinlichkeit 1. Alle anderen Momente brauchen nicht zu existieren, d.h. ergeben unter Umständen divergente Integrale. Für viele Verteilungen sind sie dennoch nützlich und wenn alle Momente existieren, so lässt sich aus ihnen das Maß  $\mathbb{P}$  auch wieder rekonstruieren. Die praktisch wichtigsten Momente sind  $M_1$ , der **Mittelwert** und  $M_2$ .  $M_2$  kann aus zwei Gründen groß werden: zum einen, wenn das Maß “weit draußen” konzentriert ist, also schon  $M_1$  groß ist, zum anderen, wenn  $\mathbb{P}$  sehr “ausgeschmiert” ist. Um diese beiden Aspekte zu trennen, betrachtet man an Stelle des zweiten Moments oft die **Varianz**

$$\text{var}_{\mathbb{P}}(x) = \min_{\xi \in \mathbb{R}} \mathbb{P}[(x - \xi)^2] = \min_{\xi \in \mathbb{R}} (M_2 - 2\xi M_1 + \xi^2) = M_2 - M_1^2 . \quad (2.10)$$

Aufgrund der Definition ist klar, dass Varianzen stets  $\geq 0$  sind und dann und nur dann verschwinden, wenn  $\mathbb{P}$  ein Punktmaß ist.

Für höhere Dimensionen  $n$  gibt es mehr Momente der Ordnung  $k$ , also zum Beispiel die zweiten Momente  $\mathbb{P}[x_j x_k]$  für  $j \leq k$ . Die Varianz ist die Matrix

$$V_{jk} = \mathbb{P}[x_j x_k] - \mathbb{P}[x_j]\mathbb{P}[x_k] . \quad (2.11)$$

Diese Matrix ist positiv semidefinit, was bedeutet, dass

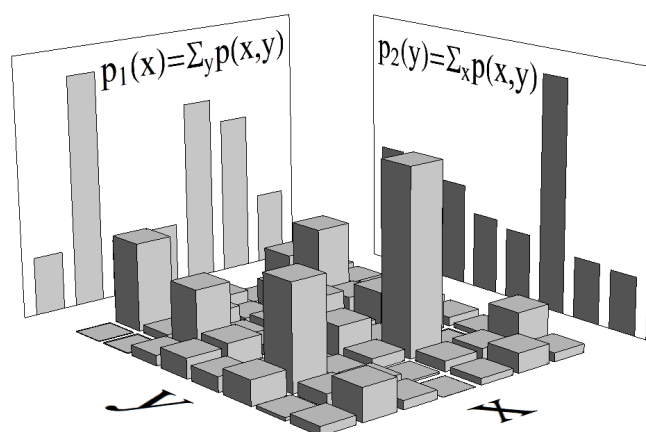
$$\sum_{jk} V_{jk} c_j c_k = \min_{\xi \in \mathbb{R}^n} \mathbb{P} \left[ \left| \sum_k c_k (x_k - \xi_k) \right|^2 \right] \geq 0 . \quad (2.12)$$

Nicht alle Zufallsvariable haben Werte in  $\mathbb{R}$  oder  $\mathbb{R}^n$ . Wenn  $X$  die Ergebnisse irgend einer Messung parametrisiert, können wir immer auch eine beliebige Nachverarbeitung

$f : X \rightarrow Y$  zulassen. Es genügt dann, Ereignisse  $f^{-1}(A) = \{x | f(x) \in A\}$  für  $A \subset Y$  zu betrachten. Das Maß  $\mathbb{P}_f(A) = \mathbb{P}(f^{-1}(A))$  auf  $Y$  ist dann die Verteilung der Zufallsvariablen  $f$ . Interessanter wird es, wenn man kombinierte Ereignisse für zwei Zufallsvariable nimmt, also  $f_i : X \rightarrow Y_i$  ( $i = 1, 2$ ). Für  $A_i \subset Y_i$ , also  $A_1 \times A_2 \subset Y_1 \times Y_2$  betrachten wir dann die Wahrscheinlichkeiten

$$\mathbb{P}_{f_1 \& f_2}(A_1 \times A_2) = \mathbb{P}(\{x \in X | f_1(x) \in A_1 \text{ und } f_2(x) \in A_2\}) . \quad (2.13)$$

Das hierdurch definierte Wahrscheinlichkeitsmaß auf  $Y_1 \times Y_2$  nennen wir die **gemeinsame Verteilung** der Zufallsvariablen  $f_1$  und  $f_2$ . Aus der gemeinsamen Verteilung bekommt man die ursprünglichen immer als sogenannte **Marginalverteilungen** zurück, z.B.  $\mathbb{P}_{f_1}(A_1) = \mathbb{P}_{f_1 \& f_2}(A_1 \times \mathbb{R})$ . Im diskreten Fall entspricht das der Summation über die nicht weiter betrachtete Variable, woraus sich der Ausdruck Marginal- (=“Rand”-) Verteilung ergibt (Abb. 8.1).



**Abb. 2.1:** Gemeinsame Verteilung  $p$  und Marginalverteilungen  $p_1, p_2$  zweier Größen  $x$  und  $y$ .

Viele Wahrscheinlichkeitstheorie-Lehrbücher verwenden den Grundbegriff der Zufallsvariablen so, dass immer eine vorgegebene Verteilung mit dabei ist. Es wird damit auch unterstellt, dass zu jeder Ansammlung von Zufallsvariablen auch eine gemeinsame Verteilung gegeben ist. Der Elementarereignisraum und das Maß darauf verschwinden dann aus der Notation. Für die Physik und speziell die Quantenmechanik ist das kein hilfreicher Standpunkt. Zum einen ist das Wahrscheinlichkeitsmaß für den Physiker nicht irgendwie präexistent, sondern durch Präparation eingerichtet und diese Abhängigkeit ist oft gerade im Zentrum des Interesses. Zum anderen führt die Annahme, für beliebige Messungen könnte man sich eine gemeinsame Verteilung der Ergebnisse vorstellen, geradewegs in den klassischen Fehlschluss aus dem man die Bellschen Ungleichungen [??] ableiten kann, im Widerspruch zur Quantenmechanik.

Wir brauchen noch eine Notation für Räume von integrierbaren Funktionen. Wenn  $\mu$  irgendein (nicht notwendig normiertes Maß) auf einer Menge  $X$  ist und  $1 \leq p < \infty$ , bezeichnen wir mit

$$\begin{aligned}\mathcal{L}^p(X, \mu) &= \{f : X \rightarrow \mathbb{C} \mid \int \mu(dx) |f(x)|^p < \infty\} \\ \|f\|_p &= (\int \mu(dx) |f(x)|^p)^{1/p}\end{aligned}\tag{2.14}$$

den Raum der zur  $p$ -ten Potenz integrierbaren Funktionen, wobei wir eigentlich nur die Spezialfälle  $p = 1$  (für Wahrscheinlichkeitsdichten) und  $p = 2$  (die Hilberträume) brauchen. Für  $p \rightarrow \infty$  wird  $\|f\|_p$  zum Supremum der Funktion  $f$ . Wir setzen also  $\mathcal{L}^\infty(X, \mu)$  als den Raum der beschränkten Funktionen mit der Norm

$$\|f\|_\infty = \sup_{x \in X} |f(x)| .\tag{2.15}$$

Für alle  $1 \leq p \leq \infty$  erfüllt  $\|\cdot\|_p$  die Dreiecksungleichung, ist aber zunächst keine “Norm” weil  $\|f\|_p = 0$  auch für Funktionen möglich ist, die nur auf einer Menge vom  $\mu$ -Maß 0 von Null verschieden sind. Man erklärt daher Funktionen für “gleich”, die sich nur auf einer Menge vom Maß Null unterscheiden, geht also zu Äquivalenzklassen über. Streng genommen ist dann der Funktionswert  $\psi(x)$  eines Elements  $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx)$  im Allgemeinen nicht definiert. Voraussetzungen wie Differenzierbarkeit beziehen sich auf einen “geeigneten Vertreter” der Äquivalenzklasse und mit dem rechnet man dann eben weiter. Über die Klassenbildung hängt auch der Raum  $\mathcal{L}^\infty(X, \mu)$  von  $\mu$  ab. Hier muss, genau genommen, das Supremum in (2.15) durch das “ $\mu$ -wesentliche” Supremum ersetzt werden, also das Infimum aller Konstanten  $c$ , sodass die Ausreißermenge  $\{x \mid |f(x)| > c\}$  vom Maß Null ist. Dies ist dann offensichtlich unempfindlich gegen Abänderung der Funktion auf kleinen Mengen.

### 2.1.3 \* $\circ$ Maßtheorie

In diesem Abschnitt, der beim ersten Lesen übersprungen werden kann, sammeln wir ein paar Aspekte der Maßtheorie auf allgemeinen Räumen. Das Ziel ist, die etwas schwammigen Formulierungen des letzten Abschnitts zu präzisieren oder wenigstens anzudeuten in welche Richtung die einschlägige mathematische Theorie geht. Natürlich kann dieser Abschnitt kein Buch über Maßtheorie ersetzen

Zunächst muss man zur Kenntnis nehmen, dass es nicht sinnvoll möglich ist, für *alle* Teilmengen einer unendlichen Menge ein Maß anzugeben. Das Beispiel, das dies überdeutlich zeigt, ist das **Banach-Tarski-Paradoxon** [Wag85]. Dabei wird eine dreidimensionale Kugel in fünf [Wag85, Thm. 4.7] disjunkte Puzzle-Teile zerlegt, sodass nach Verschieben und Drehen jedes der Teile eine disjunkte Zerlegung von genau *zwei* Vollkugeln vom gleichen Radius entsteht. Die Existenz eines solchen Puzzles wird mit Hilfe des Auswahlaxioms gezeigt und ist daher nicht explizit (konstruktiv) angebbbar. Die Teile sind jedenfalls unendlich wild zerklüftet und müssen sich beim Verschieben durchdringen. Dennoch ist ein solches Puzzle mit keinem vernünftigen Volumenbegriff für die Stücke verträglich.



Deswegen werden in jeder Integrationstheorie eine Einschränkung auf so genannte **messbare** Mengen und Funktionen vorgenommen. Der angesprochene “Ausgangspunkt” einer Integrationstheorie besteht in der Auswahl einer Klasse von irgendwie einfachen Mengen (bzw. Funktionen), für die man Maß (bzw. Integral) einfach angeben kann oder als bereits definiert betrachten kann: Für das Lebesguemaß sind das die Intervalle, für das Riemann-Integral die auf einem Intervall (stückweise) stetigen Funktionen. Die Kunst des Maßtheoretikers besteht dann darin, diese Klasse (und die Definition von Maß und Integral) durch Grenzprozesse so zu erweitern, dass der entstehende Maß- und Integralbegriff gute Eigenschaften besitzt und der Praxis keine vermeidbaren Einschränkungen auferlegt. Zwei Typen von Grenzprozessen werden hauptsächlich verwendet: monotone Limiten und metrische Vervollständigung.

[► Wird noch ausgeführt]

### 2.1.4 Unabhängigkeit und Fehlerbalken

Zwei Zufallsquellen könnte man unabhängig nennen, wenn sie technisch unabhängig voneinander arbeiten. Ein Beispiel dafür sind Roulette-Ergebnisse an benachbarten Spieltischen. Die Unabhängigkeit zweier Quellen im Sinn der Wahrscheinlichkeitstheorie ist eine Eigenschaft der Outputs zweier Quellen, die man in solchen Situationen erwartet: Das Beobachten des einen Tisches nutzt nichts, um ein erfolgreiches Spielsystem für den anderen zu entwickeln. Speziell, wenn man nur dann spielt, wenn am ersten Tisch ein Ergebnis  $A$  eingetroffen ist, ändern sich die relativen Häufigkeiten für das Ergebnis  $B$  am zweiten Tisch nicht. In Formeln:  $\mathbb{P}(A \cap B) = \mathbb{P}(A)\mathbb{P}(B)$ . Allgemeiner können wir die Unabhängigkeit zweier Zufallsvariablen durch die gemeinsame Verteilung (2.13) ausdrücken: Wir nennen  $f_i : X \rightarrow Y_i$  unabhängig, wenn die gemeinsame Verteilung ein Produktmaß ist, d.h.

$$\mathbb{P}_{f_1 \& f_2}(A_1 \times A_2) = \mathbb{P}_{f_1}(A_1)\mathbb{P}_{f_2}(A_2) \quad (2.16)$$

für alle  $A_i \subset Y_i$ .

Wie schon bei der Frage, ob etwas überhaupt eine Zufallsquelle ist, kann man nicht anhand endlicher Beobachtung abschließend entscheiden, ob zwei Quellen unabhängig sind, auch wenn die Auszählung von Häufigkeiten klare Indizien liefert. Unabhängigkeit ist also meist eher eine Annahme, die man auf Grund der physikalischen Situation trifft oder eine Eigenschaft die man aus einer theoretischen Überlegung bekommt. Ein wichtiger Fall sind die aufeinander folgenden Outputs aus einer Zufallsquelle. Wir hatten es ja als Teil der Definition einer solchen Quelle angesehen, dass es dagegen kein Wettsystem gibt. Dies können wir nun auf Blöcke von Werten anwenden. Wir betrachten also eine neue Quelle für Stichproben der Länge  $N$ , also jeweils das Tupel  $(x_1, \dots, x_N)$  von  $N$  aufeinander folgenden Ziehungen der gegebenen Quelle. Diese  $N$  Werte sind also statistisch unabhängig und haben die gleiche Verteilung wie die der Originalquelle: Andernfalls könnte man ein Kriterium für  $(x_1, \dots, x_{N-1})$  angeben, sodass man, wenn man nur die Fälle zählte, in denen es erfüllt ist, eine modifizierte Häufigkeit für  $x_N$  bekäme.

Daraus ergibt sich nun zwanglos eine Theorie des statistischen Experimentierens: Was kann ich eigentlich aus einer endlichen Beobachtung der Länge  $N$  schließen?

Die Aufgabe, Charakteristika einer teilweise oder ganz unbekannten Wahrscheinlichkeitsverteilung optimal aus einer endlichen Stichprobe zu extrahieren, ist der Gegenstand der Wissenschaft “Statistik”. Eine Funktion, die aus  $N$  gemessenen Werten einen Wert liefert, nennt man einen **Schätzer**. Ein Prototyp ist ein Schätzer für den Erwartungswert einer reellwertigen Zufallsvariable  $x$ , nämlich

$$m(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i . \quad (2.17)$$

War das nicht sowieso die Definition? Beinahe, und es lohnt sich, die verschiedenen Begriffe noch einmal gegeneinander zu differenzieren. Der “Erwartungswert”  $\mathbb{P}[x]$  ist eine Eigenschaft des Wahrscheinlichkeitsmaßes  $\mathbb{P}$ , das die Quelle charakterisiert. Dies ist in einem Experiment gerade die unbekannte Größe, die ich messen will. Dafür ziehe ich eine Stichprobe von  $N$  Werten, deren Mittelwert (2.17) ich natürlich aus diesen Daten ausrechnen kann, ohne etwas über  $\mathbb{P}$  zu wissen. Die Definition des Erwartungswertes hatten wir schon damit motiviert, dass der Mittelwert in der Stichprobe für große  $N$  ungefähr der Erwartungswert sein sollte. Das motiviert uns nun auch, den Mittelwert der Stichprobe als Schätzer für den Erwartungswert anzusetzen. Dieser Schätzer wird natürlich von Messung zu Messung einen anderen Wert annehmen und ist also selbst eine Zufallsvariable  $m$ . Deren Mittelwert ist offenbar  $\mathbb{P}[m] = \frac{1}{N} \sum_i \mathbb{P}[x_i] = \mathbb{P}[x]$ . Man sagt daher auch,  $m$  sei ein **Erwartungswert-treuer** Schätzer für den Erwartungswert. Interessanter für die Frage von Fehlerabschätzungen ist die Varianz von  $m$ . Wir erhalten

$$\mathbb{P}[m^2] = \frac{1}{N^2} \sum_{ij} \mathbb{P}[x_i x_j] = \frac{1}{N} \mathbb{P}[x^2] + \frac{N^2 - N}{N^2} \mathbb{P}[x]^2 , \quad (2.18)$$

wobei wir verwendet haben, dass wegen der Unabhängigkeit  $\mathbb{P}[x_i x_j] = \mathbb{P}[x]^2$  für  $i \neq j$ . Als Varianz von  $m$  bekommen wir also

$$\mathbb{P}[m^2] - \mathbb{P}[m]^2 = \frac{1}{N} (\mathbb{P}[x^2] - \mathbb{P}[x]^2) . \quad (2.19)$$

Die Größe der Schwankungen in der Einheit von  $x$  sind die Wurzel hieraus, also von der Ordnung  $1/\sqrt{N}$ . Mit den gleichen Überlegungen bekommt man auch einen Erwartungswert-treuen Schätzer für die Varianz der Verteilung, nämlich

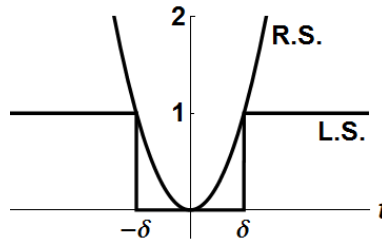
$$v(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{N-1} \sum_i (x_i - m(x_1, \dots, x_N))^2 . \quad (2.20)$$

Wir betrachten jetzt die Messung einer Wahrscheinlichkeit und setzen dafür  $X = \{0, 1\}$ , sodass (2.17) der Schätzer für die Wahrscheinlichkeit  $p = \mathbb{P}[x]$  des “1”-Ergebnisses wird. Wie können wir die Unsicherheit einer solchen Messung bewerten? Es ist von vornherein klar, dass dies wieder eine Wahrscheinlichkeitsaussage sein muss, den *möglich* ist ja bei jeder Quelle, die nicht gerade Wahrscheinlichkeit 0 oder 1 hat, auch

jede endliche Folge von Nullen und Einsen. Wir möchten also eine Abschätzung der Wahrscheinlichkeit dafür, dass die Schätzung  $m$  um mehr als  $\delta$  neben der unbekannten “wahren” Wahrscheinlichkeit  $p$  liegt, also  $|m - p| \geq \delta$ . Diese Abschätzung muss sich natürlich aus den gemessenen Daten ergeben und darf nicht selbst die unbekannte Größe  $p$  enthalten. Wir verwenden dafür die Ungleichung

$$1 - \chi_{[-\delta, \delta]}(t) \leq \delta^{-2} t^2, \quad (2.21)$$

die in Abb. 2.2 skizziert ist, um eine Wahrscheinlichkeit in den Erwartungswert einer quadratischen Funktion zu verwandeln.



**Abb. 2.2:** Vergleich der Funktionen (“R.S.” und “L.S.”) in Gl. (2.21).

Mit  $t = m - p$  und (2.19) erhalten wir die Tschebyshev-Ungleichung

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\left(\left\{\vec{x} \in X^N \mid |m(\vec{x}) - p| \geq \delta\right\}\right) &\leq \\ &\leq \delta^{-2} \mathbb{P}[(m - p)^2] = \frac{\mathbb{P}[x^2] - \mathbb{P}[x]^2}{N\delta^2} = \frac{p(1 - p)}{N\delta^2} \\ &\leq \frac{1}{4N\delta^2}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Hier haben wir verwendet, dass für die einzelnen Werte  $x_i^2 = x_i$  gilt, also  $\mathbb{P}[x^2] = \mathbb{P}[x] = p$  und im letzten Schritt die Unabhängigkeit von der unbekannten Größe  $p$  durch Maximierung der Funktion  $p(1 - p)$  über das Einheitsintervall erreicht. Wir können dies zusammenfassen in der Aussage:

Wenn wir zur Messung der Wahrscheinlichkeit  $p$  eines Ereignisses die Häufigkeit  $m$  in einer Stichprobe der Größe  $N$  ermittelt haben, so gilt

$$p \in \left[ m - \frac{1}{2\sqrt{N\varepsilon}}, m + \frac{1}{2\sqrt{N\varepsilon}} \right] \quad (2.23)$$

mit Wahrscheinlichkeit wenigstens  $1 - \varepsilon$ .

Das angegebene Intervall nennt man auch das **Konfidenzintervall** zur Fehlerwahrscheinlichkeit  $\varepsilon$ . Natürlich haben wir hier vorausgesetzt, dass wir es wirklich mit einer Zufallsquelle zu tun haben. Wenn irgendein Betrüger den Roulette-Tisch bedient, ist ohnehin jede Konfidenz<sup>2</sup> fehl am Platz.

<sup>2</sup>=Zutrauen, Vertrauen, confidence. Das deutsche Wort gibt es außerhalb der Statistik eigentlich nicht.

## 2.2 Hilbertraum

### 2.2.1 Geometrie

Nach unserem ersten Postulat wurde jeder Sorte quantenmechanischer Systeme ein Hilbertraum zugeordnet. Hier müssen wir einige Grundtatsachen über solche Räume zusammenstellen. Wie in der linearen Algebra gibt es zwei Sichtweisen, die sich ergänzen: eine “abstrakte”, koordinatenfreie, in der man vorzugsweise Definitionen formuliert und allgemeine Eigenschaften studiert und eine “konkrete”, in der jeder Vektor durch seine Komponenten bezüglich einer Basis gegeben wird und die man bei praktischen Rechnungen verwendet. Für die Definition beginnen wir auf der abstrakten Seite.

Definiert ist ein Hilbertraum  $\mathcal{H}$  als komplexer Vektorraum, mit Skalarprodukt  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ , der bezüglich der Norm  $\|\Psi\|^2 = \langle \Psi, \Psi \rangle$  vollständig ist.

Für den Vektorraumbegriff verweisen wir auf die Lineare Algebra. Ein **Skalarprodukt** für einen komplexen Vektorraum  $\mathcal{H}$  ordnet je zwei Vektoren  $\Phi, \Psi \in \mathcal{H}$  eine komplexe Zahl  $\langle \Phi, \Psi \rangle$  zu. Es ist per definitionem additiv in jedem Argument (z.B.,  $\langle \Phi_1 + \Phi_2, \Psi \rangle = \langle \Phi_1, \Psi \rangle + \langle \Phi_2, \Psi \rangle$ ). Für das Herausziehen skalarer Faktoren gelten die Regeln

$$\begin{aligned}\langle \Phi, z\Psi \rangle &= z \langle \Phi, \Psi \rangle \\ \langle z\Phi, \Psi \rangle &= \bar{z} \langle \Phi, \Psi \rangle .\end{aligned}\tag{2.24}$$

Die Komplexkonjugation in der zweiten Formel ist wichtig, damit die die Norm positiv sein kann (s.u.). Aus welchem der beiden Faktoren Skalare konjugiert komplex herausgezogen werden, ist eine Konvention: Bei fast allen Physikern gelten die Regeln (2.24), bei fast allen Mathematikern ist der zweite Faktor konjugiert linear. Zur Definition des Skalarprodukts gehört noch die Positivität in dem Sinne dass

$$\begin{aligned}\langle \Psi, \Psi \rangle &\geq 0 \quad \text{für alle } \Psi \in \mathcal{H} \\ \langle \Psi, \Psi \rangle &= 0 \quad \text{nur für } \Psi = 0.\end{aligned}\tag{2.25}$$

Diese Eigenschaft erlaubt uns die Definition der **Norm** eines Vektors  $\Psi$  als

$$\|\Psi\| = \sqrt{\langle \Psi, \Psi \rangle} .\tag{2.26}$$

Umgekehrt bestimmt die Normfunktion das Skalarprodukt nach

$$\|\Phi + \Psi\|^2 = \|\Phi\|^2 + 2\Re\langle \Phi, \Psi \rangle + \|\Psi\|^2\tag{2.27}$$

Dies liefert erst mal den Realteil, aber wenn man hier  $\Psi$  durch  $i\Psi$  ersetzt, auch den Imaginärteil des Skalarprodukts. Wenn man in (2.27)  $\Psi$  durch  $z\Psi$  mit beliebigem  $z \in \mathbb{C}$  ersetzt, erhält man auf der rechten Seite einen quadratischen Ausdruck in  $z$ , der nur dann für alle  $z$  nicht-negativ ist [Ü!], wenn

$$\overline{\langle \Phi, \Psi \rangle} = \langle \Psi, \Phi \rangle , \quad \text{und}\tag{2.28}$$

$$|\langle \Phi, \Psi \rangle| \leq \|\Phi\| \|\Psi\| . \quad \textbf{Schwarzsche Ungleichung}\tag{2.29}$$

Daraus folgt auch leicht [Ü!] die Dreiecksungleichung

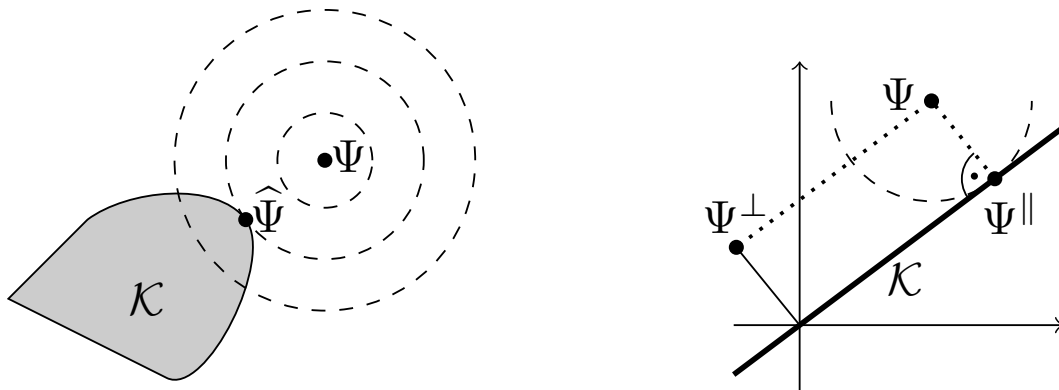
$$\left\| \sum_{\alpha=1}^N \Psi_{\alpha} \right\| \leq \sum_{\alpha=1}^N \|\Psi_{\alpha}\| . \quad (2.30)$$

Hilbertraum-Geometrie ist in vieler Hinsicht der normalen räumlichen ( $\mathbb{R}^3$ ) Geometrie ähnlich und manche Begriffe borgt man sich von dort. Zum Beispiel nennt man zwei Vektoren **orthogonal** (in Symbolen  $\Psi \perp \Phi$ ), wenn  $\langle \Phi, \Psi \rangle = 0$ . Der Winkel  $\alpha$  zwischen zwei Vektoren  $\Phi$  und  $\Psi$  lässt sich durch  $\cos \alpha = (\|\Phi\| \|\Psi\|)^{-1} \Re(\langle \Phi, \Psi \rangle)$  definieren. Dann gilt wegen (2.27) der Kosinus-Satz.

Der Begriff **Vollständigkeit** in der Definition des Hilbertraums besagt, dass alle Cauchy-Folgen in  $\mathcal{H}$  konvergent sind. Die Bedeutung von “Cauchy-Folge” und “konvergent” sind die gleichen wie für Zahlen, nur dass eben Absolutbeträge durch Normen zu ersetzen sind. Konvergenz einer Folge  $\Psi_n$  gegen einen Vektor  $\Psi$  (in Symbolen  $\Psi = \lim_n \Psi_n$ ) bedeutet also beispielsweise

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists n(\varepsilon) \in \mathbb{N} : \quad n \geq n(\varepsilon) \implies \|\Psi_n - \Psi\| \leq \varepsilon . \quad (2.31)$$

Die Vollständigkeit ist wesentlich für viele Eigenschaften, die das Leben im Hilbertraum vereinfachen. Zum Beispiel gibt es zu jedem Vektor  $\Psi$  in jeder abgeschlossen konvexen Menge  $\mathcal{K} \subset \mathcal{H}$  einen eindeutig bestimmten Vektor  $\hat{\Psi} \in \mathcal{K}$  mit kleinstem Abstand zu  $\Psi$  (siehe [Ü2.2] und Abb. 2.3). Der am häufigsten verwendete Spezialfall



**Abb. 2.3:** Links: Der zu  $\Psi$  nächste Punkt  $\hat{\Psi}$  einer konvexen Menge  $\mathcal{K}$ . Eingezeichnet drei Kugeln um  $\Psi$  mit zu großem, passendem, und zu kleinem Radius. Rechts: Der Spezialfall eines Unterraums, mit  $\hat{\Psi} = \Psi^{\parallel}$  und  $\Psi^{\perp} = \Psi - \Psi^{\parallel}$ .

ist der eines abgeschlossenen Unter-Vektorraums (kurz eines Teilraums)  $\mathcal{K} \subset \mathcal{H}$ . Man sieht dann [Ü!], dass die Differenz  $\Psi - \hat{\Psi}$  senkrecht auf  $\mathcal{K}$  stehen muss. Wir erhalten also die folgende Aussage: Sei  $\mathcal{K} \subset \mathcal{H}$  ein Teilraum. Dann lässt sich jeder Vektor  $\Psi \in \mathcal{H}$  eindeutig zerlegen in

$$\Psi = \Psi^{\parallel} + \Psi^{\perp} \quad \text{mit } \Psi^{\parallel} \in \mathcal{K} \text{ und } \Psi^{\perp} \perp \mathcal{K} . \quad (2.32)$$

Wegen der Eindeutigkeit der Zerlegung ist die Abbildung  $\Psi \mapsto \Psi^\parallel$  linear. Daher gibt es zu jedem Unterraum  $\mathcal{K}$  einen Operator  $P$ , sodass

$$P\Psi = \Psi^\parallel \quad \text{und} \quad (\mathbb{1} - P)\Psi = \Psi^\perp . \quad (2.33)$$

Offenbar gilt  $P^2 = P$  und  $P\Psi \perp (\mathbb{1} - P)\Psi$  für alle  $\Psi$ , was gleichbedeutend zu  $P^* = P$  ist (Definition des Sterns: siehe nächster Abschnitt). Einen solchen Operator nennen wir **Projektor**. Umgekehrt definiert jeder Projektor einen Teilraum  $\mathcal{K}$ , nämlich  $\mathcal{K} = P\mathcal{H} = \{P\Psi \mid \Psi \in \mathcal{H}\}$ .

Die Zerlegung in zwei zueinander orthogonale Teilstücke wird oft auch mit einer größeren Sammlung zueinander orthogonaler Teilräume  $\mathcal{K}_\alpha \subset \mathcal{H}$  verwendet, die zusammen  $\mathcal{H}$  erzeugen. Wir schreiben dann auch  $\mathcal{H} = \bigoplus_\alpha \mathcal{K}_\alpha$ . Jeder Vektor  $\Phi$  hat dann eine Komponente  $\Phi_\alpha \in \mathcal{K}_\alpha$  und wir schreiben auch  $\Phi = \bigoplus_\alpha \Phi_\alpha$ . Für Skalarprodukte gilt

$$\left\langle \bigoplus_\alpha \Phi_\alpha, \bigoplus_\alpha \Psi_\alpha \right\rangle = \sum_\alpha \langle \Phi_\alpha, \Psi_\alpha \rangle . \quad (2.34)$$

Im einfachsten Fall sind die  $\mathcal{K}_\alpha = \mathbb{C}$  eindimensional und  $\langle \Phi_\alpha, \Psi_\alpha \rangle = \overline{\Phi_\alpha} \Psi_\alpha$ . Dann ist (2.34) einfach das übliche Skalarprodukt, ausgedrückt in Komponenten. Bei einer direkten Summe sind diese Komponenten einfach nur selbst vektorwertig. Bei gegebenen  $\mathcal{K}_\alpha$  ist dies auch die Konstruktion eines neuen Hilbertraums  $\bigoplus_\alpha \mathcal{K}_\alpha$ .

Ein wichtiges Faktum ist noch der Satz von Riesz: Ein stetiges lineares Funktional auf  $\mathcal{H}$  ist definiert als eine lineare Abbildung  $f : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$  mit der Eigenschaft  $f(\lim_n \Psi_n) = \lim_n f(\Psi_n)$ , wobei natürlich auf der linken Seite ein Limes im Hilbertraum gemeint ist (siehe oben) und auf der rechten Seite ein Limes von komplexen Zahlen. Der Satz von Riesz besagt nun, dass sich jedes solche Funktional in der Form  $f(\Psi) = \langle \Phi_f, \Psi \rangle$  darstellen lässt, wobei  $\Phi_f \in \mathcal{H}$  ein geeigneter, von  $f$  abhängiger Vektor ist.

## 2.2.2 Abstrakte und konkrete Hilberträume

Die Räume  $\mathcal{H}$  von Wellenfunktionen, die uns in der Einleitung begegneten, waren nicht einfach als abstrakte Hilberträume definiert, sondern zum Beispiel als  $\mathbb{C}^2$  oder als Raum von quadratintegrierbaren Funktionen, mit einer expliziten Formel für das Skalarprodukt. Das gemeinsame Muster all dieser “konkreten” Hilberträume ist

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \mathcal{L}^2(X, \mu) &= \left\{ \Psi : X \rightarrow \mathbb{C} \mid \int \mu(dx) |\Psi(x)|^2 < \infty \right\} \\ \langle \Phi, \Psi \rangle &= \int \mu(dx) \overline{\Phi(x)} \Psi(x) , \end{aligned} \quad (2.35)$$

wobei  $\mu$  ein Maß auf der Menge  $X$  im Sinne des vorigen Abschnittes ist. Oft werden wird  $\mu$  das Lebesguemaß auf  $X = \mathbb{R}^n$  sein, wofür wir  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n, dx)$  schreiben. Oft ist  $X$  aber auch eine diskrete Menge, z.B.  $X = \mathbb{N}$  und das Maß  $\mu(S)$  ist einfach die

Anzahl der Punkte in  $S$ . Integrale bezüglich dieses “Zählmaßes” sind nichts anderes als Summen. Die in diesem Fall verwendeten Bezeichnungen sind

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = \ell^2(X) &= \left\{ \Psi : X \rightarrow \mathbb{C} \mid \sum_{x \in X} |\Psi(x)|^2 < \infty \right\} \\ \langle \Phi, \Psi \rangle &= \sum_{x \in X} \overline{\Phi(x)} \Psi(x) .\end{aligned}\tag{2.36}$$

In diesen Rahmen passt auch der endlich dimensionale Hilbertraum

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = \mathbb{C}^N &= \left\{ \Psi : \{1, \dots, N\} \rightarrow \mathbb{C} \mid \sum_{n=1}^N |\Psi_n|^2 < \infty \right\} \\ \langle \Phi, \Psi \rangle &= \sum_{n=1}^N \overline{\Phi_n} \Psi_n .\end{aligned}\tag{2.37}$$

Der einzige Unterschied zur vorherigen Definition ist, dass  $X = \{1, \dots, N\}$  nun endlich ist und dass man das Argument der Wellenfunktion oft als Komponenten-Index des Tupels  $\Psi = (\Psi_1, \dots, \Psi_N)$  schreibt.

Der Vorteil der abstrakten Schreibweise für Hilberträume ist, wie in der Geometrie und an vielen anderen Stellen der Physik, dass man die Koordinatenwahl aufschieben kann, bis man anhand des Problems sehen kann, welche Koordinaten denn wirklich die besten sind. Das kann bedeuten, dass man, selbst wenn der Hilbertraum ursprünglich “konkret” gegeben war, wissen muss, wie man die Koordinaten oder hier die Darstellung als  $\mathcal{L}^2$ -Raum wechselt. Wir brauchen also eine Möglichkeit, auszudrücken, dass ein  $\mathcal{L}^2$ -Raum eine “Darstellung” des abstrakten Hilbertraumes  $\mathcal{H}$  ist oder, allgemeiner, einen Isomorphiebegriff für Hilberträume. Dazu definieren wir: ein linearer Operator  $U : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$  von einem Hilbertraum in einen anderen heißt **unitär**, wenn  $U$  invertierbar ist und für alle  $\Phi_1, \Psi_1 \in \mathcal{H}_1$  gilt:

$$\langle U\Phi_1, U\Psi_1 \rangle_{\mathcal{H}_2} = \langle \Phi_1, \Psi_1 \rangle_{\mathcal{H}_1} .\tag{2.38}$$

Hier sind die Hilberträume, in denen die Skalarprodukte zu bilden sind, der Deutlichkeit halber als Index vermerkt. Man kann also einen unitären Operator einfach als “Umbenennung aller Vektoren” auffassen, bei der alle für die Hilbertraumtheorie wichtigen Beziehungen unangetastet bleiben.

Eine “Darstellung” des abstrakten Hilbertraums  $\mathcal{H}$  als  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n, dx)$  ist also jetzt einfach ein unitärer Operator  $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n, dx)$ . Ein Wechsel der Darstellung wird wiederum durch einen unitären Operator, z.B.  $U_1 : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n, dx) \rightarrow \ell^2(\mathbb{N})$  vermittelt. All dies ist völlig analog zu einem Wechsel der Basis in der linearen Algebra. Wir müssen natürlich noch klären, zwischen welchen der genannten Hilberträume überhaupt unitäre Operatoren existieren. Wenn es einen unitären Operator zwischen  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$  gibt, nennen wir die beiden isomorph ( $\mathcal{H}_1 \cong \mathcal{H}_2$ ). Es gibt eine sehr einfache Klassifikation der Hilberträume bis auf Isomorphie: Wie wir gleich sehen werden, ist jeder Hilbertraum isomorph zu einem Raum der Art  $\ell^2(X)$ . Weiter ist klar, dass für Mengen  $X$  und  $Y$  gleicher Kardinalzahl (gleicher Zahl von Elementen) eine Umbenennung der

Elemente von  $X$  in die von  $Y$  ausreicht, um eine Isomorphie zwischen  $\ell^2(X)$  und  $\ell^2(Y)$  herzustellen. Umgekehrt sind solche Räume mit verschiedenen großen  $X$  und  $Y$  nicht isomorph. Wir halten also fest, dass der Isomorphietyp eines Hilbertraums  $\mathcal{H}$  völlig bestimmt ist durch die Kardinalzahl von  $X$ , sodass  $\mathcal{H} \cong \ell^2(X)$ . Diese Zahl heißt **Dimension** von  $\mathcal{H}$  (in Symbolen:  $\dim \mathcal{H}$ ). Wir werden ausschließlich Hilberträume mit abzählbar unendlicher oder endlicher Dimension brauchen. Dabei treten die endlich dimensionalen auch nur als vereinfachte Teilbeschreibungen zum Beispiel für Zwecke der Numerik auf. So gesehen gibt es in der Physik nur einen einzigen Hilbertraum, nämlich  $\ell^2(\mathbb{N})$  und isomorphe Kopien davon.

Wir sind noch den Beweis schuldig, dass jeder Hilbertraum isomorph zu einem Raum vom Typ  $\ell^2(X)$  ist. Eine solche Isomorphie wird hergestellt mit Hilfe einer Basis des Raums. Eine **Basis** eines Hilbertraums  $\mathcal{H}$  ist ein System von Vektoren  $\varphi_x \in \mathcal{H}$ , wobei  $x$  über irgendeine “Indexmenge”  $X$  läuft, mit den Eigenschaften

$$\langle \varphi_x, \varphi_y \rangle = \delta_{xy} \quad \text{für alle } x, y \in X \quad \text{“}\{\varphi_x\} \text{ ist orthonormal”}$$

$$\text{und } \langle \varphi_x, \Psi \rangle = 0 \text{ für alle } x \Rightarrow \Psi = 0 \quad \text{“}\{\varphi_x\} \text{ ist vollständig”}$$

Die wichtigste Eigenschaft einer solchen Basis ist, dass jeder Vektor  $\Psi \in \mathcal{H}$  danach **entwickelt** werden kann: Es gilt

$$\Psi = \sum_{x \in X} \langle \varphi_x, \Psi \rangle \varphi_x . \quad (2.39)$$

Dabei ist die rechte Seite als Limes (2.31) aller endlichen Partialsummen definiert. Dieser Limes existiert, weil die  $\varphi_x$  orthonormal sind. (Warnung: aber nicht “absolut”:  $\sum_x |\langle \varphi_x, \Psi \rangle| \|\varphi_x\| = \infty$  ist möglich). Der Limes ist gleich  $\Psi$ , weil die Differenz zu  $\Psi$  ein Vektor senkrecht zu allen  $\varphi_x$  sein müsste, also wegen der Vollständigkeit des Systems nur der Nullvektor sein kann.

Wenn nun  $\{\varphi_x\}_{x \in X}$  eine Basis ist, so ist der Operator  $U : \mathcal{H} \rightarrow \ell^2(X)$ , definiert durch

$$(U\Psi)(x) = \langle \varphi_x, \Psi \rangle \quad (2.40)$$

unitär. Umgekehrt definiert jeder unitäre Operator  $U : \mathcal{H} \rightarrow \ell^2(X)$  eine Basis  $\varphi_x$ , die nach dem Satz von Riesz aus dieser Gleichung zurückzugewinnen ist.

Die Existenz von Basen wird mit dem Zornschen Lemma als Existenz maximaler Orthonormalsysteme gezeigt. Praktisch werden Basen oft mit dem **Orthonormierungsverfahren** gewonnen: Man startet mit irgendeiner Liste von Vektoren  $\Phi_1, \Phi_2, \dots$ . Daraus bestimmt man sukzessive ein System von paarweise orthogonalen Vektoren  $\hat{\Phi}_n$  nach der Formel

$$\hat{\Phi}_n = \Phi_n - \sum_{k=1}^{n-1} \hat{\Phi}_k \frac{\langle \hat{\Phi}_k, \Phi_n \rangle}{\|\hat{\Phi}_k\|^2} , \quad (2.41)$$

wobei Summanden mit  $\Phi_k = 0$  ausgelassen werden. Dieser Vektor ist offenbar orthogonal auf den  $\hat{\Phi}_k$  mit  $k < n$ . Die Vektoren  $\{\hat{\Phi}_n / \|\hat{\Phi}_n\| \mid \hat{\Phi}_n \neq 0\}$  bilden dann ein Orthonormalsystem, das den gleichen Teilraum aufspannt wie die ursprüngliche Liste.



Wenn es keinen Vektor gibt, der auf allen  $\Phi_n$  senkrecht steht, so ist diese Liste auch eine Basis.

Eine kleine mathematische Warnung:  $\dim \mathcal{H}$  ist *nicht* der Dimensionsbegriff der Linearen Algebra. Dies wäre die Zahl der Basiselemente, sodass man jeden Vektor als *endliche* Linearkombination aus den Basisvektoren schreiben kann (“Hamel-Basis”). Limiten sind dabei nicht zugelassen. In endlicher Dimension sind beide offenbar gleich. Wenn aber  $\dim \mathcal{H}$  abzählbar ist, braucht  $\mathcal{H}$  eine überabzählbare Hamel-Basis.

### 2.2.3 Operatoren

Wir hatten Operatoren schon als lineare Abbildungen  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  definiert. Wir nennen  $A$  **beschränkt**, wenn es eine Konstante  $C$  gibt, sodass  $\|A\Psi\| \leq C \|\Psi\|$  für alle  $\Psi$ . Dies ist äquivalent zur Stetigkeit, d.h. zu der Eigenschaft  $A \lim_n \Psi_n = \lim_n A\Psi_n$ . Beschränkte Operatoren sind immer auf dem ganzen Hilbertraum  $\mathcal{H}$  definiert; die Menge dieser Operatoren bezeichnen wir mit  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ . Die beste Konstante  $C$ , also

$$\|A\| = \sup_{\Psi \neq 0} \frac{\|A\Psi\|}{\|\Psi\|} \quad (2.42)$$

heißt die **Norm** des Operators  $A$ . Für diese Norm von Operatoren gilt die Dreiecksungleichung und außerdem die Abschätzung  $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$ . Der **Einsoperator**  $\mathbb{1}$  ( $\mathbb{1}\Psi := \Psi$ ) hat offensichtlich  $\|\mathbb{1}\| = 1$ . Der zu  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  **adjungierte Operator**  $A^* \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  ist definiert durch die Gleichung

$$\langle A^*\Phi, \Psi \rangle = \langle \Phi, A\Psi \rangle. \quad (2.43)$$

Die Existenz eines solchen Operators ist eine direkte Folge des Rieszschen Satzes: Bei festem  $\Phi$  ist die rechte Seite wegen der Stetigkeit von  $A$  und des Skalarproduktes ein stetiges lineares Funktional in  $\Psi$ , das also durch einen Vektor  $\Phi' = A^*\Phi$  gegeben sein muss. Die Rechenregeln für adjungierte Operatoren sind

$$\begin{aligned} (A+B)^* &= A^* + B^* & (zA)^* &= \bar{z}A^* \\ (AB)^* &= B^*A^* & (A^*)^* &= A \\ \|A^*\| &= \|A\| & \|A^*A\| &= \|A\|^2 \end{aligned} \quad (2.44)$$

Ein Operator  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  heißt

<b>hermitesch</b> , wenn	$A^* = A$	$(\Rightarrow a \in \mathbb{R})$
<b>positiv</b> , wenn	$\langle \Psi, A\Psi \rangle \geq 0$ für alle $\Psi \in \mathcal{H}$	$(\Rightarrow a \geq 0)$
<b>Projektor</b> , wenn	$A^2 = A^* = A$	$(\Rightarrow a \in \{0, 1\})$
<b>isometrisch</b> , wenn	$A^*A = \mathbb{1}$	$(\Rightarrow  a  \leq 1)$
<b>unitär</b> , wenn	$A^*A = AA^* = \mathbb{1}$	$(\Rightarrow  a  = 1)$
<b>normal</b> , wenn	$A^*A = AA^*$	

wobei wir zusätzlich angegeben haben, was die jeweilige Eigenschaft für einen Eigenwert  $a$  (d.h.  $A\Psi = a\Psi$  mit  $\Psi \neq 0$ ) bedeutet.

Einige dieser Begriffe waren schon vorgekommen: die hermiteschen Operatoren (Synonym: selbstadjungierte Operatoren) sind diejenigen, die durch  $\langle \Psi, A\Psi \rangle$  reelle Erwartungswerte von Observablen bestimmen. Positive Operatoren treten überall dort auf, wo die Wahrscheinlichkeitsinterpretation positive Erwartungswerte verlangt, weshalb wir sie in Abschnitt 2.2.5 etwas genauer betrachten.

Wir hatten im letzten Abschnitt gesehen, dass Projektoren in eineindeutiger Korrespondenz zu den abgeschlossenen Teilräumen von  $\mathcal{H}$  stehen. Da  $P = P^*P$ , sind Projektoren positiv. Isometrische Operatoren sind gerade die, die das Skalarprodukt und damit die Norm invariant lassen. Man rechnet leicht nach, dass dann  $AA^*$  der Projektor auf den Bildraum  $A\mathcal{H} = \{A\Psi \mid \Psi \in \mathcal{H}\}$  ist. Für  $\dim \mathcal{H} < \infty$  sind solche Operatoren automatisch bijektiv, also  $AA^* = \mathbb{1}$  und damit unitär. In unendlicher Dimension gibt es viele wichtige Beispiele von Isometrien mit  $AA^* \neq \mathbb{1}$ . Unitäre Operatoren sind die Isomorphismen von Hilberträumen. Wir hatten sie im letzten Abschnitt etwas allgemeiner auch als Operatoren zwischen verschiedenen Hilberträumen betrachtet. Sie werden später die Hauptrolle bei der Diskussion von Symmetrien in der Quantenmechanik spielen. Beispielsweise ist der Zeitentwicklungsoperator unitär.

Normale Operatoren sind diejenigen, für die “Realteil” und “Imaginärteil”

$$\text{“Re”} A = \frac{1}{2}(A + A^*) \quad \text{und} \quad \text{“Im”} A = \frac{1}{2i}(A - A^*) \quad (2.45)$$

vertauschen. (Die Anführungszeichen bedeuten, dass wir diese Notation nicht weiter verwenden werden, um nicht unnötig Verwirrung zu stiften). Für uns ist nur wichtig, dass hermitesche und unitäre Operatoren normal sind und dass normale Operatoren sich unitär diagonalisieren lassen (siehe unten).

Wir haben hier wieder zuerst die “basisfreien” Definitionen gebracht. Wenn man eine Basis  $\{\varphi_x\}$ ,  $x \in X$  fixiert hat, kann man jeden Operator  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  durch seine **Matrizelemente**

$$A_{xy} = \langle \varphi_x, A\varphi_y \rangle \quad (2.46)$$

charakterisieren. Wegen der Linearität von  $A$  ist dann

$$A\Psi = \sum_{xy} \varphi_x \langle \varphi_x, A\varphi_y \rangle \langle \varphi_y, \Psi \rangle. \quad (2.47)$$

Die Bildung des Adjungierten entspricht also der Abbildung  $A_{xy} \mapsto \overline{A_{yx}}$ , also Transposition mit Komplexkonjugation.

Die Entwicklungsformel für  $A$  und viele ähnliche Ausdrücke lassen sich etwas übersichtlicher schreiben durch die von Dirac erfundene **Bra-Ket Notation**. In vielen Büchern wird ein Hilbertraumvektor von vorne herein als “Ket”  $|\Psi\rangle$  anstatt einfach  $\Psi$  geschrieben. Es ist aber praktisch, hier einen subtilen Unterschied zu machen. Danach

ist  $|\Psi\rangle : \mathbb{C} \rightarrow \mathcal{H}$  der lineare Operator  $z \mapsto z\Psi$ . Man rechnet leicht nach, dass der adjungierte Operator dazu der “Bra”-Operator  $\langle\Psi| = |\Psi\rangle^* : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$  ist mit  $\langle\Psi|\Phi = \langle\Psi, \Phi\rangle$ . Wenn wir ein Bra und ein Ket als Operatoren multiplizieren, erhalten wir einen Operator von  $\mathbb{C}$  nach  $\mathbb{C}$ , nämlich  $z \mapsto \langle\Phi||\Psi\rangle z = \langle\Phi, \Psi\rangle z$ . Wenn wir in der Notation nun keinen Unterschied machen zwischen einem linearen Operator  $\mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$  und der Zahl, mit der er multipliziert, werden die Ausdrücke  $\langle\Phi||\Psi\rangle$  und  $\langle\Phi, \Psi\rangle$  gleichbedeutend und wir schreiben das auch einfach als  $\langle\Phi|\Psi\rangle$ . Dies ist natürlich der Hintergrund für die Bezeichnungen Bra und Ket: zusammen bilden sie eine Klammer “a bracket”. Häufig brauchen wir auch die Kombination **Ketbra**, also den Operator  $|\Psi\rangle\langle\Phi| : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  mit  $|\Psi\rangle\langle\Phi|\chi = \langle\Phi, \chi\rangle\Psi$ . Mathematisch gesprochen sind dies genau die Operatoren vom Rang 1. Speziell für einen normierten Vektor  $\Psi$  ist  $|\Psi\rangle\langle\Psi|$  der eindimensionale Projektor in Richtung  $\Psi$ .

Wir gehen in der Vereinfachung noch einen Schritt weiter: Sobald wir eine Basis  $\{\varphi_x \mid x \in X\}$  fixiert haben, sie also aus dem Kontext klar ist, trägt das Symbol “ $\varphi$ ” in den häufig vorkommenden  $\langle\varphi_x|$  und  $|\varphi_x\rangle$  keine Information mehr. Wir lassen diesen Buchstaben also einfach weg und schreiben dafür  $\langle x|$  und  $|x\rangle$ . Damit werden die Entwicklungsformeln (2.39) für Vektoren und (2.47) für Operatoren in der Operatorgleichung

$$\mathbb{1} = \sum_{x \in X} |x\rangle\langle x| \quad (2.48)$$

zusammengefasst. Matrixelemente (2.46) schreiben sich einfach als  $\langle x|A|y\rangle$ .

Dirac[Dir30] und mit ihm viele Physiker gehen mit dieser Notation noch einen Schritt weiter. So, wie  $\langle n|\Psi\rangle = \Psi(n)$  der Wert einer Wellenfunktion  $\Psi \in \ell^2(\mathbb{N})$  an der Stelle  $n$  ist, schreiben sie auch für kontinuierliche Variable wie den Ort  $\langle x|\Psi\rangle = \Psi(x)$ . Das “uneigentliche” Bra  $\langle x|$  ist nun beim besten Willen kein Vektor im Hilbertraum mehr. Für allgemeine  $\Psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$  ist der Funktionswert an einer einzelnen Stelle ja nicht einmal definiert, da wir  $\Psi(x)$  auf einer Menge vom Maß Null abändern dürfen, ohne  $\Psi$  zu ändern. Man kann diese Notation dennoch mathematisch retten, indem man jeweils von einem der Argumente der Klammer (hier  $\Psi$ ) Glattheit und schnellen Abfall im Unendlichen fordert, wodurch das andere (hier das “Basis”-Element zu  $x$ ) eine so genannte verallgemeinerte Funktion (Distribution) sein darf. Diese Zusatzstruktur nennt man auch einen “aufgetakelten” Hilbertraum<sup>3</sup>. Allerdings ist der analytische Aufwand, hier nebenbei Distributionen einzuführen erheblich und der Gewinn für unsere Zwecke Null. Ich verzichte also darauf.

Diracs Formalismus war gedacht als die Lösung eines zentralen technischen Problems der frühen Quantenmechanik: Wie bekommt man diskrete und kontinuierliche Größen in einen einheitlichen Formalismus? Nur funktioniert diese Lösung leider nicht sehr gut. Die Notation fängt schon bei entarteten Eigenwerten an zu humpeln und ist eine Katastrophe für Operatoren mit singulär stetigem Spektrum. Die alternative Lösung dieses Problems ist von Neumanns Einführung des abstrakten Hilbertraums [?], den ich genauso gut als diskreten und als kontinuierlichen Integrationsraum konkretisieren kann. Diese Lösung geht nun mathematisch problemlos auf und wir schließen uns ihr deshalb an.

---

<sup>3</sup>Engl.: rigged Hilbert space

Die **Spur**<sup>4</sup> eines Operators spielt in der Quantenmechanik eine wichtige Rolle. Die Spur eines Operators  $A$  auf einem endlich dimensionalen Hilbertraum  $\mathcal{H}$  definieren wir als

$$\mathrm{tr} A = \sum_x \langle x|A|x \rangle, \quad (2.49)$$

wobei  $x$  über die Indizes einer Orthonormalbasis läuft. Wenn  $A : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$  und  $B : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1$  rechnet man leicht nach [Ü!], dass

$$\mathrm{tr}_2(AB) = \mathrm{tr}_1(BA), \quad (2.50)$$

wobei der Index an der Spur nur daran erinnert, auf welchem der beiden Hilberträume die Spur zu nehmen ist. Speziell ist damit die Spur unabhängig von der gewählten Basis, denn jede andere Basis ist ja von der Form  $U|x\rangle$  für einen geeigneten unitären Operator  $U$  und die damit berechnete Spur gleich  $\mathrm{tr}(U^*AU) = \mathrm{tr}(AUU^*) = \mathrm{tr} A$ . Eine analoge Rechnung zeigt auch, dass die Spur nicht in einer Orthonormalbasis ausgewertet werden muss, das heißt eine Eigenschaft des linearen Operators  $A$  ohne Bezug zum Skalarprodukt ist. Dann darf man allerdings nicht die Definition (2.49) verwenden, sondern braucht zu einer nicht notwendig orthonormierten Basis  $\varphi_x$  noch die duale Basis  $\varphi^x$ , die  $\langle \varphi^x, \varphi_y \rangle = \delta_{xy}$  erfüllt. Damit ist dann die Spur  $\mathrm{tr} A = \sum_x \langle \varphi^x, A\varphi_x \rangle$ .

In unendlich dimensionalen Vektorräumen müssen wir uns mit der Konvergenz der Summe (2.49) auseinandersetzen. Wenn  $P$  ein endlich dimensionaler Projektor ist, dann ist immerhin  $\mathrm{tr} PAP$  als Spur über den endlich dimensionalen Teilraum  $P\mathcal{H}$  wohl definiert. Wir setzen also

$$\mathrm{tr} A = \lim_{P \nearrow \mathbb{1}} \mathrm{tr} PAP, \quad (2.51)$$

wobei der Limes über die wachsende Familie von endlich dimensionalen Projektoren  $P$  geht. Die Existenz dieses Limes bedeutet, dass es für jedes  $\varepsilon > 0$  einen endlich dimensionalen Teilraum  $P_\varepsilon$  gibt, sodass für alle  $P \supset P_\varepsilon$   $|\mathrm{tr} PAP - \mathrm{tr} P_\varepsilon A P_\varepsilon| \leq \varepsilon$ . In diesem Fall nennt man  $A$  einen **Spurklasse-Operator**. Für solche Operatoren ist dann auch die Summe (2.49) für beliebige Basen absolut konvergent und unabhängig von der zur Auswertung benutzten Basis. Umgekehrt reicht für positive Operatoren  $A$  die Konvergenz *einer* solchen Summe. Das Produkt eines Spurklasse-Operators mit einem beliebigen beschränkten Operator ist wieder Spurklasse.

Für die Quantenmechanik lernen wir daraus: Zunächst ist jeder Dichteoperator  $\rho$  ein Spurklasse-Operator, ebenso das Produkt  $\rho A$  mit  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ . Also ist der Erwartungswert-Ausdruck  $\mathrm{tr} \rho A$  definiert. Wenn  $A \geq 0$ , also  $A = B^*B$ , ist wegen (2.50)  $\mathrm{tr} \rho A = \mathrm{tr} B\rho B^* \geq 0$ , weil mit  $\rho$  auch  $B\rho B^*$  positiv ist. Für einen Detektoroperator  $F$  mit  $0 \leq F \leq \mathbb{1}$  ist damit  $\mathrm{tr} \rho F \in [0, 1]$ , also ein für Wahrscheinlichkeiten erlaubter Wert. Wenn  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  können wir das Ket  $|\Psi\rangle$  mit dem restlichen Produkt vertauschen, erhalten also  $\mathrm{tr} \rho A = \mathrm{tr} \langle\Psi|A|\Psi\rangle$ . Dieser Ausdruck ist jetzt die Spur im eindimensionalen Hilbertraum  $\mathbb{C}$ , also die Summe der Diagonalelemente einer  $1 \times 1$ -Matrix, die wir mit diesem einzigen Matrixelement identifizieren. Damit ist also  $\mathrm{tr} \rho A = \langle\Psi|A|\Psi\rangle$ .

---

<sup>4</sup>Engl.: trace

Wenn  $P$  ein Projektor ist, können wir die Spur  $\text{tr}(P)$  in einer Basis auswerten, die aus einer Basis des zugehörigen Teilraums  $P\mathcal{H}$  und einer Basis des Orthogonalraums  $(\mathbb{1} - P)\mathcal{H}$  zusammengesetzt ist. Wir erhalten also für Projektoren

$$\text{tr}(P) = \dim(P\mathcal{H}) , \quad (2.52)$$

was natürlich auch unendlich sein kann.

## 2.2.4 Diagonalisierung und Funktionalkalkül

Für viele Rechnungen in der Quantenmechanik müssen Operatoren “diagonalisiert” werden. Wie allgemein in der linearen Algebra bedeutet dies die Transformation auf eine besonders einfache Gestalt. Der einfachste Fall sind wieder endliche Matrizen, also Operatoren in einem Raum  $\ell^2(\{1, \dots, N\})$  für endliches  $N$ . Ein diagonaler Operator  $A$  hat per Definition Matrixelemente der Form  $A_{nm} = \langle \varphi_n, A\varphi_m \rangle = \delta_{nm}a_m$ , wobei  $a_1, \dots, a_N$  die diagonalen Matrixelemente sind. Die “Wellenfunktionen” in diesem Raum, also Vektoren  $\Psi \in \mathbb{C}^N$ , fassen wir als Funktionen  $\Psi : \{1, \dots, N\} \rightarrow \mathbb{C}$  auf. Dann wirkt ein diagonaler Operator wie

$$(A\Psi)(n) = \sum_m A_{nm}\Psi(m) = a_n\Psi(n) . \quad (2.53)$$

Mit anderen Worten:  $A$  ist ein Multiplikationsoperator, der die Wellenfunktion an jeder Stelle “ $n$ ” mit dem dortigen Wert  $a_n$  einer Funktion  $a$  multipliziert. Diagonalisierung bedeutet nun das Auffinden einer invertierbaren Matrix  $S$  sodass  $SAS^{-1}$  ein diagonaler Operator ist. Wir werden uns (fast) ausschließlich für den Fall interessieren, dass diese Transformation sogar durch einen *unitären* Operator  $S$  geschieht (dann ist  $S^{-1} = S^*$ ). Allgemein bedeutet für uns also “**diagonalisieren** von  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ ” das Auffinden eines unitären Operators  $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{L}^2(X, \mu)$  für einen geeigneten Maßraum  $(X, \mu)$ , sodass  $UAU^*$  der Multiplikationsoperator mit einer geeigneten Funktion  $a : X \rightarrow \mathbb{C}$  wird:

$$(UAU^*\Psi)(x) = a(x)\Psi(x) , \quad (2.54)$$

wobei  $a \in \mathcal{L}^\infty(X, \mu)$  eine beschränkte Funktion ist. (Wir werden  $\mathcal{L}^\infty(X, \mu)$  auch als Notation für den Raum der Multiplikationsoperatoren auf  $\mathcal{L}^2(X, \mu)$  verwenden).

Welche Operatoren sind nun diagonalisierbar in diesem Sinn? Zunächst ist klar, dass alle Multiplikationsoperatoren in einem gegebenen  $\mathcal{L}^2(X, \mu)$  miteinander vertauschen. Außerdem ist der Adjungierte eines Multiplikationsoperators wieder ein Multiplikationsoperator und zwar mit der konjugiert komplexen Funktion. Ein diagonalisierbarer Operator  $A$  vertauscht also mit seinem Adjungierten  $A^*$ , ist also “normal”. Die Umkehrung ist auch richtig, aber die Argumentation ist viel schwieriger. Sie läuft so, dass man sich die kommutative Algebra  $\mathcal{A}$  ansieht, die von einem normalen Operator  $A$  und  $A^*$  erzeugt wird und die Darstellungstheorie für kommutative Algebren (genauer so genannte von Neumann-Algebren) im Hilbertraum benutzt. Ein angenehmer Nebeneffekt ist, dass man auch gleich den Fall mehrerer vertauschbarer Operatoren mit

erledigt. Das Fazit ist der so genannte **Spektralsatz** (bzw. eine der vielen möglichen Formulierungen):

Jede Familie  $\{A_j\} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$  von miteinander vertauschbaren normalen Operatoren lässt sich gemeinsam diagonalisieren, d.h. es gibt einen Maßraum  $(X, \mu)$  und einen unitären Operator  $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{L}^2(X, \mu)$ , sodass  $UA_jU^*$  für alle  $j$  ein Multiplikationsoperator ist.

Speziell bekommen wir also: jeder hermitesche und jeder unitäre Operator ist diagonalisierbar. Dies ist die Konsequenz, die wir am häufigsten anwenden werden. Die ursprüngliche Formulierung des Spektralsatzes durch von Neumann bezog sich übrigens auch auf einen einzelnen hermiteschen Operator.

Die Verallgemeinerung auf mehrere Operatoren ist keine akademische Kraftübung: ein Standardbeispiel sind die Ortsoperatoren  $Q_j$ ; diese liegen ja schon als Multiplikationsoperatoren vor. Ein weiteres wichtiges Beispiel ist der Hamiltonoperator, das Drehimpulsquadrat und eine Drehimpulskomponente beim Wasserstoffproblem. In diesem Beispiel ist es gerade wichtig für die Lösung des Problems einen möglich großen Satz vertauschbarer Operatoren zu finden. Solche maximalen Sätze lassen sich leicht charakterisieren: Eine  $*$ -Unteralgebra  $\mathcal{A} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$  ist **maximal abelsch** genau dann, wenn es einen unitären Operator  $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{L}^2(X, \mu)$  gibt, sodass  $U\mathcal{A}U^* = \mathcal{L}^\infty(X, \mu)$ . Hier bedeutet abelsch, dass alle Elemente  $A \in \mathcal{A}$  miteinander vertauschen und, da es sich um eine  $*$ -Algebra handelt, dass auch alle Elemente mit den Adjungierten  $A^*$  vertauschen. Maximalität bedeutet, dass jedes Element, das mit allen  $A \in \mathcal{A}$  vertauscht, bereits selbst in  $\mathcal{A}$  liegt. Durch Diagonalisierung einer solchen Menge von Operatoren erhält man also den Raum *aller* Multiplikationsoperatoren auf  $X$ . Wir können diesen Satz auch umkehren: die Algebra der Funktionen des Ortes ist maximal abelsch; also sind alle Operatoren, die mit allen Ortsoperatoren vertauschen, bereits selber Funktionen des Ortes.

Bei weitem die wichtigste Konsequenz aus der Diagonalisierbarkeit normaler Operatoren ist der **Funktionalkalkül** für Operatoren, der es erlaubt, "Funktionen von Operatoren" ebenso leicht zu bilden wie entsprechende Funktionen von Zahlen. Betrachten wir gleich  $N$  vertauschbare normale Operatoren  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ . Sei nun außerdem eine messbare Funktion  $F : \mathbb{C}^N \rightarrow \mathbb{C}$  gegeben. Wir wollen dann einen Operator  $F(A_1, \dots, A_N)$  definieren. Wären die  $A_j$  Multiplikationsoperatoren, so könnten wir einfach die Funktion  $F$  an jedem Punkt auf die Funktionswerte anwenden. Durch gemeinsame Diagonalisierung können wir dieses Verfahren auch allgemein anwenden: Sei  $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{L}^2(X, \mu)$  der Operator, sodass  $UA_jU^*$  der Multiplikationsoperator mit  $a_j : X \rightarrow \mathbb{C}$  ist. Wir definieren dann

$$(U F(A_1, \dots, A_N) U^* \Psi)(x) = F(a_1(x), \dots, a_N(x)) \Psi(x) . \quad (2.55)$$

Da  $U$  ein Isomorphismus ist, ist ja hierdurch auch der Operator  $F(A_1, \dots, A_N)$  bestimmt.

Betrachten wir ein paar wichtige Beispiele: Wenn  $H$  ein hermitescher Operator ist,

dann ist  $UHU^*$  auch hermitesch, also die Multiplikation mit einer reellen Funktion. Bilden wir von diesem Operator die Funktion  $F(\eta) = \exp(-it\eta/\hbar)$ , also nach unserer Notation den Operator  $U_t = \exp(-itH/\hbar)$ . Der Multiplikationsoperator nach (2.55) ist dann ersichtlich die Multiplikation mit einer  $x$ -abhängigen Phase, also unitär. Damit ist auch  $U_t$  unitär. Wir haben damit den Zeitentwicklungsoperator aus dem Hamiltonoperator konstruiert. Bei beschränktem  $H$  ist dies natürlich ganz das gleiche wie die Definition

$$\exp(-itH/\hbar) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{-it}{\hbar} \right)^n H^n . \quad (2.56)$$

Die Gleichheit sieht man wieder am besten durch Diagonalisieren, also für Multiplikationsoperatoren.

Eine weitere wichtige Anwendung sind die so genannten **Spektralmaße**: Seien also wieder  $A_1, \dots, A_n$  vertauschbare normale Operatoren und  $S \subset \mathbb{C}^N$  eine messbare Menge. Dann können wir die zugehörige Indikatorfunktion der Operatoren bilden, also

$$P = \chi_S(A_1, \dots, A_N) . \quad (2.57)$$

(Eine solche Definition wäre übrigens mit Potenzreihen völlig hoffnungslos). Da der Multiplikationsoperator  $UPU^*$  in (2.55) an jeder Stelle nur mit Null oder mit Eins multiplizieren kann, ist dies ein Projektor: offensichtlich hermitesch und  $P^2 = P$ . Die Additivität von Indikatorfunktionen bei disjunkten Vereinigungen überträgt sich sofort auf diese Projektoren. Als Funktion von  $S \subset \mathbb{C}$  haben wir also ein projektorwertiges Maß. Da ein Projektor auch die Ungleichung  $0 \leq P \leq \mathbb{1}$  erfüllt, kommt er auch als Detektoroperator in Frage. Damit erhalten wir für jede Dichtematrix  $\rho$ , also für jede Präparation, ein Wahrscheinlichkeitsmaß

$$\mathbb{P}(S) = \text{tr}(\rho \chi_S(A_1, \dots, A_N)) . \quad (2.58)$$

Genau so ein Maß liefert ein Experiment, bei dem der Messapparat in jedem Einzelexperiment  $N$  komplexe Zahlenwerte liefert (was natürlich das gleiche ist, wie  $2N$  reelle Messwerte. Allgemeiner nennen wir jede solche Zuordnung eines Wahrscheinlichkeitsmaßes zu jeder Präparation ein **Observable**. Wir halten also fest: zu jedem  $N$ -tupel vertauschbarer normaler Operatoren gehört eine durch das Spektralmaß definierte projektorwertige Observable. Bei den meisten Anwendungen betrachtet man wieder nur einen einzigen hermiteschen Operator  $A$ , der dann eine Wahrscheinlichkeitsverteilung reeller Zahlen liefert. Das Standardbeispiel für eine Observable mit mehreren Operatoren ist wiederum die Ortsobservable.

Die Teilmenge von  $\mathbb{C}^N$ , auf der das Spektralmaß (2.57) von Null verschieden ist, nennt man das **Spektrum**  $\text{spec}(A_1, \dots, A_N)$  der Operatoren. Da einzelne Punkte ja oft das Gewicht Null haben, brauchen wir eine etwas genauere Definition: Das Spektrum besteht aus denjenigen Punkten  $\lambda \in \mathbb{C}^N$ , sodass für jedes  $\varepsilon > 0$  der Spektralprojektor (2.57) zur Kugel  $S = S_\varepsilon$  vom Radius  $\varepsilon$  um  $\lambda$  von Null verschieden ist. Das ist im Wesentlichen die Menge der Funktionswerte  $\{(a_1(x), \dots, a_N(x)) \in \mathbb{C}^N \mid x \in X\}$ , wobei Ausreißer, die nur mit  $\mu$ -Maß Null vorkommen, nicht gezählt werden. Eine Konsequenz

der Definition ist, dass das Spektrum stets eine abgeschlossene Teilmenge von  $\mathbb{C}^N$  ist. Für die Operatoren mit den Eigenschaften in der Tabelle zu Beginn von Abschnitt 2.2.3 erfüllt jeder Punkt  $a \in \text{spec}(A)$  die dort für Eigenwerte angegebenen Einschränkungen, wie man leicht durch Untersuchung der entsprechenden Multiplikationsoperatoren sieht. Einzige Ausnahme in dieser Tabelle sind die Isometrien, die im Allgemeinen nicht normal sind, sodass die Transformation auf einen Multiplikationsoperator fehlschlägt.

Betrachten wir den Fall eines einzelnen normalen Operators  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  genauer. Die Punkte  $z \in \mathbb{C}$ , die *nicht* zum Spektrum gehören, haben (wegen der Abgeschlossenheit von  $\text{spec}(A)$ ) auch einen endlichen Abstand von  $\text{spec}(A)$ . Für diese Punkte ist also  $|(z - \lambda)^{-1}| \leq C < \infty$  für alle  $\lambda \in \text{spec}(A)$ . Also ergibt die Anwendung dieser Funktion auf  $A$  den beschränkten Operator

$$R(z) = (z\mathbb{1} - A)^{-1}, \quad (2.59)$$

die so genannte **Resolvente** von  $A$ . Dies ist übrigens der Ausgangspunkt zur Definition des Spektrums auch für nicht normale Operatoren: Es wird allgemein definiert als Komplement der “Resolventenmenge”, d.h. der Menge der  $z \in \mathbb{C}$  für die der Operator  $(z\mathbb{1} - A)$  ein beschränktes Inverses hat. Wir betrachten aber weiterhin nur normale Operatoren.

Zunächst gehört jeder **Eigenwert**  $\lambda$  von  $A$  zu  $\text{spec}(A)$ , denn dort hat ja gerade  $(\lambda\mathbb{1} - A)$  einen nicht-trivialen Kern, ist also nicht invertierbar. Der Projektor auf den Eigenraum zu diesem Wert ist genau der Spektralprojektor  $\chi_S$  zu der einelementigen Menge  $S = \{\lambda\}$ : Es gilt ja  $(A - \lambda)\chi_{\{\lambda\}}(A) = 0$ , wie bei Multiplikationsoperatoren sofort klar ist. Wenn also  $\Psi \neq 0$  im entsprechenden Teilraum liegt, sodass  $\chi_{\{\lambda\}}(A)\Psi = \Psi$ , dann gilt auch  $A\Psi = \lambda\Psi$ . Die Menge aller Eigenwerte bezeichnet man als das **Punktspektrum**  $\text{spec}_{\text{pp}}(A)$  des Operators (der Index steht für “pure point”). Den abgeschlossenen Teilraum, der von allen Eigenvektoren aufgespannt wird, bezeichnen wir mit  $\mathcal{H}_{\text{pp}}(A) \subset \mathcal{H}$ . Für  $\Psi \in \mathcal{H}_{\text{pp}}(A)$  ist das Wahrscheinlichkeitsmaß  $\mathbb{P}(S) = \langle \Psi, \chi_S(A)\Psi \rangle$  die Summe von Punktmaßen.

Entsprechend definieren wir den Teilraum  $\mathcal{H}_{\text{ac}}$  für das **kontinuierliche Spektrum** (“ac” steht für “absolutely continuous”) als den Teilraum der  $\Psi$ , für die das Wahrscheinlichkeitsmaß  $\mathbb{P}(S) = \langle \Psi, \chi_S(A)\Psi \rangle$  eine Dichtefunktion bezüglich des Lebesguemaßes hat. Das Spektrum des Operators  $A$ , eingeschränkt auf  $\mathcal{H}_{\text{ac}}$  nennen wir das kontinuierliche Spektrum  $\text{spec}_{\text{ac}}(A)$ . Jede Komponente des Ortsoperators ist ein Beispiel für einen Operator mit rein kontinuierlichem Spektrum  $\text{spec}_{\text{ac}}(A) = \mathbb{R}$ ,  $\text{spec}_{\text{pp}}(A) = \emptyset$ .

Nur der Vollständigkeit halber: neben den Teilräumen  $\mathcal{H}_{\text{ac}}(A)$  und  $\mathcal{H}_{\text{pp}}(A)$  kann es noch einen dritten Teilraum  $\mathcal{H}_{\text{sc}}$  zum so genannten **singulär stetigen Spektrum geben**. Für die Hamiltonoperatoren, die wir betrachten, kommen wir allerdings mit dem kontinuierlichen Spektrum und den Eigenwerten aus. Die Berechnung des Spektrums des Hamiltonoperators ist oft ein wichtiger Schritt in der Untersuchung eines quantenmechanischen Systems.

Eine wichtige Anwendung des Spektralsatzes betrifft Dichtematrizen  $\rho$ : Man sieht



leicht, dass sich absolut oder singulär stetiges Spektrum nicht mit der Spurklasseneigenschaft verträgt. Normale Spurklasseoperatoren haben also reines Punktspektrum. In einer passenden Diagonalisierung in  $\ell^2(\mathbb{N})$  sieht man auch, dass die Eigenwerte (mit Wiederholung gemäß Vielfachheit) eine summierbare Folge bilden müssen. Also: jede Dichtematrix  $\rho$  hat eine Zerlegung

$$\rho = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k |k\rangle\langle k|, \quad (2.60)$$

wobei die  $|k\rangle$  eine Basis bilden,  $\lambda_k \geq 0$ , und  $\sum_k \lambda_k = 1$ . Jede Dichtematrix lässt sich also als konvexe Mischung von orthogonalen reinen Zuständen schreiben.

### 2.2.5 Positivität

Es gibt drei äquivalente Charakterisierungen für die Positivität eines Operators  $A$  (geschrieben  $A \geq 0$ ). Der Wechsel zwischen diesen äquivalenten Aussagen ist eine häufige Beweistechnik. Es ist daher nützlich, sie einmal kompakt zusammenzustellen. Die erste Aussage hatten wir schon als Definition verwendet.

Für einen Operator  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  ist die Positivität  $A \geq 0$  äquivalent durch jede der drei folgenden Aussagen charakterisiert:

- (1) Für alle  $\Psi \in \mathcal{H}$ :  $\langle \Psi, A\Psi \rangle \geq 0$ .
- (2)  $A = A^*$  und  $\text{spec}(A) \subset \mathbb{R}_+$ .
- (3) Es gibt ein  $B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  mit  $A = B^*B$ .

*Beweis:* Zum Beweis bemerken wir zunächst, dass aus  $\langle \Psi, A\Psi \rangle \in \mathbb{R}$  für alle  $\Psi$  schon  $A = A^*$  folgt: Es ist ja  $\overline{\langle \Psi, A\Psi \rangle} = \langle A\Psi, \Psi \rangle = \langle \Psi, A^*\Psi \rangle$ , sodass sich diese Voraussetzung in  $\langle \Psi, (A - A^*)\Psi \rangle = 0$  für alle  $\Psi$  umschreiben lässt. Die Aussage, dass die diagonalen Matrixelemente bereits alle anderen bestimmen, folgt aus der folgenden **Polarisations-Identität**, die allgemein für Sesquilinearformen in komplexen Vektorräumen (aber nicht(!) in reellen Räumen mit Skalarprodukt) gilt: Es ist

$$\begin{aligned} \langle \Psi, X\Phi \rangle &= \frac{1}{4} \left( \langle \Psi + \Phi, X(\Psi + \Phi) \rangle - \langle \Psi - \Phi, X(\Psi - \Phi) \rangle \right. \\ &\quad \left. - i\langle \Psi + i\Phi, X(\Psi + i\Phi) \rangle + i\langle \Psi - i\Phi, X(\Psi - i\Phi) \rangle \right) \end{aligned} \quad (2.61)$$

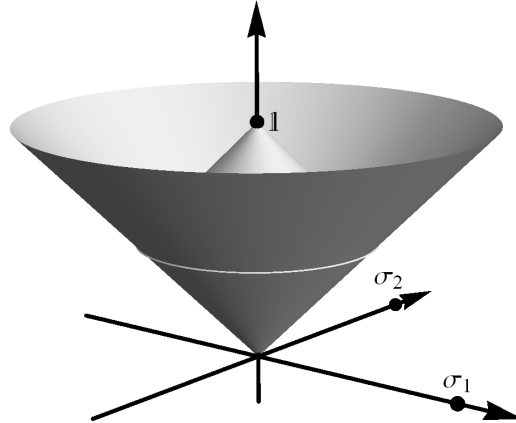
Wenn also für  $X = A - A^*$  die rechte Seite stets verschwindet, gilt auch  $X\Phi = 0$  für alle  $\Phi$  und schließlich  $X = A - A^* = 0$ .

Für einen hermiteschen Operator können wir nun den Spektralsatz anwenden und somit annehmen, dass  $A$  ein Multiplikationsoperator ist. Damit ist aber  $\langle A\Psi, \Psi \rangle = \int \mu(dx) a(x) |\Psi(x)|^2$ . Wäre nun  $a(x)$  auf einer Mengen von positivem Maß negativ, könnten wir dort eine Wellenfunktion  $\Psi$  wählen, die das Integral negativ macht. Entsprechend schließen wir aus, dass  $a(x)$  auf einer Nicht-Nullmenge nicht verschwindenden Imaginärteil besitzt. Es ist also fast überall  $a(x) \geq 0$  und damit  $\text{spec}(A) \subset \mathbb{R}_+$ .

Um von (2) nach (3) zu kommen, wenden wir den Spektralkalkül an und setzen  $B = f(A)$  mit  $f(t) = \sqrt{|t|}$ . Wegen  $f(t)^2 = t$  auf dem Spektrum von  $A$  gilt also  $B^2 = A$ . Diese Wurzel  $B$  aus einem positiven Operator ist eindeutig dadurch bestimmt, dass  $B \geq 0$  ist, und wird auch einfach als die **Wurzel**  $\sqrt{A}$  bezeichnet.

Der Schritt von (3) nach (1) ist wieder trivial, da  $\langle \Psi, B^* B \Psi \rangle = \langle B \Psi, B \Psi \rangle = \|B \Psi\|^2 \geq 0$ . Damit sind die obigen Aussagen als äquivalent gezeigt. ■

Für  $2 \times 2$ -Matrizen ist manchmal eine Isomorphie mit der Relativitätstheorie hilfreich: Wir parametrisieren den Raum der hermiteschen  $2 \times 2$ -Matrizen als  $A = \sum_{\mu=0}^3 a_{\mu} \sigma_{\mu}$  mit  $a_{\mu} \in \mathbb{R}$ , wobei wir  $\sigma_0 = \mathbb{1}$  setzen. Jede hermitesche Matrix  $A$  entspricht somit einem Punkt  $a = (a_0, \dots, a_3) \in \mathbb{R}^4$  im Minkowski-Raum. Dabei gilt  $A \geq 0$  genau dann wenn  $a$  zeitartig ist und  $a_0 \geq 0$ , also  $a$  kausal später liegt als der Ursprung. Tatsächlich ist  $\det A = \sum_{\mu} a^{\mu} a_{\mu} = a_0^2 - \sum_{k=1}^3 a_k^2$  das Lorentz-Quadrat. Die Abbildung  $A \mapsto W A W^*$  mit  $\det W = 1$  erhält dann die Positivität und das Lorentz-Quadrat, entspricht also einer Lorentz-Transformation und für unitäres  $W$  einer Drehung [Ü!]. In Abb. 2.4 ist der Kegel dargestellt, zusammen mit dem Rückwärtskegel, der bei der  $\mathbb{1}$  angetragen ist. Der Schnitt der beiden Kegel stellt also die Detektoroperatoren  $F$  mit  $0 \leq F \leq \mathbb{1}$  dar. Die Schnittkante entspricht den eindimensionalen Projektoren, also wieder der Blochkugel.



**Abb. 2.4:** Der positive Kegel der hermiteschen  $2 \times 2$ -Matrizen, mit weggelassener 3-Richtung. Der Rückwärtskegel bei  $\mathbb{1}$  ist nur so weit gezeichnet, dass der Schnitt mit dem positiven Kegel sichtbar wird.

Eine direkte Konsequenz ist die Positivität aller Ausdrücke  $\text{tr}(\rho A)$  mit  $\rho \geq 0$  Spurklasse und  $A \geq 0$ , die ja in der Wahrscheinlichkeitsinterpretation eine zentrale Rolle

spielen: Es ist

$$\begin{aligned}\operatorname{tr} \rho A &= \operatorname{tr}(\sqrt{\rho}^2 \sqrt{A}^2) = \operatorname{tr}((\sqrt{A} \sqrt{\rho})(\sqrt{\rho} \sqrt{A})) = \operatorname{tr}((\sqrt{\rho} \sqrt{A})^*(\sqrt{\rho} \sqrt{A})) \\ &= \operatorname{tr} X^* X \quad \text{mit } X = \sqrt{\rho} \sqrt{A}.\end{aligned}\tag{2.62}$$

Offenbar ist die Spur dieses positiven Operators  $\geq 0$ . Wir können auch über den Fall der Gleichheit direkt etwas aussagen: Da  $\operatorname{tr} X^* X = \sum_{ij} |\langle i | X | j \rangle|^2 = 0$  das Verschwinden aller Matrixelemente von  $X$ , also  $X = 0$  zur Folge hat, folgt aus  $\rho \geq 0$ ,  $A \geq 0$  und  $\operatorname{tr}(\rho A) = 0$  bereits  $\rho A = \sqrt{\rho} X \sqrt{A} = 0$  und durch Adjunktion  $A \rho = 0$ .

Aus der Definition (1) folgt direkt, dass Positivität erhalten wird durch Abbildungen der Form  $X \mapsto A^* X A$ , d.h.,  $X \geq 0 \Rightarrow A^* X A \geq 0$ . Man kann auch sagen,  $X \mapsto A^* X A$  sei monoton. Dies kommt z.B. mit  $A$  unitär bei der Zeitentwicklung vor. Summen von solchen Abbildungen, also  $X \mapsto \sum_i A_i^* X A_i$  bilden die so genannten **vollständig positiven** Transformationen auf  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ , die in der Theorie der Messungen mit anschließender Weiterverarbeitung eine zentrale Rolle spielen [13.1]. Im Begriff ist schon angedeutet, dass es auch positivitätserhaltende lineare Transformationen gibt, die nicht so geschrieben werden können. Ein wichtiges Beispiel dafür ist die Matrix-Transposition.

Ein typisches Beispiel, wie die Monotonie genutzt werden kann, ist der Schluss

$$P \text{ Projektion und } P \geq A \geq 0 \Rightarrow A = P A = A P = P A P. \tag{2.63}$$

*Beweis:* In der Tat folgt ja aus der Ungleichung auch  $0 \leq (\mathbb{1} - P) A (\mathbb{1} - P) \leq (\mathbb{1} - P) P (\mathbb{1} - P) = 0$ , also  $0 = (\mathbb{1} - P) A (\mathbb{1} - P) = X^* X$  mit  $X = \sqrt{A} (\mathbb{1} - P)$ . Damit ist auch  $A (\mathbb{1} - P) = \sqrt{A} X = 0$ , also  $A = A P$  und  $A = A^* = (A P)^* = P A$  und wiederum  $A = (A) P = (P A) P$ . ■

Es liegt nahe zu vermuten, dass auch der Funktionalkalkül mit monotonen Funktionen monoton ist, dass also für eine monoton wachsende Funktion aus  $0 \leq A \leq B$  auch  $0 \leq f(A) \leq f(B)$  folgt. Dies ist zwar für vertauschende Operatoren  $A, B$  offenbar richtig, aber im allgemeinen falsch. Funktionen  $f$  mit dieser Eigenschaft heißen **operator-monoton** [2]. Dazu gehören  $f(t) = \sqrt{t}$  und  $f(t) = t/(1+t)$ , aber *nicht*  $f(t) = t^2$  [Ü2.6].

## 2.2.6 Unbeschränkte Operatoren

Beschränkte Operatoren sind ja durch die Abschätzung  $\|A\Psi\| \leq \|A\| \|\Psi\|$  gekennzeichnet, also gleichmäßig stetig. Deshalb genügt es und ist oft praktisch, einen Operator erst einmal auf einem dichten Unterraum zu definieren. Das ist eine Menge  $\mathcal{K} \subset \mathcal{H}$ , die zwar unter linearen Operationen abgeschlossen ist aber nicht unbedingt unter Limiten. “Dicht” bedeutet, dass jeder Vektor  $\Psi \in \mathcal{H}$  als  $\lim_n \Psi_n$  darstellbar ist mit  $\Psi_n \in \mathcal{K}$ .

Wegen der Stetigkeit können wir dann durch  $A \lim_n \Psi_n = \lim_n A \Psi_n$  den Operator  $A$  auch auf ganz  $\mathcal{H}$  definieren. Ein Beispiel für dieses Vorgehen wird die Definition der Fourier-Transformierten [2.4] sein.

Viele wichtige Operatoren der Quantenmechanik (Ort, Impuls, Hamiltonoperator) sind aber nicht beschränkt. Wir möchten deshalb hier nur kurz die wichtigsten Unterschiede zum beschränkten Fall zusammenfassen. Der erste augenfällige Unterschied ist, dass wir den oben angesprochenen Prozess der stetigen Fortsetzung nicht mehr verwenden können. In der Regel sind unbeschränkte Operatoren also nur auf einem dichten Unterraum, dem **Definitionsbereich**  $\text{dom } A$  definiert. Typisches Beispiel ist der Ortsoperator: Er wirkt durch Multiplikation mit der Koordinate  $x$  und da dies eine unbeschränkte Funktion ist, ist auch der Operator unbeschränkt. Aus  $\Psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx)$  folgt offenbar nicht, dass auch die Funktion  $x \mapsto x\Psi(x)$  quadratintegrabel ist (Beispiel:  $\Psi(x) = 1/(1+|x|)$ ). Bei Multiplikationsoperatoren ist damit die nötige Einschränkung auch schon genau benannt. Wenn  $(A\Psi)(x) = a(x)\Psi(x)$  ein Multiplikationsoperator auf  $\mathcal{L}^2(X, \mu)$  ist, setzen wir

$$\text{dom } A = \left\{ \Psi \in \mathcal{L}^2(X, \mu) \mid \int \mu(dx) |a(x)|^2 |\Psi(x)|^2 < \infty \right\}. \quad (2.64)$$

Der Begriff der Diagonalisierung lässt sich mit minimalen Änderungen auch für unbeschränkte Operatoren verwenden, allerdings muss man dabei auf die Definitionsbereiche achten. Minimalforderung an den diagonalisierenden unitären Operator  $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{L}^2(X, \mu)$  ist, dass für  $\Psi \in \text{dom } A$  und fast alle  $x$  die Gleichung  $(UA\Psi)(x) = a(x)(U\Psi)(x)$  gilt. Dann stellt sich heraus, dass ein Operator verschiedene Diagonalisierungen haben kann. Es ist also möglich, dass der Definitionsbereich, obgleich dicht, irgendwie zu klein gewählt wurde. Das würde ausgeschlossen, wenn man bei der Diagonalisierung auch fordert, dass die Definitionsbereiche passen. Wenn wir  $\hat{A}$  den Operator der Multiplikation mit der unbeschränkten Funktion  $a$  nennen und  $\text{dom } \hat{A}$  nach (2.64) definieren, können wir beispielsweise fordern, dass  $U \text{ dom } A = \text{dom } \hat{A}$ . Einen Operator  $A$ , der eine solche Diagonalisierung besitzt nennen wir dann **normal** bzw. **selbstadjungiert**, wenn die Funktion  $a$  reellwertig ist. Für solche Operatoren funktioniert der Funktionalkalkül wie für beschränkte Operatoren auch. Insbesondere ist für einen selbstadjungierten Operator  $H$  auch die unitäre Gruppe  $U_t = \exp(-iHt/\hbar)$  für alle Zeiten durch den Funktionalkalkül definiert.

Die hier gegebene Definition ist vom Ergebnis her gedacht, hilft aber nicht unbedingt dabei, diese Eigenschaft einem konkreten Operator anzusehen. Für Ort und Impuls ist sie völlig ausreichend, da in der üblichen Darstellung der Ort eh schon ein Multiplikationsoperator ist und für den Impuls die diagonalisierende Transformation, die Fourier-Transformation, bekannt ist. Für Hamiltonoperatoren, zum Beispiel in der üblichen Form (1.22), aber mit einem unbeschränkten Potential, ist das oft überhaupt nicht offensichtlich. Dies ist eine Schwierigkeit, die schon in der klassischen Mechanik auftritt: Wir hatten gesehen, dass Selbstadjungiertheit die Existenz der Zeitentwicklungsoperatoren für alle Zeiten  $t$  beinhaltet. Aber auch in der klassischen Mechanik ist die Existenz der Dynamik für alle Zeit keineswegs immer sofort klar — mit genügend

stark wegtreibenden Potentialen kann ein klassisches Teilchen in endlicher Zeit nach Unendlich gelangen. Wir werden im Allgemeinen einfach davon ausgehen, dass der Hamiltonoperator selbstadjungiert ist und von diesem Abschnitt nur mitnehmen, dass die Angabe des Definitionsbereichs ein wesentlicher Teil der Definition eines Operators ist. Zu dieser Spezifikation gehören insbesondere Randbedingungen.

Wie aber kann man einem Operator, der mit Definitionsbereich und Abbildungsvorschrift gegeben ist, ansehen, ob er als Hamiltonoperator taugt? Dazu müssen wir den Begriff des adjungierten Operators auf den unbeschränkten Fall erweitern. Betrachten wir Skalarprodukte der Form  $\langle \Phi, A\Psi \rangle$ , wobei natürlich  $\Psi \in \text{dom } A$  gelten muss. Damit wir dies als  $\langle A^*\Phi, \Psi \rangle$  schreiben können, mit einem geeigneten Vektor “ $A^*\Phi$ ”, muss nach dem Satz von Riesz der Ausdruck als Funktion von  $\Psi$  ein stetiges lineares Funktional sein. Das wird für einige  $\Phi$  der Fall sein (wir sagen dann  $\Phi \in \text{dom } A^*$ ), aber nicht für alle. In dem Fall ist aber auch  $A^*\Phi$  durch die Angabe der Skalarprodukte eindeutig fixiert, jedenfalls wenn der Raum  $\text{dom } A$  dicht ist. Wenn also  $A$  ein dicht definierter Operator ist, setzen wir

$$\text{dom } A^* = \left\{ \Phi \in \mathcal{H} \mid \exists \Phi' \in \mathcal{H} \forall \Psi \in \text{dom } A : \langle \Phi, A\Psi \rangle = \langle \Phi', \Psi \rangle \right\}. \quad (2.65)$$

Dann ist für  $\Phi \in \text{dom } A^*$  der Vektor  $\Phi'$  eindeutig definiert und wir setzen  $A^*\Phi = \Phi'$ . Für einen unitär diagonalisierbaren Operator ist dann gerade  $\text{dom } A^* = \text{dom } A$  nach (2.64) und  $A^*$  wirkt durch Multiplikation mit der komplex konjugierten Funktion. Speziell für eine reelle Funktion impliziert die oben gegebene Definition von Selbstadjungiertheit  $A = A^*$ . Wir werden sehen, dass auch die Umkehrung gilt. Auch dies ist aber wieder ein Kriterium, dass nur nützlich ist, wenn man den genauen Definitionsbereich kennt. Für eine hilfreiche Definition betrachten wir eine Korrespondenz zwischen Operatoren und Unterräumen von  $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$ : Als **Graph** eines Operators bezeichnen wir den Unterraum

$$G(A) = \left\{ \Psi \oplus A\Psi \mid \Psi \in \text{dom } A \right\}. \quad (2.66)$$

Ein Unterraum  $\mathcal{G} \subset \mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$  kommt als Graph eines Operators genau dann in Frage, wenn  $0 \oplus \Phi \in \mathcal{G}$  impliziert, dass  $\Psi = 0$ : Der Nullvektor darf keine anderen Bilder haben als 0. Bezeichnen wir als  $S$  den Operator, der auf  $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$  als  $S(\Psi \oplus \Phi) = \Phi \oplus (-\Psi)$  wirkt. Dann ist die obige Definition des Adjungierten äquivalent zu  $G(A^*) = (SG(A))^\perp = S^*(G(A)^\perp)$ , womit die Adjunktion auf die Bildung eines Orthogonalkomplements zurückgeführt ist. Daraus ergibt sich für den Adjungierten des Adjungierten  $G(A^{**}) = G(A)^{\perp\perp} = \overline{G(A)}^{\|\cdot\|}$ , also der Normabschluss des Graphen. Dies muss nicht unbedingt wieder der Graph eines Operators sein ( $\text{dom } A^*$  muss nicht dicht sein), aber wenn dies der Fall ist, nennt man den zugehörigen Operator den **Abschluss** von  $A$  und  $A$  selbst abschließbar. Jeder Adjungierte  $A^*$  ist automatisch abgeschlossen ist, da  $G(A^*)$  als Orthokomplement immer abgeschlossen ist.

Speziell für Operatoren, die als Hamiltonoperatoren in Frage kommen, ist folgende Eigenschaft oft leicht nachprüfbar: Wir nennen  $A$  **symmetrisch** oder hermitesch, wenn  $\text{dom } A$  dicht ist und

$$\langle \Phi, A\Psi \rangle = \langle A\Phi, \Psi \rangle \quad \text{für alle } \Phi, \Psi \in \text{dom } A. \quad (2.67)$$

Dies ist gleichbedeutend mit  $G(A) \subset G(A^*)$ , was man auch kurz als  $A \subset A^*$  schreibt. Allgemein bedeutet eine Inklusion  $A \subset B$ , dass  $\text{dom } A \subset \text{dom } B$  und  $A\Phi = B\Phi$  für  $\Phi \in \text{dom } A$ . Hier gibt es nun zwei Möglichkeiten: entweder ist der Abschluss von  $G(A)$  schon gleich  $G(A^*)$ . Dann haben wir den Definitionsbereich  $\text{dom } A$  nur zufällig etwas zu klein gewählt und es gibt genau einen selbstadjungierten Operator  $\tilde{A} \supset A$ , nämlich  $\tilde{A} = A^*$ . In diesem Fall nennen wir  $A$  **wesentlich selbstadjungiert**<sup>5</sup>.  $A$  ist dann diagonalisierbar und wir können Funktionen von  $A$  einfach im Funktionalkalkül von  $A^*$  bilden. Die zweite Möglichkeit ist, dass der Abschluss von  $G(A)$  noch echt kleiner ist als  $G(A^*)$ . Solche Operatoren  $A$  sind noch nicht hinreichend genau spezifiziert, um als Hamiltonoperatoren zu dienen, und die Exponentialfunktion  $\exp(-iAt/\hbar)$  ist erst einmal nicht definiert. Erst wenn man genügend viele Elemente zum Definitionsbereich von  $A$  hinzunimmt, was den Definitionsbereich von  $A^*$  verkleinert, kann man Selbstadjungiertheit erreichen und die Inklusion  $A \subset A^*$  wird zur Gleichheit. Das ist aber auf verschiedene Weise möglich, sodass hier physikalischer Input gebraucht wird. Die einschlägige Theorie stammt natürlich von von Neumann [vN] und ist in Abschnitt 4.8.2 nachzulesen.

Für uns ist es oft wichtig, einen Operator aus zwei unbeschränkten Teilen zusammenzusetzen, also zum Beispiel den Hamiltonoperator mit Coulomb-Potential  $H = P^2/(2m) - \lambda|Q|^{-1}$  aus kinetische und potentieller Energie [5.5]. Man erwartet, dass dies funktioniert, wenn das Potential in geeigneter Weise eine kleine Störung der kinetischen Energie darstellt. Das Standardkriterium dafür gibt der Satz von Kato-Rellich [RS80, Thm. X.12]: Wenn  $A$  selbstadjungiert ist,  $\text{dom } B \supset \text{dom } A$ ,  $B$  symmetrisch auf  $\text{dom } A$  und wenn es Konstanten  $0 \leq a < 1$  und  $b$  gibt, sodass für  $\Psi \in \text{dom } A$

$$\|B\Psi\| \leq a \|A\Psi\| + b \|\Psi\| \quad , \quad (2.68)$$

dann ist  $A + B$  auf jedem Unterraum von  $\text{dom } A$  wesentlich selbstadjungiert, auf dem dies für  $A$  gilt. Man nennt dann  $B$  auch  $A$ -beschränkt (mit Schranke  $a$ ). Für beschränkte Operatoren  $B$  ist die Schranke  $a = 0$ , sie können also beliebig zu  $A$  addiert werden, ebenso Operatoren, die die Ungleichung (2.68) für *jedes*  $a > 0$  erfüllen. Diese nennt man infinitesimal  $A$ -beschränkt. Dafür ist das Coulomb-Potential relativ zur kinetischen Energie in 3 Dimensionen ein Beispiel.

✱

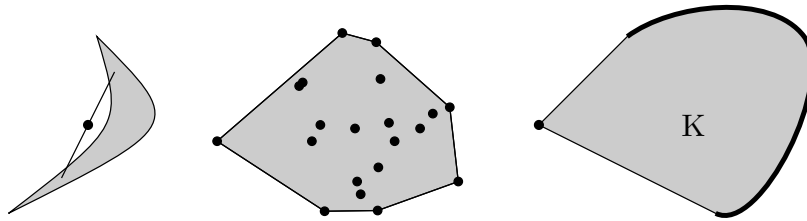
## 2.3 Konvexität

Hier sollen nur ein paar Grundbegriffe erläutert werden, die im Text mehr oder weniger unkommentiert verwendet werden. Eine **konvexe Menge** ist eine Teilmenge  $K$  in einem Vektorraum über  $\mathbb{R}$ , sodass mit  $x, y \in K$  und  $\lambda \in [0, 1] \subset \mathbb{R}$  auch  $\lambda x + (1-\lambda)y \in K$ . In Worten: zu je zwei Punkten in  $K$  ist auch die geradlinige Verbindungsstrecke ganz in

---

<sup>5</sup>Engl.: essentially self-adjoint

$K$  enthalten (siehe Abb. 2.5). Wenn eine beliebige Menge  $M$  gegeben ist, bezeichnet man als **konvexe Hülle**  $\text{conv } M$  die kleinste konvexe Menge, die  $M$  enthält, also die Menge der endlichen Konvexkombinationen  $\sum_i \lambda_i x_i$  mit  $x_i \in M$  und  $\lambda_i \geq 0$ ,  $\sum_i \lambda_i = 1$ . Wenn der umgebende Vektorraum eine (‘‘lokalkonvexe’’) Topologie hat, wie sie in endlich-dimensionalen Vektorräumen eindeutig durch die Topologie der Koordinaten gegeben ist, kann man auch von abgeschlossenen konvexen Mengen sprechen und entsprechend von der abgeschlossenen konvexen Hülle  $\overline{\text{conv}} M$ .



**Abb. 2.5:** Links: eine nicht konvexe Menge (der markierte Punkt müsste darin liegen). Mitte: Konvexe Hülle einer Menge zufälliger Punkte. Rechts: eine konvexe Menge mit markierten Extrempunkten.

**Extrempunkt** einer konvexen Menge ist ein Punkt  $x \in K$ , der nicht mitten auf einer echten Verbindungsstrecke liegt. Formal bedeutet dies, dass aus  $x = \lambda y + (1 - \lambda)z$ ,  $y, z \in K$  mit  $0 < \lambda < 1$  schon  $y = z = x$  folgt. Allgemeiner spricht man von **Seiten**<sup>6</sup> einer konvexen Menge. Dies sind konvexe Teilmengen  $F \subset K$ , sodass  $\lambda y + (1 - \lambda)z \in F$  mit  $0 < \lambda < 1$  schon  $y, z \in F$  folgt. Die Extrempunkte entsprechen also den einpunktigen Seiten  $F = \{x\}$ . Die **Dimension** einer konvexen Menge ist die Dimension des Unterraums, der von den Verbindungsvektoren  $x - y$  mit  $x, y \in K$  erzeugt wird. Man kann dies gut an einem **Polytop** verstehen, also einer Menge  $K = \text{conv } M$  mit  $M$  endlich. Beispiel ist ein Würfel mit 8 0-dimensionalen, 12 1-dimensionalen, 6 2-dimensionalen und einer 3-dimensionalen Seite. (Manchmal wird hier die Konvention der Dimensionszählung auch um 1 verschoben, sodass die leere Seite Dimension 0 bekommt.)

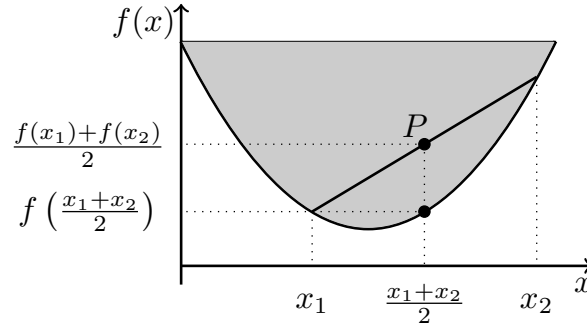
Der Satz von Krein-Milman besagt, dass kompakte konvexe Mengen viele Extrempunkte haben. Wenn  $E \subset K$  die Menge der Extrempunkte ist, dann gilt  $\overline{\text{conv}} E = K$ . Um einen beliebigen Punkt  $x \in K$  in Extrempunkte zu zerlegen, braucht man in  $n$  Dimensionen gerade  $n + 1$  Punkte (Satz von Caratheodory). In unendlicher Dimension muss man über Extrempunkte integrieren, was in der Choquet-Theorie [Phe66], [BR81, Ch. 4] studiert wird.

Eine **konvexe Funktion** auf einer konvexen Menge  $K$  (z.B. auf einem Vektorraum) ist per Definition eine Funktion  $f : K \rightarrow \mathbb{R}$ , die die Ungleichung

$$f\left(\sum_i \lambda_i x_i\right) \leq \sum_i \lambda_i f(x_i) \quad (2.69)$$

<sup>6</sup>Engl.: faces

erfüllt. Das ist äquivalent dazu, dass der **Supergraph**  $\{(x, t) | t \geq f(x)\}$  eine konvexe Menge ist (siehe Abb. 2.6). Hinreichend ist, dass die Hesse-Matrix von  $f$  (=Matrix der 2. Ableitungen) überall positiv im Sinne von Abschnitt 2.2.5 ist. Stetige konvexe Funktionen auf einer kompakten konvexen Menge nehmen ihr Maximum auf einem Extrempunkt an [Ü!]. Bei “konkaven Funktionen” sind alle Ungleichungen anders herum, d.h.,  $-f$  ist konvex. Der Begriff “konkave Menge” ist sinnlos (außer für “nicht konvex”).



**Abb. 2.6:** Supergraph einer konvexen Funktion. Dass der Punkt  $P$  stets im Graphen liegt, ist gleichbedeutend mit (2.69).

## 2.4 Fourier-Transformation

### 2.4.1 Diagonalisierung des Impulses

Wir hatten den Impulsoperator  $P_\nu$  in (1.6) geraten als den Operator, für den die ebene Welle  $\Psi(x) = \exp(ikx)$  Eigenvektor zum Eigenwert  $p_\nu = \hbar k_\nu$  ist. Nun ist eine ebene Welle zwar kein Element des Hilbertraums (nicht quadratintegrabel), die Diagonalisierung der  $P_\nu$  läuft aber dennoch darauf hinaus, eine beliebige Wellenfunktion als “Linearkombination” (bzw. als Integral) von ebenen Wellen darzustellen. Der unitäre Operator, der das tut, heißt **Fourier-Transformation**. Wir definieren  $\mathcal{F} : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n, dx) \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n, dp)$  und den adjungierten Operator  $\mathcal{F}^* : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n, dp) \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n, dx)$  durch die Integrale

$$(\mathcal{F}\Psi)(p) = (2\pi\hbar)^{-n/2} \int dx e^{-\frac{i}{\hbar}p \cdot x} \Psi(x) \quad (2.70)$$

$$(\mathcal{F}^*\hat{\Psi})(x) = (2\pi\hbar)^{-n/2} \int dp e^{\frac{i}{\hbar}p \cdot x} \hat{\Psi}(p) . \quad (2.71)$$

Dabei bedeutet der Punkt im Exponenten das Skalarprodukt zwischen Vektoren in  $\mathbb{R}^n$ . Dann ist

$$(P_\nu \mathcal{F}^* \hat{\Psi})(x) = (2\pi\hbar)^{-n/2} \int dp \hat{\Psi}(p) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\nu} e^{\frac{i}{\hbar}p \cdot x} = (\mathcal{F}^*(p_\nu \hat{\Psi}))(x) , \quad (2.72)$$



wobei  $p_\nu$  auch den entsprechenden Multiplikationsoperator in  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n, dp)$  bezeichnet. Wenn also  $\mathcal{F}$  wie behauptet unitär ist, gilt  $\mathcal{F}P_\nu\mathcal{F}^* = p_\nu$ , d.h.  $\mathcal{F}$  diagonalisiert gleichzeitig alle  $n$  Operatoren  $P_\nu$ .

Aus Abschnitt 2.2.4 ergibt sich hieraus auch, wie man die Wahrscheinlichkeiten für die **Impulsobservable** bestimmen soll. Wir können ja im Funktionalkalkül den Operator  $\chi_S(P_1, \dots, P_n)$  berechnen, der für eine Teilmenge  $S \subset \mathbb{R}^n$  des Impulsraumes die Wahrscheinlichkeit für die Frage “liegt der Impuls in  $S$ ” angibt. Sein Erwartungswert im reinen Zustand  $\Psi$  ist einfach das Integral von  $|\hat{\Psi}(p)|^2$  über  $S$ . Damit ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Impuls ganz analog zur Bornschen Regel für den Ort festgelegt:

Sei  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  und  $\hat{\Psi} = \mathcal{F}\Psi$ . Dann ist  $|\hat{\Psi}(p)|^2$  die Wahrscheinlichkeitsdichte, bei Messung der Impulsobservablen den Wert  $p$  zu finden.

## 2.4.2 Unitarität

Zum Beweis der Unitarität müssen wir uns die Integrale (2.71) etwas genauer ansehen. Zunächst ist klar, dass sie gar nicht unbedingt existieren müssen: Sie ergeben unmittelbar nur dann einen Sinn, wenn  $\Psi \in \mathcal{L}^1(\mathbb{R}^n, dx)$  auch wirklich integrierbar ist. Das folgt noch nicht aus  $\Psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n, dx)$ , wie das Beispiel  $\Psi(x) = x/(1+x^2)$  zeigt. Wenn allerdings  $\Psi \in \mathcal{L}^1$ , dann besagt das **Riemann-Lebesgue Lemma**, dass  $\mathcal{F}\Psi$  eine stetige Funktion von  $p$  ist, die im Unendlichen gegen Null geht. Das reicht nun wieder nicht, um die Existenz des Integrals  $\mathcal{F}^*$  für die Rücktransformation zu sichern.

Der Ausweg aus diesem Dilemma ist, den Operator zuerst auf einer kleinen (aber dichten) Menge  $\mathcal{S}$  gutartiger Funktionen zu definieren und für diese die Isometrie-Eigenschaft  $\|\mathcal{F}\Psi\| = \|\Psi\|$  zu zeigen. Wenn dann  $\Psi_n \in \mathcal{S}$  und  $\|\Psi_n - \Psi\| \rightarrow 0$ , dann ist  $\mathcal{F}\Psi_n$  eine Cauchy-Folge und wir können definieren  $\mathcal{F}\Psi = \lim_n \mathcal{F}\Psi_n$ . Mit dieser Definition folgt dann die Unitaritätseigenschaft

$$\langle \mathcal{F}\Psi, \mathcal{F}\Phi \rangle = \langle \Psi, \Phi \rangle, \quad (2.73)$$

die auch unter dem Namen **Plancherel-Formel** bekannt ist, auch für beliebige  $\Phi, \Psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n, dx)$ .

Eine gute Wahl für  $\mathcal{S}$  ist der Raum der Schwartz-Funktionen (oder “temperierten Funktionen”): Das sind Funktionen, deren sämtliche partiellen Ableitungen schneller als jede inverse Potenz im Unendlichen gegen Null gehen. Wenn  $\Psi$  und  $\Phi$  solche Funktionen sind (also insbesondere integrierbar), dann ist

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{F}\Psi, \mathcal{F}\Phi \rangle &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int dp \, e^{-\varepsilon|p|^2} \overline{\mathcal{F}\Psi(p)} \mathcal{F}\Phi(p) \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int dp \, e^{-\varepsilon|p|^2} \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int dx \int dy \, e^{-ip \cdot (y-x)/\hbar} \overline{\Psi(x)} \Phi(y) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int dx dy \overline{\Psi(x)} \Phi(y) \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int dp e^{-\varepsilon|p|^2} e^{-ip \cdot (y-x)/\hbar} \\
&= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int dx dy \overline{\Psi(x)} \Phi(y) K_\varepsilon(x-y) ,
\end{aligned} \tag{2.74}$$

wobei wir am dritten Gleichheitszeichen den Satz von Fubini verwendet haben, was durch die absolute Konvergenz des Integrals über alle drei Variablengruppen gerechtfertigt ist (dazu dient der Faktor  $\exp(-\varepsilon|p|^2)$ ). Außerdem haben wir die Funktion  $K_\varepsilon$  eingeführt, die wir gleich noch bestimmen werden. Sie ist eine positive Gaußfunktion mit Integral 1 und konzentriert sich für kleine  $\varepsilon$  fast völlig am Ursprung. Beiträge zum Integral kommen daher nur von Stellen  $x \approx y$ , was wir wegen der Stetigkeit der Funktionen  $\Phi, \Psi$  durch  $x = y$  ersetzen können. Damit ist der obige Limes gleich dem Skalarprodukt  $\langle \Psi, \Phi \rangle$ . Als Merkregel für diese Rechnung dient der Ausdruck, den man formal bekommt, wenn man den Limes  $\varepsilon \rightarrow 0$  in dem Integral ausführt, durch das  $K_\varepsilon$  definiert ist:

$$K_0(x-y) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int dp e^{ip \cdot (x-y)} = \delta(x-y) , \tag{2.75}$$

wobei  $\delta$  die Diracsche Delta-“Funktion” ist. Dies ist aber wirklich auch nicht mehr als eine Merkregel, die mit weiterem mathematischen Sinn zu füllen hier zu weit ginge.

### 2.4.3 Gaußsche Integrale

Es bleibt das Gaußsche Integral für  $K_\varepsilon$  zu lösen. Da wir dies ständig benötigen werden, betrachten wir solche Integrale etwas allgemeiner. Gleichzeitig ist dies unser erstes Beispiel für eine Fourier-Transformierte. Wir betrachten ein  $n$ -dimensionales Gaußsches Integral der Form

$$I(A, \xi) = \int dx_1 \cdots dx_n \exp\left(\frac{-1}{2} \sum_{\mu\nu=1}^n A_{\mu\nu} x_\mu x_\nu + \sum_{\mu=1}^n \xi_\mu x_\mu\right) , \tag{2.76}$$

wobei  $A$  eine komplexe  $n \times n$ -Matrix ist, die symmetrisch ist, ( $A_{\mu\nu} = A_{\nu\mu}$ , also *nicht* unbedingt hermitesch) und  $\xi_1, \dots, \xi_n \in \mathbb{C}$  beliebig. Damit das Integral überhaupt existiert müssen wir voraussetzen, dass die Matrix  $(\Re A_{\mu\nu})_{\mu,\nu}$  strikt positiv definit ist. Dann haben alle Eigenwerte von  $A$  strikt positiven Realteil. Wenn  $A$  und  $\xi$  reell sind, existiert eine symmetrische invertierbare Matrix  $A^{1/2}$  und wir können  $A^{1/2}x - A^{-1/2}\xi = y$  substituieren. Wir bekommen so ein Produkt eindimensionaler Gaußscher Integrale und als Endergebnis

$$I(A, \xi) = (2\pi)^{\frac{n}{2}} (\det(A))^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{\mu\nu=1}^n (A^{-1})_{\mu\nu} \xi_\mu \xi_\nu\right) . \tag{2.77}$$

Wenn  $A$  und  $\xi$  auch komplex sein dürfen, kommt uns die Funktionentheorie mit einem starken Satz zur Hilfe: Beide Ausdrücke für  $I(A, \xi)$  sind analytische Funktionen in jedem Matrixelement von  $A$  und jedem  $\xi$ , in einem Bereich, der von den anderen Parametern abhängt, aber ein Stück der reellen Achse einschließt. Damit sind beide Funktionen auch im Komplexen gleich.

Der oben benötigte Spezialfall ist  $A = 2\varepsilon\mathbb{1}$ ,  $\xi = ix/\hbar$

$$K_\varepsilon(x) = (2\pi\hbar)^{-n} I(A, \xi) = (4\pi\varepsilon\hbar^2)^{-n/2} \exp\left(\frac{-x^2}{4\varepsilon\hbar^2}\right), \quad (2.78)$$

also die normierte Gaußsche Dichte mit Varianz  $2\varepsilon\hbar^2$ .

Die Fourier-Transformierte einer komplexen Gaußfunktion (eines “Gaußschen Wellenpakets”) ist wieder eine Funktion dieses Typs: Mit geeigneten Normierungsfaktoren  $N, N'$  sind folgende Funktionen ein Fourier-Paar ( $\hat{\Psi} = \mathcal{F}\Psi$ ,  $\Psi = \mathcal{F}^*\hat{\Psi}$ ).

$$\Psi(x) = N \exp\left(\frac{-1}{2\hbar} x \cdot (Ax) + \xi \cdot x\right) \quad (2.79)$$

$$\hat{\Psi}(p) = N' \exp\left(\frac{-1}{2\hbar} p \cdot (A^{-1}p) - i(A^{-1}\xi) \cdot p\right). \quad (2.80)$$

Dabei erfüllen  $A$  und  $\xi$  die bei (2.76) angegebenen Bedingungen und der Punkt steht für das “Skalarprodukt” in  $\mathbb{C}^n$  *ohne (!)* Komplexkonjugation (also  $\xi \cdot x = \sum_\mu \xi_\mu x_\mu$ ).

#### 2.4.4 Vokabel-Liste

Die Fourier-Analyse ist eine reichhaltige Theorie, in der es viele Sätze über den Zusammenhang zwischen Eigenschaften von  $\Psi$  und Eigenschaften von  $\mathcal{F}\Psi$  gibt. Wir brauchen zunächst nur ein paar Rechenregeln, präsentiert in Form einer Vokabeltabelle. Dabei sind  $\hat{\Phi} = \mathcal{F}\Phi$  und  $\hat{\Psi} = \mathcal{F}\Psi$  die Transformationen beliebiger Funktionen  $\Phi, \Psi$ .

$\Psi(x) =$	$\hat{\Psi}(p) =$
$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_\mu} \Phi(x)$	$p_\mu \hat{\Phi}(p)$
$\Phi(x - a)$	$\exp(-ip \cdot a/\hbar) \hat{\Phi}(p)$
$\Phi_1(x) \Phi_2(x)$	$(2\pi\hbar)^{-n/2} \int dp' \hat{\Phi}_1(p - p') \hat{\Phi}_2(p')$
$\overline{\Phi(x)}$	$\overline{\hat{\Phi}(-p)}$
$\det(S)^{-1/2} \Phi(S^{-1}x)$	$\det(S)^{1/2} \hat{\Phi}(S^T p)$
fällt schnell ab	ist sehr glatt
absolut integrierbar( $\mathcal{L}^1$ )	stetig und $\lim_{ p  \rightarrow \infty} \hat{\Psi}(p) = 0$ .

Dabei ist  $S : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  eine beliebige invertierbare lineare Transformation mit der Transponierten  $S^T$ . Entsprechende Formeln gelten natürlich mutatis mutandis auch für  $\mathcal{F}^*$ .

### 2.4.5 \*Charakteristische Funktionen

Die Fouriertransformation spielt auch eine wichtige Rolle in der Wahrscheinlichkeitstheorie. Für ein Wahrscheinlichkeitsmaß  $\mu$  auf  $\mathbb{R}^n$  definieren wir die **charakteristische Funktion**  $C : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$  durch

$$C(p) = \int \mathbb{P}(dx) e^{ix \cdot p} = \mathbb{P} [e^{ix \cdot p}] . \quad (2.81)$$

Wenn  $\mathbb{P}(dx) = \rho(x)dx$  eine Dichte bezüglich des Lebesgue-Maßes hat, ist  $C$  also gerade (bis auf Faktoren) die Fourier-Transformierte von  $\rho$ . Für die Definition von  $C$  ist die Existenz der Dichte  $\rho$  aber unerheblich, wie die zweite Form zeigt, in der nur verwendet wird, dass die beschränkte Funktion  $x \mapsto \exp ip \cdot x$  einen endlichen Erwartungswert hat. Die Normierung der Fourier-Transformierten ist so gewählt, dass  $C(0) = 1$ .

In  $C$  steckt also die vollständige Information über das Wahrscheinlichkeitsmaß. Drei Dinge sind es, die diese Umschreibung nützlich machen. Zunächst kann man die *Momente* der Verteilung direkt aus  $C$  durch Differentiation bei  $p = 0$  bekommen, also

$$M_{k_1, k_2, \dots, k_n} = \mathbb{P} [x_1^{k_1} \cdots x_n^{k_n}] = \left( \frac{i^{-|k|} \partial^{|k|} C(p)}{\partial p_1^{k_1} \cdots \partial p_n^{k_n}} \right) \Big|_{p=0} . \quad (2.82)$$

Hier ist  $|k| = \sum_{\alpha} k_{\alpha}$  die Gesamt-Ordnung des Moments. Wegen dieser Eigenschaft nennt man  $C$  auch die **momentenerzeugende Funktion**. Natürlich braucht dieses Moment nicht zu existieren, wenn die Verteilung nicht schnell gegen Unendlich abfällt. Wir erkennen das dann daran, dass  $C$  eben nicht differenzierbar ist.

Die zweite nützliche Eigenschaft ergibt sich daraus, dass für unabhängige Zufallsgrößen die Erwartungswerte faktorisieren. Wenn also  $C_1$  und  $C_2$  die charakteristischen Funktionen zweier unabhängiger Größen  $x_1$  und  $x_2$  sind, dann ist

$$C_1(p)C_2(p) = \mathbb{P}_1 [e^{ix_1 \cdot p}] \mathbb{P}_2 [e^{ix_2 \cdot p}] = \mathbb{P} [e^{i(x_1+x_2) \cdot p}] \quad (2.83)$$

die charakteristische Funktion der Summe  $x_1 + x_2$ . Zurücktransformiert ergibt das die Faltung der zugehörigen Wahrscheinlichkeitsmaße.

Die dritte Eigenschaft, die man kennen sollte, ist eine Konvergenzeigenschaft: Wenn  $C_n$  charakteristische Funktionen sind und für jedes  $p$   $\lim_n C_n(p) = C(p)$  existiert (‘‘punktweise Konvergenz’’) und wenn diese Limesfunktion stetig ist, dann ist sie wiederum eine charakteristische Funktion und die entsprechenden Wahrscheinlichkeitsmaße  $\mathbb{P}_n$  konvergieren ‘‘schwach’’ gegen  $\mathbb{P}$ , was sich dadurch charakterisieren lässt, dass für *alle* beschränkten stetigen Funktionen  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$  gilt, dass  $\lim_n \mathbb{P}_n[f] = \mathbb{P}[f]$ . Für alternative Beschreibungen der schwachen Konvergenz und für den eben zitierten Satz empfehle ich [Bil95, Luk70].

Eine Variante der charakteristischen Funktion ist nützlich für Verteilungen auf natürlichen Zahlen, also Wahrscheinlichkeitsvektoren  $p_n$ ,  $n = 0, \dots$ . Man nennt dann

$$G(z) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n z^n = \mathbb{P}[z^n] \quad (2.84)$$

die erzeugende Funktion der  $p_n$ , die man aus dieser Potenzreihe durch Differentiation bei 0 zurückgewinnen kann, während die Momente durch Differentiation bei 1 gewonnen werden. Der Zusammenhang ist  $C(p) = G(e^{ip})$  und charakteristische Funktionen von Verteilungen, die auf  $\mathbb{Z}$  konzentriert sind, erkennt man an der Eigenschaft  $C(p + 2\pi) = C(p)$ .

## Anmerkungen zum Kapitel 2

### Zu Abschnitt 2.1 (Wahrscheinlichkeit)

Hier liegt eine der auffälligen Lücken in der Physikausbildung obwohl statistische Messungen im Labor eigentlich ständig vorkommen. Mögliche Einstiegsbücher sind [Bau90, Bil95]. Wer den Abschnitt 2.1.1 über die Interpretation der Wahrscheinlichkeit vertiefen möchte, kann hier [Háj12] beginnen. Die angedeuteten Axiome sind bei von Mises nicht sehr scharf formuliert: Bei den Platzauswahl-Verfahren sollte man ihre Berechenbarkeit fordern, wie es eine Präzisierung von Church fordert.

### Zu Abschnitt 2.2 (Funktionalanalysis)

Eine grobe Übersicht von einem nicht sehr mathematisch orientierten Praktiker ist [Gro70]. Für Quantenmechaniker eine gute Quelle sind die Bücher [RS80]. Die angegebene Version des Spektralsatzes ist so nicht in vielen Büchern zu finden. Sie ist aus der Theorie der Operatoralgebren [BR81] entlehnt.

### Zu Abschnitt 2.4 (Fourier-Analysis)

Meine Empfehlung ist [DM74], zusammen mit dem zweiten Band von [RS80].

## Aufgaben zum Kapitel 2

**Aufgabe 2.1:** Zeigen Sie aus (2.27) die **Parallelogramm-Gleichung**

$$\|\Psi + \Phi\|^2 + \|\Psi - \Phi\|^2 = 2\|\Psi\|^2 + 2\|\Phi\|^2 \quad (2.85)$$

und dass umgekehrt für eine beliebige Norm diese Identität die Linearität des durch (2.27) definierten Skalarprodukts impliziert. [H]

**Aufgabe 2.2:** Zeigen Sie die Behauptung im Zusammenhang mit Abb. 2.3, dass es zu jedem Punkt  $\Psi$  in jeder abgeschlossenen konvexen Menge  $K \subset \mathcal{H}$  einen eindeutig bestimmten nächsten Punkt gibt. [H]

**Aufgabe 2.3:** Zeigen Sie direkt (ohne Verwendung des Spektralsatzes): Jeder Eigenvektor eines normalen Operators ist auch Eigenvektor des adjungierten Operators. Geben Sie ein Gegenbeispiel für nicht-normale Operatoren.

**Aufgabe 2.4:** Zeigen Sie folgende (recht einfache) Umkehrung des Spektralsatzes:

Wenn sich die Operatoren  $A_1, \dots, A_n$  gemeinsam durch einen unitären Operator diagonalisieren lassen, dann sind sie normal und vertauschen.

**Aufgabe 2.5:** Zeigen Sie: Wenn  $a_n \in \mathbb{C}$  mit  $\Re a_n > 0$  für  $n = 1, \dots, N$ , dann ist die  $N \times N$ -Matrix  $A_{nm} = (\overline{a_n} + a_m)^{-1}$  positiv. [H]

**Aufgabe 2.6:** Zeigen Sie, dass die Quadrier-Funktion nicht operatormonoton ist, indem Sie zwei  $2 \times 2$ -Matrizen  $A, B$  mit  $0 \leq A \leq B$  finden, so dass  $A^2 \leq B^2$  *nicht* gilt. Überprüfen Sie, dass trotzdem in jedem Fall  $\text{tr}(A^2) \leq \text{tr}(B^2)$  gilt.

**Aufgabe 2.7:** Berechnen Sie die Fouriertransformierten von  $\Psi(x) = e^{-\lambda|x|}$  und  $\Phi = \chi_{[-L/2, L/2]}$ .

**Aufgabe 2.8:** Zeigen Sie die Abschätzung  $\int dx |\Psi(x)| \leq 2\pi \sqrt{\|Q\Psi\| \|\Psi\|}$  für  $\Psi \in \text{dom } Q \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx)$ . Mit dem Riemann-Lebesgue Lemma folgt daraus, dass  $\mathcal{F}\Psi$  stetig ist und die Abschätzung

$$\hbar |\mathcal{F}\Psi(p)|^2 \leq \|\Psi\| \|Q\Psi\| \quad (2.86)$$

erfüllt. Für  $\Phi \in \text{dom } Q^n$  folgt mit  $\Psi = Q^{n-1}\Phi$ , dass  $\mathcal{F}\Phi$   $(n-1)$  Mal stetig differenzierbar ist. [H]

**Aufgabe 2.9:** \*Zeigen Sie den “zentralen Grenzwertsatz”: Seien  $X_n$  unabhängige, gleich verteilte Zufallsvariable mit Mittel null und endlicher Varianz. Bestimmen Sie die charakteristische Funktionen für  $S_n = n^{-1/2} \sum_{k=1}^n X_k$  und zeigen Sie, dass die  $S_n$  schwach gegen eine Gaußverteilung gehen.

# Kapitel 3

## Komplementarität und Unschärfe

### 3.1 Rückschau: die klassische Welt

In diesem Kapitel wollen wir deutlicher formulieren, was die Quantenmechanik von ihren Vorgängertheorien, die man in diesem Kontext gern als die Theorien der *Klassischen Physik* bezeichnet, unterscheidet.

Ein augenfälliger Unterschied ist, dass die Quantenmechanik nur Wahrscheinlichkeitsaussagen macht, wovon in Mechanik und Elektrodynamik selten die Rede ist. Das allein kann aber kaum der wesentliche Unterschied sein, denn man könnte diese Theorien leicht in eine äquivalente Form bringen, die genau dem Schema Präparation, Messung, Wahrscheinlichkeit folgt, wie es in Abschnitt 1.7 und 2.1.2 beschrieben ist. Wenn man z.B. reale Interferenzexperimente diskutieren möchte, ist dies sogar nötig. Ideal kohärentes Licht, das durch eine einzige Lösung der Maxwell-Gleichungen beschrieben ist, liegt eigentlich nie vor. Statt dessen muss man, um Begriffe wie “Kohärenzlänge” überhaupt zu definieren, von einer statistischen Mischung verschiedener Lösungen ausgehen.

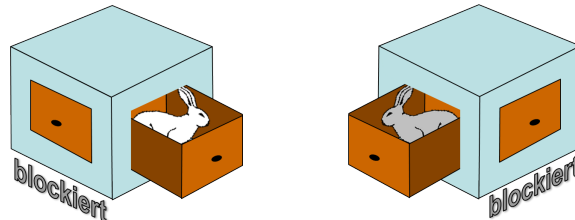
Betrachten wir also die statistische Variante der klassischen Mechanik. Die Teilchen seien beschrieben durch  $N$  Paare von Orts- und Impulskoordinaten, also durch Punkte im Phasenraum  $\Gamma = \mathbb{R}^{2N}$ . Präparationen werden dann gegeben durch Wahrscheinlichkeitsmaße auf  $\Gamma$ , zum Beispiel mit einer Dichtefunktion  $\rho$ . Ja/nein-Messungen sind durch Ansprechfunktionen  $f$  gegeben, wobei  $f(\gamma)$  die Wahrscheinlichkeit des Ansprechens des Detektors für Teilchen mit Koordinatensatz  $\gamma$  ist. Für die Wahrscheinlichkeit des Ansprechens mit der Präparation  $\rho$  bekommen wir dann  $\int d\gamma \rho(\gamma) f(\gamma)$ . Möglichst scharfe Messungen sind solche, bei denen das Ansprechen bei gegebenem  $\gamma$  schon deterministisch festliegt, also  $f(\gamma) \in \{0, 1\}$ . Möglichst scharfe Präparationen sind gerade Punktmaße, als Wahrscheinlichkeitsdichten geschrieben also Deltafunktionen  $\rho(\gamma) = \delta(\gamma - \zeta)$  mit  $\zeta \in \Gamma$ . Eine Observable mit Ergebnismenge  $X$  ordnet jeder Präparation linear ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf  $X$  zu. Eine spezielle Observable ist

die *vollständige Beobachtung*, bei der  $X = \Gamma$  ist und jedem Wahrscheinlichkeitsmaß auf  $\Gamma$  eben dieses Maß als Verteilung der Ergebnisse zugeordnet wird. Jede andere Messung lässt sich als Vergröberung dieser Observablen deuten, zum Beispiel durch Nachverarbeitung der Ergebnisse kombiniert mit Rauschen. Bemerkenswert ist, dass die vollständige Messung keine Störung des Systems erfordert. Es gelten also die folgenden Eigenschaften:

- (1) Es gibt Zustände, die keinerlei statistische Dispersion mehr aufweisen: Die schärfsten ja/nein-Tests sprechen entweder immer (mit Wahrscheinlichkeit 1) oder nie an.
- (2) Es gibt eine aussagekräftigste Observable, aus der sich die Verteilungen für alle anderen vorhersagen lassen. Insbesondere lassen sich je zwei Observable “gemeinsam messen”.
- (3) Alle Observablen können im Prinzip gemessen werden, ohne das System zu beeinflussen oder zu stören. Genauer: Solche Störungen lassen sich im Prinzip beliebig klein machen.

In der klassischen Physik kann man sich immer auf den Standpunkt stellen, das System sei in einem scharfen Zustand präpariert, den man nur nicht genau kennt, und die Messung sei die vollständige Messung, nur dass bei der Nachverarbeitung etwas verloren gegangen ist. Das heißt, man kann als Theoretiker “objektiv” mit idealen Systemen arbeiten, lässt jede Diskussion von Messprozessen außen vor und erklärt alle statistischen Schwankungen für Probleme der Experimentalphysik.

In der Quantenmechanik ist das falsch. Daher wird es wichtig, klar zu sagen, welche Wahl der Instrumente man getroffen hat. Vorhersagen beziehen sich also nur auf ausreichend scharf beschriebene Umstände von Präparation und Messung (Bohr nennt das ein Phänomen). Verschiedene experimentelle Aufbauten, also zum Beispiel verschiedene Messapparate, schließen einander in der Regel aus. Sie liefern jeweils nur einen Teilaspekt dessen, was man über das System herausfinden kann. Dies ist, kurz gefasst, die Bedeutung des Begriffs **Komplementarität** (siehe Abb. 3.1). Was passiert nun,



**Abb. 3.1:** Metaphorische Darstellung des Komplementaritätsprinzips: Die Öffnung einer der Schubladen dieser Kiste blockiert die andere. Um etwas über den Inhalt herauszufinden müssen wir eine Wahl treffen.

wenn ich versuche “vollständigere” Information über das System zu erhalten, indem



ich zwei Messungen hintereinander ausführe? Wie wir sehen werden, sagt dann die Quantenmechanik, dass die erste Messung bereits das System verändert, die danach gewonnene Information durch eine weitere Messung sich also bereits auf ein gestörtes System bezieht. Das Gleiche gilt für alle Versuche, zwei Observablen durch eine gemeinsame Messung zu ersetzen: In jedem Fall führt dies zu Fehlern, also Abweichungen gegenüber den Observablen, die man eigentlich messen wollte. Die Fehler lassen sich nicht beliebig klein machen und die Untergrenzen werden jeweils durch sogenannte **Mess-Unschärferelationen** angegeben. Auch die Unmöglichkeit streuungsfreier Zustände ist mit quantitativen Grenzen versehen, die jeweils für ein Paar von Observablen angegeben, wie scharf die Verteilungen im gleichen Zustand maximal sein können. Diese bezeichnen wir als **Präparierunschärferelationen**.

## 3.2 \*Bohr und Heisenberg

Anfang 1927 trennten sich Bohr und Heisenberg nach einer Phase intensiver Diskussion über die neue Quantenmechanik. Heisenberg blieb in Kopenhagen, während Bohr in Norwegen Skilaufen ging. Beide erzielten, jeder für sich, einen Durchbruch. Bei Bohr war es die Komplementaritätsphilosophie, die er etwas später in einem programmatischen Vortrag (Como, Sept. 1927[Boh28]) der Öffentlichkeit vorstellte. Heisenberg entwickelte parallel die Unschärferelation. Er reichte seine Arbeit bei der Zeitschrift für Physik[Hei27] ein, ohne sie mit Bohr abzusprechen. Der fand das nicht lustig und zwang ihn, in letzter Minute noch eine Bemerkung einzufügen, in der er erklärte, dass seine Unschärferelation nur ein weiteres Beispiel für Komplementarität sei. Wie auch immer, beide Aspekte sind grundlegend für die Quantenmechanik.

Beide Arbeiten sind insofern merkwürdig, als sie die neue Quantenmechanik gar nicht ganz zur Kenntnis nehmen. Stattdessen sind sie im halbklassischen Stil geschrieben: Man versucht so zu tun, als gelte noch die gute alte klassische Mechanik und versucht lediglich, sie durch Verbotstafeln einzuschränken. Bohr war ja mit dieser Denkweise 1913 bei seinem Atommodell sehr erfolgreich gewesen. Eigentlich blieb er sein Leben lang in dieser “alten Quantentheorie” gefangen. Komplementarität war in der Como-Vorlesung bezogen auf den Kontrast zwischen “kausaler” und “raumzeitlicher” Beschreibung, was man getrost als “Teilchen” gegen “Welle” lesen darf. Beides sollte irgendwie gelten, aber eben nicht auf einmal. Später wurde unter dem Einfluss der Unschärferelation die Komplementarität von “Ort” gegen “Impuls” mehr betont. Man sieht bei Bohr normalerweise komplementäre Paare, was einer dualistischen Hintergrund-Philosophie geschuldet ist, aber mit Quantenmechanik nicht viel zu tun hat. Ein Beispiel dafür sind die drei Drehimpulskomponenten, die alle drei nicht gleichzeitig messbar sind. Von Neumann hat sich in diesem Sinne schon früh über Bohr mokiert. Was auch immer Bohr dazu sagt, es gibt also zu einer gegebenen Größe kein irgendwie ausgezeichnetes “Komplement”. Die kurze Formulierung im letzten Abschnitt bleibt aber richtig und im Wesentlichen wohl auch in Übereinstimmung mit Bohrs Intentionen: Die Quantenmechanik bezieht sich auf Situationen, in denen man eine

Wahl zwischen verschiedenen möglichen, makroskopisch beschreibbaren Anordnungen treffen muss (und man hat meist mehr als zwei Möglichkeiten).

Heisenbergs Arbeit war eine Reaktion auf Kritik aus dem Kreis der Theorie-Kollegen, die Schrödingers Wellenmechanik viel “anschaulicher” fanden als seine Matrix-Mechanik. Die Arbeit hat zum Titel daher den “anschaulichen Inhalt” der neuen Mechanik. In der Einleitung beschreibt er, was er hier mit “anschaulich” meint und das hat wenig mit “anschauen” im Sinne von Visualisieren zu tun. Eher geht es ihm darum, dass wir “in allen einfachen Fällen die experimentellen Konsequenzen dieser Theorie qualitativ denken können”. Was ihm besonders erklärungsbedürftig schien, war das widersprüchliche Nebeneinander von Teilchen- und Wellenbildern und die Vertauschungsrelationen schienen ja doch eine Modifikation der Begriffe Ort und Impuls zu erfordern. Ein offensichtlicher Kontrast bestand auch zwischen der Aufgabe des Bahnbegriffs im Atom (seine Leistung von 1925) und den augenfälligen Bahnen, die man in der Nebelkammer sah. Heisenberg geht nun der Weg der Begriffskritik und weist darauf hin, dass ein Ort ja irgendwie festgestellt werden muss, also zum Beispiel durch Beleuchten und Auswerten einer Messung am Licht im Mikroskop. Das Auflösungsvermögen  $q_1$  ist dann in der Größenordnung der Wellenlänge. Andererseits wird der Impuls durch den Compton-Stoß unstetig verändert. Im Moment des Stoßes “verändert das Elektron seinen Impuls unstetig”, sagen wir um  $p_1$ . Hier ist “unstetig” das Erkennungszeichen für einen “Quantenprozess”, wie eben bei einem Bohrschen Quantensprung und die Relation bezieht sich offenbar nur auf den Augenblick des Sprungs (was immer das in quantenmechanischer Sprache sein könnte). Nach den üblichen de Broglie-Relationen gilt nun

$$p_1 q_1 \sim h . \quad (3.1)$$

So steht es bei Heisenberg. Dabei ist die Tilde ein offenbar absichtlich nirgends erklärtes Symbol, was wir also mit “heuristisch und vielleicht größenordnungsmäßig ungefähr verknüpft mit” lesen dürfen. Ich habe die Arbeit so ausführlich referiert, um zu zeigen, dass Heisenberg nicht an einer quantitativen Aussage, wie etwa einer Ungleichung, interessiert war, sondern an einem heuristischen Prinzip. Er verspricht zwar, die gewonnene Relation in einem späteren Abschnitt aus den Vertauschungsrelationen (1.33) zu beweisen, aber was er dann als Beweis anführt, ist ein Sammelsurium von falschen Zusatzvoraussetzungen und groben mathematischen Schnitzern, das die Vertauschungsrelationen nicht enthält. Man muss daraus schließen, dass ihn Beweise nicht interessierten, und in einer späteren Vorlesung (Chicago 1930) sagt er genau das auch explizit.

Eine weitere Lesart seiner Unschärfen sind die Grade möglichen *Wissens* über die entsprechenden Eigenschaften. Demnach sind Elektronen komische Dinger, für die ein besonderes Datenschutzgesetz gilt: Wenn sie schon viel über ihren Ort preisgegeben haben, können sie nicht gezwungen werden, auch über ihren Impuls viel zu verraten. Wessen Wissen hier diskutiert wird, ist nicht ganz klar; auf jeden Fall unterstellt die Redeweise, die Teilchen hätten, wenn auch unbekannte, mechanische Eigenschaften. Heisenberg scheint den Gedanken zu mögen. So sagt er, der Laplacesche Dämon, also das hypothetische Wesen, das aus den bekannten Anfangsorten und Anfangsimpulsen

der Welt als klassischem mechanischen System alles Wissen über die Zukunft hat, verlore in der Quantenmechanik seine Macht, weil selbst er diese Anfangsbedingungen wegen der Unschärferelation nicht alle kennen könne. Auch hier sieht man wieder eine merkwürdige Schmälerung der quantenmechanischen Innovation: Im Gegensatz zu dem von Heisenberg hier vermittelten Bild ist Quantenmechanik etwas ganz Anderes als klassische Mechanik mit schlecht bekannten Anfangsbedingungen. Einstein und Schrödinger sprechen daher auch von der “Kopenhagener Beruhigungsphilosophie”, die glauben machen will, es sei doch alles gar nicht so “schlimm”.

Die Beweislast, die Heisenberg in der Arbeit auf sich nahm, also eine Unschärfere-lation aus den Vertauschungsrelationen und damit aus der Struktur der Quantenmechanik abzuleiten, hat als Erster Kennard [Ken27] geschultert. Von ihm stammt die Unschärferelation als Ungleichung für die Präparierunschärfen, die bei Heisenberg gar nicht vorkommt (außer implizit in seiner Betrachtung von Gaußschen Wellenpaketen). Mit einem deutlich vereinfachten Beweis, der von Robertson [Rob29] stammt, ist die Kennardsche Relation zum Standard in fast allen Lehrbüchern geworden. Wo immer heute ein Student in der Prüfung nach der “genauen Bedeutung der Heisenbergschen Unschärferelation” gefragt wird, wird von ihm erwartet, genau den Teil zu beschreiben, der nicht von Heisenberg stammt.

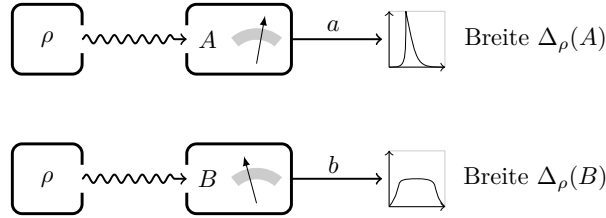
### 3.3 Präparierunschärfe

Was sind die “schärfsten Präparationen”, die die Quantenmechanik kennt? Dies sind die Extrempunkte der Zustandsmenge, also die nicht weiter entmischbaren **reinen Zustände**. Für die Blochkugel sind das die Oberflächenpunkte, also die eindimensionalen Projektoren  $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ . Dies gilt auch allgemein.

*Beweis:* Wir betrachten dazu einen beliebigen Dichteoperator  $\rho$  in seiner Spektralzerlegung (2.60). Dies ist schon eine Mischung der Basiszustände. Für einen Extrempunkt brauchen wir also, dass nur eines der Gewichte  $\lambda_k$  von null verschieden (und damit 1) ist. Die Form  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  ist also notwendig für Extremalität. Ist sie auch hinreichend? Sei also  $|\Psi\rangle\langle\Psi| = \lambda\rho_1 + (1 - \lambda)\rho_2$  für  $0 < \lambda < 1$  Dichtematrizen  $\rho_1, \rho_2$ . Offenbar gilt dann  $|\Psi\rangle\langle\Psi| \geq \lambda\rho_1 \geq 0$  und die linke Seite ist ein Projektor. Also bekommen wir nach (2.63)  $\lambda\rho_1 = \lambda|\Psi\rangle\langle\Psi|\rho_1|\Psi\rangle\langle\Psi|$ , also  $\rho_1 = \langle\Psi, \rho_1\Psi\rangle|\Psi\rangle\langle\Psi|$ . Da  $\text{tr } \rho_1 = \text{tr } |\Psi\rangle\langle\Psi| = 1$  gelten soll, gilt  $\rho_1 = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  und entsprechend für  $\rho_2$ :  $|\Psi\rangle\langle\Psi|$  lässt sich also nicht in verschiedene andere Zustände zerlegen. ■

Die Frage, ob es dispersionsfreie Zustände gibt, kann man schon an der Blochkugel Abb. 1.4 ablesen. Wenn wir eine der Messrichtungen fixieren, also zum Beispiel die Observable  $F_{\pm} = (\mathbb{1} \pm \sigma_3)/2$  betrachten, dann gibt es nur zwei Zustände, für die das Ergebnis deterministisch festliegt, nämlich den Nordpol und den Südpol. Für diesen Zustand liefert aber gerade die Messung  $G_{\pm} = (\mathbb{1} \pm \sigma_1)/2$  ein völlig gemischtes Ergebnis (beide Ausgänge gleich wahrscheinlich). Man kann also in puncto gleichzeitiger Schärfe nicht zu viel erwarten.

Allgemein bezieht sich die Präparierunschärferelation auf die Situation, die in Abb. 3.2 dargestellt ist: Wir betrachten zwei Messungen  $A$ ,  $B$  an der gleichen Präparation  $\rho$ . Die gemeinsame Präparation ist die einzige Verbindung dieser beiden Experimente: An keinem Teilchen wird sowohl eine  $A$ -Messung als auch eine  $B$ -Messung vorgenommen (dies ist der Unterschied zu den in Abschnitt 3.4 diskutierten Messunschärfen). Die Behauptung ist, dass es Einschränkungen daran gibt, wie scharf beide gemessenen Verteilungen konzentriert sein können. Da “scharf konzentriert” durch die verschiedensten Kenngrößen präzisiert werden kann, gibt es auch eine Fülle verschiedener mathematischer Ungleichungen, die alle als Unschärferelationen angesprochen werden können. Betrachten wir der Einfachheit halber nur projektionswertige Observable mit reellen



**Abb. 3.2:** Experimenteller Aufbau, auf den sich Präparierunschärferelationen beziehen: Die Verteilungen von  $A$  und  $B$  werden in getrennten Experimenten, aber am gleichen Zustand  $\rho$  gemessen. Die Unschärferelation schränkt ein, wie scharf die beiden Verteilungen gleichzeitig sein können.

Messwerten, die ja durch den Erwartungswertoperator  $A$  schon eindeutig festgelegt sind. Die Streuung der Werteverteilung im Zustand  $\rho$  ist dann

$$\Delta_\rho(A) = \sqrt{\text{tr } \rho A^2 - (\text{tr } \rho A)^2} . \quad (3.2)$$

Die Wurzel wird hier gezogen, um wieder bei einer Größe mit der gleichen physikalischen Dimension wie  $A$  herauszukommen. Wir möchten Einschränkungen für die Wertepaare  $(\Delta_\rho(A), \Delta_\rho(B))$  aufstellen, die für alle  $\rho$  gelten. Zwei Beispiele sind in Abb. 3.3 dargestellt. Dabei macht es eine Unschärferelation aus, dass ein kleines Gebiet um den Ursprung ausgespart bleibt: Es können nicht beide Streuungen klein werden. Für endlich dimensionale Matrizen ist das dazu äquivalent, dass sie keine gemeinsamen Eigenvektoren besitzen. Wie man konkret die Unschärfegrenzen bestimmt, führt hier zu weit.

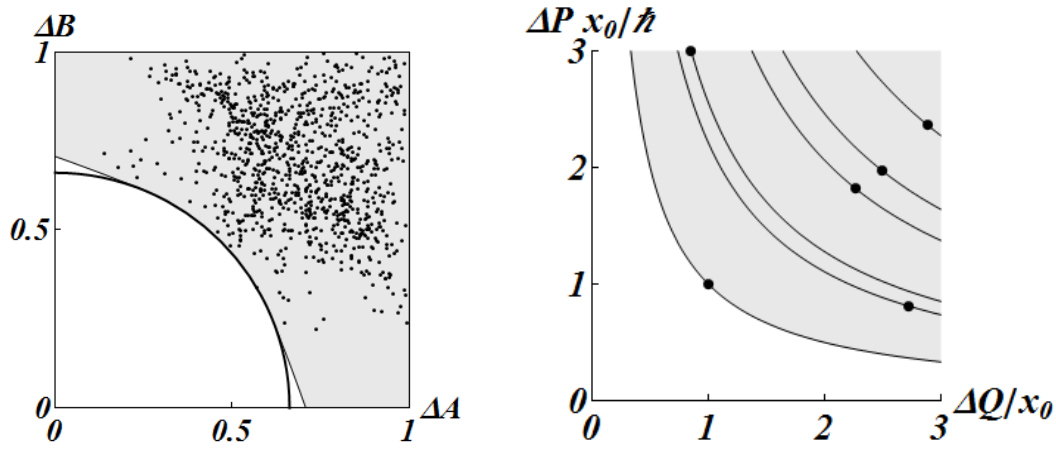
Uns interessiert hier nur der Fall von Ort und Impuls und wir folgen dafür dem Weg von Robertson [Rob29]. Für je zwei hermitesche Operatoren  $A, B$  zeigen wir

$$\text{tr}(\rho A^2) \text{tr}(\rho B^2) \geq |\text{tr } \rho AB|^2 . \quad (3.3)$$

Dies lässt sich auf die Ungleichung  $\text{tr}(\rho X^* X) \geq 0$  zurückführen, wobei  $X = A - zB$  mit zunächst beliebigem  $z \in \mathbb{C}$ . Das ergibt

$$\text{tr}(\rho A^2) - 2\Re(\bar{z} \text{tr}(\rho AB)) + |z|^2 \text{tr}(\rho B^2) \geq 0 . \quad (3.4)$$

Wir optimieren hier zuerst die Phase und dann den Betrag von  $z$ , um die schärfste Aussage zu bekommen oder setzen gleich  $z = \text{tr}(\rho AB) / \text{tr}(\rho B^2)$ , was (3.3) ergibt. Für



**Abb. 3.3:** Beispiele für Unschärferelationen. Schattiert jeweils die möglichen Unschärfepaare. Links: Die gewählten Observablen  $A$  und  $B$  sind hermitesche Matrizen in  $\mathbb{C}^3$ , nämlich zwei Drehimpulskomponenten eines Spin-1 Freiheitsgrads. Die Punkte stehen für die Unschärfepaare zufällig gewählter reiner Zustände. Die dicke Linie stellt eine vereinfachte Unschärferelationen dar, nämlich die Kreislinie  $(\Delta A)^2 + (\Delta B)^2 \geq (0,661)^2$ . Die daneben liegende dünne besteht aus realisierbaren Wertepaaren. Rechts: Das entsprechende Bild für Ort und Impuls. Wegen der Skalierungs-Symmetrie  $Q \mapsto \lambda Q$ ,  $P \mapsto \lambda^{-1}P$ , bzw. der willkürlichen Wählbarkeit der Längeneinheit  $x_0$ , gehört zu jedem Punkt immer eine ganze Hyperbel. Das gesamte Diagramm wird daher durch die niedrigstliegende Hyperbel bestimmt, also die Relation (3.6).

allgemeine  $A, B$  kommt man hier nicht viel weiter, da ja die untere Schranke noch von Erwartungswerten von  $\rho$  abhängt, also nicht allgemein gilt. Auch wenn (3.3) häufig als Verallgemeinerung der Heisenbergschen Unschärferelation verkauft wird, unter anderem von Robertson selbst, hilft das nicht zur Bestimmung des freibleibenden Gebiets in Abb. 3.3. Für Ort und Impuls kann man aber weiter rechnen. Setzen wir  $A = Q - q_0 \mathbb{1}$  und  $B = P - p_0 \mathbb{1}$  und benutzen, dass dann auch  $[A, B] = i\hbar \mathbb{1}$  und

$$|\mathrm{tr} \rho AB|^2 \geq |\Im \mathrm{tr} \rho AB|^2 = \left| \frac{1}{2} \mathrm{tr} \rho [A, B] \right|^2 = \left| \frac{i\hbar}{2} \right|^2 = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (3.5)$$

Nach Einsetzen in (3.3) und Ziehen der Wurzel erhalten wir die berühmte Form

$$\boxed{\Delta_\rho(Q) \Delta_\rho(P) \geq \frac{\hbar}{2}}. \quad (3.6)$$

Wie bei jeder guten Ungleichung lohnt es sich, den Fall der Gleichheit genauer zu studieren. Die erste Abschätzung war die Ungleichung  $\mathrm{tr} \rho X^* X \geq 0$  mit  $X = Q - zP - \eta \mathbb{1}$ . Dabei haben wir in  $\eta = (q_0 - zp_0) \in \mathbb{C}$  die Verschiebungen zusammengefasst, die in die Definition der Varianzen eingehen. Aus der Gleichheit folgt hier  $X\rho = 0$  oder auch  $X\Psi = 0$  für jeden Eigenvektor von  $\rho$  mit positivem Erwartungswert. Wir betrachten

dies in der Ortsdarstellung:

$$x\Psi(x) - \frac{z\hbar}{i} \frac{d\Psi}{dx}(x) - \eta\Psi(x) = 0. \quad (3.7)$$

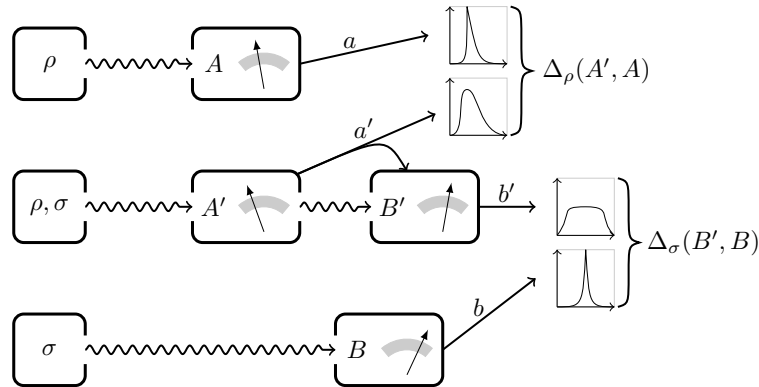
Das aber können wir als gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung für  $\Psi$  lesen und lösen. Das ergibt das Gaußsche Wellenpaket

$$\Psi(x) = C \exp\left(\frac{i}{2z\hbar} (x - \eta)^2\right). \quad (3.8)$$

Die einzige Freiheit hier war die Wahl der Integrationskonstante in der DGL, also der Konstante  $C$ . Damit sind alle Eigenvektoren von  $\rho$  mit positiven Eigenwerten gleich diesem  $\Psi$  und somit  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  bei geeigneter Wahl der Normierung  $C$ . Damit  $\Psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$  gilt, muss die Gaußfunktion im Unendlichen abfallen, also  $\Im z < 0$ . Ansonsten sind die Parameter  $z, \eta \in \mathbb{C}$  noch beliebig. Um auch Gleichheit in der Ungleichung (3.5) zu erhalten, muss nun zusätzlich  $\Re \operatorname{tr} \rho AB = 0$  sein. Von  $q_0, p_0 \eta$  hängt diese Eigenschaft nicht ab, wir können also  $\eta = 0$  setzen und brauchen  $\Re \langle Q\Psi, P\Psi \rangle = \Re(1/z) \|\Psi\|^2 = 0$ , also  $\Re z = 0$ .

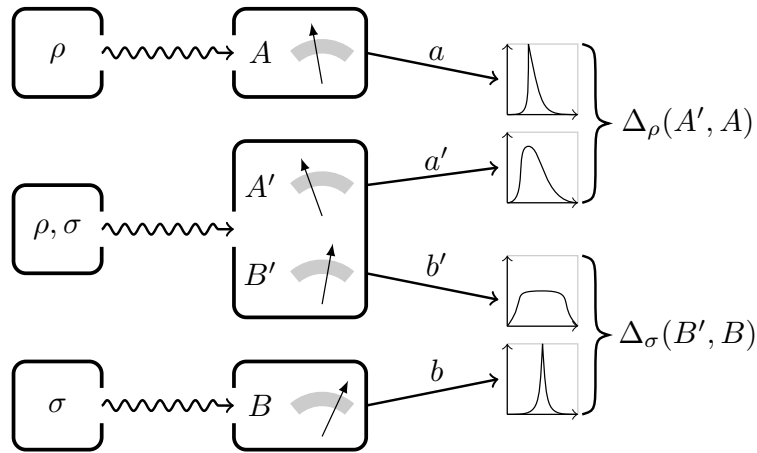
### 3.4 Messunschärfe

Das Grundschema für Messunschärferelationen ist in Abb. 3.4 und 3.5 dargestellt.



**Abb. 3.4:** Mess-Unschärferelation für Fehler und Störung: In der Mitte wird eine approximative  $A$ -Messung  $A'$  mit anschließender  $B$ -Messung gezeigt. Der “Fehler”  $\Delta(A, A')$  zeigt sich im Unterschied gemessener Verteilungen zu einer idealen  $A$ -Messung, die “Störung” im Unterschied der Verteilungen aus den  $B$ -Messungen direkt und nach der  $A'$ -Messung. Dabei wird als Input-Zustand jeweils der ungünstigste Fall genommen.

Dabei ist Abb. 3.4 eine direkte Umsetzung der Idee des Heisenbergschen Mikroskops, wobei  $A$  einer Ortsmessung,  $A'$  der durch das Mikroskop realisierten approximativen Ortsmessung und  $B$  der Impulsmessung entspricht. Die  $\Delta$ -Größen beschreiben nun den



**Abb. 3.5:** Mess-Unschärferelation für gemeinsame Messung: Dies ist eine Verallgemeinerung der Situation in Abb. 3.4. Der Apparat “A&B” in der Mitte liefert sowohl ein A-Ergebnis als auch ein B-Ergebnis. Die Marginalverteilungen werden mit denen entsprechender idealer Messungen verglichen.

Unterschied zwischen zwei Observablen, einer “idealen”  $A$  oder  $B$  und einer Approximation daran, also  $A'$  oder  $B' = “B \text{ nach der Messung}”$ . Natürlich ist  $\Delta(A, A') = 0$ , wenn kein Unterschied festzustellen ist, was in einer statistischen Theorie bedeutet: Die von diesen Apparaten aufgenommenen Output-Verteilungen stimmen für beliebige Inputs überein. Es wird also nicht darüber spekuliert, was im Einzelfall passiert wäre, wenn ich den anderen und nicht den einen Apparat genommen hätte. Wir werden also  $\Delta(A, A')$  so definieren, dass ein kleiner Wert bedeutet, dass alle Verteilungen in einem noch zu präzisierenden Sinn nahe beieinander liegen. Man sollte sich das wie eine Qualitätsstufe aus einem Datenblatt vorstellen: Der Hersteller garantiert auch bei beliebigen Inputs, dass das Messinstrument Ergebnisse innerhalb der Toleranzen liefert. In der Praxis sind die Inputs natürlich nicht ganz beliebig. Kein irdisches Messinstrument funktioniert vernünftig für Zustände, die hauptsächlich auf dem Jupiter lokalisiert sind. Dennoch: Es ist entscheidend für solche Kenngrößen, dass sie für einen größeren Bereich von Inputs gelten und nicht etwa für einen einzelnen Zustand. Wenn bekannt wäre, dass ein Prüflabor immer mit dem gleichen Zustand testet, könnte man den Test leicht bestehen, indem man nur die gesuchte Verteilung simuliert. Wir werden diesen Gedanken umsetzen, indem wir wirklich den ungünstigsten Fall bezüglich der Input-Zustände  $\rho$  zum Maßstab machen. Für die “Störung” gelten genau die gleichen Überlegungen. Woran erkennt man, dass beim Doppelspalt der Versuch den Durchgang durch eine der Spalten zu überprüfen, eine Störung des Systems bewirkt? Es ist das Verwaschen des Interferenzmusters, also die Veränderung der entsprechenden Verteilung. In diesem Sinne sind Fehler und Störung völlig analog definiert. Es ist daher naheliegend, beliebige Messungen zu betrachten, die in jedem Einzelexperiment einen Ortswert und einen Impulswert liefern (siehe Abb. 3.5). Das könnte eine sequentielle Orts-Impuls-Messung sein, aber auch eine in umgekehrter Reihenfolge oder etwas viel Komplexeres. Die Messunschärferelationen werden für all diese Situationen anwendbar sein.

Bevor wir zur quantitativen Definition der  $\Delta$ -Größen kommen, wollen wir den Fall  $\Delta(A, A') = \Delta(B, B') = 0$  diskutieren, also den Fall, dass zwei Observablen gemeinsam messbar sind. Dabei benutzen wir wieder den allgemeinen Observablenbegriff der positiv-operatorwertigen Maße: Die Ergebnismenge von  $A$  sei  $X$  und  $Y$  die von  $B$ . Das heißt, dass zu messbaren Mengen  $M \subset X$  ein positiver Operator  $A(M)$  definiert ist, sodass  $\text{tr } \rho A(M)$  die Wahrscheinlichkeit ist, bei Messung an nach  $\rho$  präparierten Systemen ein Ergebnis  $x \in M$  zu bekommen. Eine gemeinsame Messung ist also wiederum ein positiv-operatorwertiges Maß  $C$ , aber auf  $X \times Y$ . Das heißt, der entsprechende Apparat hat eine  $X$ -Anzeige und eine  $Y$ -Anzeige. Die dadurch effektiv gemessenen Observablen des  $A$ - oder  $B$ -Typs sind dann definiert durch  $A'(M) = C(M \times Y)$  und  $B'(N) = C(X \times N)$ , also durch Ignorieren der jeweils anderen Anzeige. Diese gemeinsame Messbarkeit ist eher selten. Nach dem Funktionalkalkül für vertauschbare Operatoren ist allerdings eine Möglichkeit klar, wie man gemeinsam messbare Observable bekommen kann: Wenn alle  $A(M)$  mit allen  $B(N)$  vertauschen, ist auch  $C(M \times N) = A(M)B(N)$  positiv und aus diesen Operatoren baut man unschwer ein positives Maß zusammen. Auch die Marginalbedingung ist wegen  $A(X) = B(Y) = \mathbb{1}$  erfüllt.

Dazu gibt es eine Umkehrung, die den Zusammenhang von gemeinsamer Messbarkeit und Vertauschbarkeit weiter bekräftigt: Wenn eine der beiden Observablen, sagen wir  $A$ , projektionswertig ist, also  $A(M)^2 = A(M)$  für alle  $M$ , dann ist die eben beschriebene Möglichkeit überhaupt die einzige für gemeinsame Messungen.

*Beweis:* Zum Beweis sei  $C$  eine gemeinsame Messung von  $A$  und  $B$ . Dann ist für alle  $N$ :  $A(M) = C(M \times Y) \geq C(M \times N)$ . Damit ist nach (2.63)  $C(M \times N) = A(M)C(M \times N)$ . Auch für das Komplement  $M' = X \setminus M$  gilt  $C(M' \times N) = A(M')C(M' \times N)$  und  $A(M)A(M') = 0$ , weil diese Projektoren orthogonal sind. Daher ist

$$\begin{aligned} C(M \times N) &= A(M)C(M \times N) + A(M)A(M')C(M' \times N) \\ &= A(M)(C(M \times N) + C(M' \times N)) \\ &= A(M)C(X \times N) = A(M)B(N) . \end{aligned} \tag{3.9}$$

Da dies als positiver Operator auch hermitesch ist, gilt auch  $A(M)B(N) = (A(M)B(N))^* = B(N)^*A(M)^* = B(N)A(M)$ , das heißt die beiden Observablen vertauschen. Außerdem gibt (3.9) eine explizite Formel für  $C$  als Produkt. ■

Für die meisten in dieser Vorlesung vorkommenden Standard-Observablen, also Hamiltonoperatoren, Orte, Impulse, Drehimpulse, die ja als projektionswertig angesetzt werden, ist damit die Frage der gemeinsamen Messbarkeit vollständig geklärt. Allerdings gibt es durchaus auch viele (nicht projektionswertige) Observable, die nicht vertauschen und doch gemeinsam messbar sind. Außerdem kann man natürlich auch approximative gemeinsame Messbarkeit betrachten, wofür genau die Mess-Unschärferelationen die quantitativen Einschränkungen darstellen.

Es ist leicht, zu jeder nicht-trivialen Observablen  $A$  eine andere, projektionswertige  $B$  anzugeben, die damit nicht vertauscht und also nicht gemeinsam damit messbar ist.



Dabei bedeutet “nicht-trivial”, dass man überhaupt etwas über den Input-Zustand aus der Messung erfährt, dass es also für irgend ein  $M$  zwei Zustände  $\rho_1$  und  $\rho_2$  gibt mit  $\text{tr } \rho_1 A(M) \neq \text{tr } \rho_2 A(M)$ . Das ist gleichbedeutend damit, dass dieses  $A(M)$  kein Vielfaches von  $\mathbb{1}$  ist und wiederum damit, dass es eine andere, projektionswertige Observable  $B$  gibt, die nicht mit  $A$  vertauscht. Zumindest die Werte dieser Observablen werden notwendig durch die Messung von  $A$  gestört. In diesem Sinne gilt das Prinzip

Keine Messung ohne Störung!

Wir müssen nun die Abweichungsgrößen  $\Delta(A, A')$  definieren. Dabei setzen wir voraus, dass die “ideale” Observable  $A$  projektionswertig ist. Da wir hauptsächlich an Ort, Impuls und anderen Standardobservablen interessiert sind, ist das aber keine Einschränkung. Wie würde man den “Fehler” einer approximativen Messung testen? Die vielleicht einfachste Möglichkeit ist, nachzuprüfen wie das Messgerät  $A'$  auf Zustände reagiert, in denen man einen “wahren Wert” kennt, und mit der Referenzobservablen  $A$  überprüfen kann. Diesen Vorgang nennen wir **Kalibrierung**.

Wir betrachten also einen Zustand  $\rho$ , der eine  $A$ -Verteilung nahe dem Wert  $\alpha$  ergibt, also etwa  $\text{tr}(\rho(A - \alpha\mathbb{1})^2) \leq \varepsilon$ . Wenn man Observable mit diskretem Spektrum betrachtet, kann man hier sogar  $\varepsilon = 0$  setzen, also  $\rho$  als Eigenzustand nehmen. Die Fehler von  $A'$  zeigen sich dann daran, dass die Verteilung nicht unbedingt nahe bei  $\alpha$  liegt, also daran dass die quadratische Abweichung von  $\alpha$  deutlich größer als  $\varepsilon$  ist. Diese Abweichung schreiben wir entsprechend als  $\text{tr } \rho A'[(a - \alpha)^2] = \int (a - \alpha)^2 \text{tr}(\rho A'(da))$ , wobei  $A'$  das positiv-operatorwertige Maß ist, das zu der getesteten approximativen  $A$ -Messung  $A'$  gehört, und wir aus Abschnitt 2.1.2 die Notation  $F[f] = \int f(x)F(dx)$  für Integrale über ein Maß benutzt haben. Die folgende Größe nennen wir dann den **Kalibrierfehler** von  $A'$  bezogen auf  $A$ :

$$\Delta_c(A, A') = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sup \left\{ \text{tr } \rho A'[(a - \alpha)^2] \mid \rho, \alpha \text{ mit } \text{tr}(\rho(A - \alpha)^2) \leq \varepsilon \right\}. \quad (3.10)$$

Die Projektionswertigkeit der Observablen  $A$  geht hier dadurch ein, dass die Definition nur sinnvoll ist, wenn es auch genügend viele Zustände kleiner  $A$ -Streuung gibt. Angewendet auf den Fall von Ort  $Q$  und Impuls  $P$  und die Marginalobservablen  $Q'$  und  $P'$  einer beliebigen Observablen mit zwei Outputs gilt dann die Relation

$$\Delta_c(Q, Q') \Delta_c(P, P') \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (3.11)$$

Der Beweis [BLW14] ist in zwei Schritten. Der erste zeigt konkret, wie man approximative gemeinsame Messungen von Ort und Impuls konstruieren kann. Dies sind spezielle, sogenannte kovariante Observablen, die zusätzlich eine Translationsinvarianz für sowohl Orts- als auch Impulstranslationen besitzen. Für diese Observablen sind die Marginalobservablen  $P'$  und  $Q'$  von besonders einfacher Struktur. Diese Messungen sind äquivalent zu den idealen Messungen, wobei zu jedem Messwert nachträglich noch eine Zufallszahl addiert wird. Dieses “Rauschen” ist unabhängig vom Input-Zustand, also eine Eigenschaft des Messapparats. Für scharf konzentrierte Zustände sieht man also

nur die Verteilung dieses Rauschens und seine Streuung ist genau die Größe  $\Delta_c(Q, Q')$  (entsprechend für  $P$ ). Es stellt sich heraus, dass die Verteilungen des Orts- bzw. Impulsrauschens genau die Orts- und Impulsverteilung eines Quantenzustandes  $\sigma$  sind, der in die Konstruktion der Observablen eingeht. Damit ist  $\Delta_c(Q, Q') = \Delta_\sigma(Q)$ , entsprechendes für  $P$ , und die Messunschärferelation ist auf die Präparierunschärferelation zurückgeführt. Gleichzeitig ist eine Observable konstruiert, für die die Gleichheit in (3.11) gilt: Wir müssen nur  $\sigma$  als reinen Gaußschen Zustand wählen.

All dies gilt allerdings nur für kovariante gemeinsame Messungen. Deshalb ist es im zweiten Schritt nötig, den Fall beliebiger Messungen durch Mittelung auf den Fall kovarianter Messungen zurückzuführen. Dazu sind funktionalanalytische Argumente nötig [Wer04, BLW14], auf die wir hier nicht weiter eingehen können. Der Fall kovarianter Messungen wird für Interessenten im folgenden Abschnitt skizziert.

In der Definition (3.10) kommt es nur auf Zustände mit scharfem Ort oder scharfem Impuls an. Das wirft die Frage auf, wie gut die Verteilungen für allgemeine Zustände übereinstimmen. Ist ein Messapparat  $A'$  mit  $\Delta_c(A, A')$  auch für beliebige Input-Zustände fast äquivalent zu  $A$ ? Man kann an Beispielen sehen, dass dies nicht allgemein der Fall sein wird. Besonders für reine Zustände, die Superpositionen weit entfernter  $A$ -Eigenfunktionen enthalten können  $A$  und  $A'$  sehr verschiedene Verteilungen liefern. Es liegt also nahe, eine schärfere Prüfbedingung zu fordern, die für alle Input-Zustände eine Aussage macht. Das liefert dann a priori größere  $\Delta(Q, Q') \geq \Delta_c(Q, Q')$ , für die also die Unschärferelation (3.11) erst recht erfüllt ist. Gerade für die kovarianten Observablen herrscht aber Gleichheit, sodass die besten Schranken und selbst die Werte am Optimum gleich sind.

✱

Im Rest dieses Abschnitts wird noch die allgemeinere Definition von  $\Delta(Q, Q')$  beschrieben. Für die physikalische Folgerung ist das nicht so entscheidend, kann also beim ersten Lesen überschlagen werden. Wir brauchen zunächst allgemein eine Bewertung für den Abstand zweier Wahrscheinlichkeitsmaße auf  $\mathbb{R}$  (oder allgemeiner auf einem metrischen Raum). Die Idee zu dieser sogenannten Transport-Metrik stammt von Gaspard Monge, der im 18. Jahrhundert über Festungsbau nachdachte. Er hatte für die Erdarbeiten das Problem, eine Erdverteilung (einen Hügel  $\mu$ ) in eine andere überführen (die Wallanlagen  $\nu$ ) zu lassen. Die Arbeiter wurden pro Eimer und proportional zur gelaufenen Strecke bezahlt. Wie teuer also wäre der Bau bei kluger Planung? Der Plan ist (bei einem eindimensionalen Problem) gegeben durch ein Maß  $\gamma$  auf  $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$ , dessen Wert für ein kleines Rechteck um  $(x, y)$  beschreibt, wie viel Erde jeweils von  $x$  nach  $y$  zu bringen ist. Die Marginalverteilungen von  $\gamma$  sind also die gegebene Verteilung  $\mu$  und die gewünschte Verteilung  $\nu$ . Man nennt dann  $\gamma$  eine Kopplung von  $\mu$  und  $\nu$ . Die Kosten bei diesem Plan sind dann  $\int \gamma(dx dy) |x - y|$ . Wir modifizieren dies noch, um ein Abstandsmaß zu bekommen, dass zu Varianzen und Streuungen passt und definieren den Abstand der Maße  $\mu$  und  $\nu$  als

$$D(\mu, \nu) = \inf_{\gamma} \left( \int \gamma(dx dy) |x - y|^2 \right)^{1/2}, \quad (3.12)$$

wobei das Infimum über alle Kopplungen  $\gamma$  gebildet wird. Wenn eines der beiden

Maße ein Punktmaß ist, dann gibt es nur eine Kopplung (das Produktmaß) und wir bekommen

$$D(\mu, \delta_x) = \left( \int \mu(dy) |x - y|^2 \right)^{1/2}, \quad (3.13)$$

also die mittlere quadratische Abweichung vom Punkt  $x$ . Die Streuung eines Wahrscheinlichkeitsmaßes ist also der kleinste Abstand von der Menge der Punktmaße. Wenn sich die Wahrscheinlichkeitsverteilungen  $\mu$  und  $\nu$  nur um Rauschen unterscheiden gibt es einen naheliegenden Transportplan, nämlich jeden Eimer so weit zu tragen, wie das Rauschen vorgibt. Wenn  $\sigma$  die Verteilung des Rauschens ist, gilt also  $D(\mu, \nu) \leq D(\sigma, \delta_0)$ . Der größte Abstand ergibt sich also, wenn das Ausgangsmaß  $\mu$  ein Punktmaß ist. Dies ist der Grund, warum für kovariante  $P$ & $Q$ -Messungen  $\Delta(Q, Q') = \Delta_c(Q, Q')$  gilt. \*

### 3.5 \*Kovariante gemeinsame Messungen

Dieser Abschnitt ist ein kurzer Abriss der Theorie approximativer gemeinsamer Messungen von Ort und Impuls unter besonderer Berücksichtigung der Translationssymmetrie in Ort und Impuls. Diese Symmetrie wird auf dem Hilbertraum  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx)$  dargestellt durch die unitären **Weyl-Operatoren**

$$(W(p, q)\Psi)(x) = \exp\left(\frac{-ipq}{2\hbar} + \frac{ipx}{\hbar}\right)\Psi(x - q). \quad (3.14)$$

Für  $p = 0$  ist das eine Translation im Ort und, wie man anhand der Tabelle in Abschnitt 2.4 sieht, eine Translation im Impuls für  $q = 0$ .

Unser Ziel ist, zu jedem Vektor  $\Psi$  eine Wahrscheinlichkeitsdichte im Phasenraum anzugeben, die also die Output-Verteilung einer Observablen mit  $(p, q)$  Outputs sein kann. Erstaunlicherweise liefern die Matricelemente der Weyl-Operatoren direkt solche Verteilungen. Wir bezeichnen mit  $\Pi$  den Paritäts-Operator  $(\Pi\Phi)(x) = \Phi(-x)$ . Es gilt dann für beliebige  $\Psi, \Phi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx)$  und ihre Fourier-Transformierten  $\hat{\Psi}, \hat{\Phi} \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dp)$ :

$$\int \frac{dp}{2\pi\hbar} |\langle \Phi, W(p, q)\Pi\Phi \rangle|^2 = \int dx |\Psi(x)|^2 |\Phi(q - x)|^2 \quad (3.15)$$

$$\int \frac{dq}{2\pi\hbar} |\langle \Phi, W(p, q)\Pi\Phi \rangle|^2 = \int dp' |\hat{\Psi}(p')|^2 |\hat{\Phi}(p - p')|^2. \quad (3.16)$$

*Beweis:* Diese Formeln sind Spezialfälle des Faltungskalküls in Abschnitt 5.9.1. Wir zeigen deswegen nur die erste Relation und lassen die zweite als Übung. Dazu führen wir die Funktion  $f_q(x) = \overline{\Psi(x)}\Phi(q - x)$  ein. Dann ist

$$\langle \Psi, W(p, q)\Pi\Phi \rangle = \sqrt{2\pi\hbar} e^{-ipq/(2\hbar)} (\mathcal{F}f_q)(-p). \quad (3.17)$$

Eingesetzt in (3.15) wird die linke Seite  $\|\mathcal{F}f_q\|^2 = \|f_q\|^2$ , was wiederum offenbar gleich der rechten Seite ist. ■

Insbesondere ist für normierte Vektoren  $\Phi, \Psi$  das Absolutquadrat des Weyl-Matrixelements eine Wahrscheinlichkeitsdichte auf dem Phasenraum. Wir fixieren nun einen Dichteoperator  $\sigma = |\Phi\rangle\langle\Phi|$  und definieren eine Observable  $F$  als positiv-operatorwertiges Maß

$$F(M) = \int \frac{dp dq}{2\pi\hbar} \chi_M(p, q) W(p, q) \Pi \sigma \Phi \Pi W(p, q)^* . \quad (3.18)$$

Gemessen an einem reinen Input-Zustand  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  hat das Wahrscheinlichkeitsmaß  $\text{tr } \rho F(\cdot)$  dann gerade die Dichte  $|\langle\Phi, W(p, q) \Pi \Psi\rangle|^2$ . Dass auch mit beliebiger Dichtematrix  $\sigma$  eine korrekt normierte Observable entsteht, folgt dann einfach durch Konvexkombination. Die so definierten Observablen sind genau die **kovarianten Phasenraum-Observablen**, womit Folgendes gemeint ist: Wenn der Zustand  $\rho$  mittels der Weyl-Operatoren um  $(p, q)$  verschoben wird, dann verschiebt sich die Output-Verteilung auch genau um diesen Vektor.

Für die Betrachtung der Unschärfen brauchen wir die Marginalverteilungen der Outputs und die wurden ja gerade in (3.15) und (3.16) berechnet. Es sind jeweils die Faltungen zweier Verteilungen. Die rechte Seite von (3.15) ist  $(|\Psi|^2 * |\Phi|^2)(q)$ , also die Verteilung der Ortsverteilung des Input-Zustands  $\Psi$ , gefaltet mit der festen Verteilung  $|\Phi|^2$ , die die Observable  $F$  und also das Messinstrument charakterisiert. Die Faltung zweier Wahrscheinlichkeitsverteilungen ist aber genau die Verteilung der Summe zweier unabhängiger Terme. Die Orts-Marginalverteilung einer kovarianten Observablen lässt sich also einfach simulieren, indem man eine Standard-Ortsmessung durchführt und zum Ergebnis eine zufällig nach der Verteilung  $|\Phi|^2$  gezogene Verschiebung addiert [►Bild]. Dabei ist dieses “Rauschen” statistisch unabhängig vom Input. Für den Impuls gilt ganz das Gleiche, nur dass jetzt die Verteilung des Rauschens  $|\hat{\Phi}|^2$  ist. Insbesondere ist für jedes  $q_0 \in \mathbb{R}$ :

$$\int \text{tr } \rho F(dp, dq) (q - q_0)^2 = \text{tr}(\rho(Q - q_0)^2) + \text{tr}(\sigma Q^2) . \quad (3.19)$$

Bei der Definition des Kalibrierungsabstands wird nun einfach gefordert, dass der erste Term klein wird. Was also bleibt, ist der zweite, sodass

$$\Delta_C(Q, Q') = \sqrt{\text{tr}(\sigma Q^2)} = \Delta_\sigma(Q) . \quad (3.20)$$

Dabei gilt die zweite Gleichung nur, wenn man zusätzlich  $\text{tr } \sigma Q = 0$  wählt, also einen durch Verschiebung um eine Konstante leicht behebbaren systematischen Fehler schon eliminiert hat. Da für den Impuls alles analog ist, wird das Messunschärfeprodukt (3.11) einfach gleich dem Präparierunschärfeprodukt (3.6) für die Dichtematrix  $\sigma$ , die in die Definition (3.18) der Observablen eingeht.

## Anmerkungen zum Kapitel 3

### Zu Abschnitt 3.1 und 3.2 (Komplementarität)

Natürlich sind Bohrs gesammelte Werke mit der kurzen Formel, dass eben eine Wahl der Instrumente zu treffen sei, nicht adäquat zusammengefasst. Vor allem habe ich mir keine Mühe gegeben, die Entwicklung in seinen Schriften nachzuzeichnen. Auch zum Begriff der Komplementarität gibt es mathematische Definitionen, die sich auf das Verhältnis zwischen zwei Observablen beziehen und Abstraktionen der Relation zwischen Ort und Impuls sind [BLM91, Eng96].

Die genauere Analyse der Heisenbergschen Arbeit findet sich in [WF19]. Die erwähnte falsche Zusatzvoraussetzung ist, dass die Genauigkeit einer Ortsmessung gleich der Breite des Wellenpakets nach der Messung ist. Diese Gleichsetzung basiert auf dem naiven Wissensbegriff bei Heisenberg, der nicht unterscheidet ob das Wissen durch Präparation aufgeprägt wurde oder durch Messung gewonnen wurde, und damit den Unterschied zwischen Präparier- und Messunschärfe einebnet. Der grobe Schnitzer ist, den Zusammenhang der Streuungsparameter für Ort und Impuls am Gaußschen Wellenpaket nachzurechnen (also Unschärferelation mit Gleichheit!) und dann wie ein Faktum zu behaupten, das werde wohl immer so sein.

Ich habe auf die Darstellung von Energie-Zeit Unschärferelationen verzichtet. Bei Heisenberg steht auch dazu etwas naiv Halbklassisches, aber die Präzisierung im Rahmen der Quantenmechanik scheiterte lange Zeit an der Unklarheit, wie die Zeit hier eigentlich zu behandeln ist. Liest man hier “Ankunftszeit” oder “Zeit eines Detektor-Klicks” und präzisiert das durch geeignete Observable, gelten wieder Präparierunschärferelationen [KRSW12] und [Hol82, Sect. III§8]. Die Darstellung der relevanten Observablen sprengt aber an dieser Stelle den Rahmen. Für Heisenbergs “Dauer der Messung” und “Dauer eines Quantensprungs” fällt mir keine mitteilenswerte Präzisierung ein.

### Zu Abschnitt 3.3 (Präparierunschärfe)

Dies ist weitgehend Standard. Was ich nicht mitgemacht habe, ist die verbreitete Beschränkung von “Unschärferelationen” auf untere Schranken an das *Produkt* von Varianzen. Das ist völlig kontraproduktiv für beschränkte Größen, wie Abb. 3.3 zeigt.

### Zu Abschnitt 3.4 (Messunschärfe)

Das Prinzip “Keine Messung ohne Störung” lässt sich auch quantitativ fassen [KSW08].

## Aufgaben zum Kapitel 3



# Kapitel 4

## Potentialprobleme in einer Dimension

### 4.1 Freie Teilchen

#### 4.1.1 Dispersionsrelationen

Ein freies Teilchen ist dadurch definiert, dass seine Dynamik keinen Ort auszeichnet, also mit den Translationen vertauscht. Das für uns wichtigste Beispiel ist ein Teilchen der Masse  $m$  ohne irgendwelche äußeren Potentiale, also ein Teilchen mit Hamiltonoperator  $H = P^2/(2m)$ . Daher können wir den Hamiltonoperator zusammen mit den Translationen diagonalisieren und so den Zeitentwicklungsoperator auch für sehr große Zeiten auswerten. Dieser Gedanke gilt auch für Teilchen in beliebigen Dimensionen und anderen Hamiltonoperatoren, zum Beispiel einer relativistischen kinetischen Energie. Auch auf einem Gitter (d.h. bei diskretem Ort) für Dynamik in diskreten Zeitschritten und für Teilchen mit inneren Freiheitsgraden ist dies das Verfahren der Wahl. Um nicht unnötig durch Allgemeinheit zu verwirren bleiben wir bei Teilchen im  $\mathbb{R}^n$ , also dem Hilbertraum  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n, d^n x)$  und dem Hamiltonoperator

$$H = \omega(P) = \omega(P_1, P_2, \dots, P_n) , \quad (4.1)$$

wobei  $\omega : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  eine geeignete differenzierbare Funktion ist und der Operator im gemeinsamen Funktionalkalkül der vertauschenden Impulsoperatoren (1.31) zu bestimmen ist. Das heißt aber einfach: Wir definieren den Operator als Multiplikationsoperator nach Fourier-Transformation, denn dies ist ja die Transformation, die die Impulsoperatoren gemeinsam auf Multiplikationsform bringt. Letzten Endes sind wir hauptsächlich interessiert an den Fällen  $\omega(p) = p^2/(2m)$  (nichtrelativistische Teilchen),  $\omega(p) = c\sqrt{p^2 + (mc)^2}$  (massive relativistische Teilchen) und  $\omega(p) = c|p|$  (Photonen).

Einen solcher Zusammenhang zwischen Energie und Impuls kann man natürlich auch in der klassischen Mechanik ansetzen. Die Bewegungsgleichungen sind dann schnell

gelöst: Der Impuls ist erhalten und  $\dot{q}_\alpha = \partial\omega/(\partial p_\alpha)$  oder

$$q(t) = q(0) + t\nabla\omega(p) . \quad (4.2)$$

Wir werden sehen, dass diese Gleichung, entsprechend in Operatoren interpretiert, auch den Kern der Ausbreitung freier Wellenpakete enthält.

### 4.1.2 Zerfließen des Wellenpakets

Der Ausdruck “Wellenpaket” wird für räumlich begrenzte Funktionen, wie etwa  $\Psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3, dx)$  gebraucht, im Gegensatz zu ebenen Wellen. Vom Standpunkt der statistischen Interpretation gibt es also nur solche “Pakete” und die Diskussion ebener Wellen ist bestenfalls eine etwas verkürzte Art, über die Fourier-Transformation zu sprechen, mit der die “Pakete” aus ebenen Wellen geschnürt werden. In der Frühzeit der Quantenmechanik galten gut lokalisierte Wellenpakete außerdem als eine Art Ersatz für Teilchen. Gemessen daran war eine Eigenschaft der Wellenpakete etwas störend: Sie “flossen auseinander”, was für Teilchen ja wirklich ein ungebührliches Betragen ist. Das Zerfließen des Wellenpakets galt danach als typisch quantenmechanischer Effekt. Wenn man allerdings  $\Psi$  konsequent statistisch deutet, ist nichts Paradoxes an diesem Vorgang: Warum soll schließlich eine Wahrscheinlichkeitsverteilung nicht mit der Zeit breiter werden? Für klassisch mechanische Teilchen dominiert zu großer Zeit der zeitlich wachsende Term den Ort, es gilt also für jede Teilchenbahn  $\lim_{t \rightarrow \infty} q(t)/t = \nabla\omega(p)$ . Demnach vergisst ein Teilchenschwarm seine anfängliche Ortsverteilung und für große Zeiten sieht man nur noch die Verteilung der Geschwindigkeit  $\nabla\omega$ , die wiederum allein von der anfänglichen Impulsverteilung abhängt. Das Ziel dieses Abschnitts ist zu zeigen, dass genau das auch in der Quantenmechanik gilt, natürlich mit der Ausnahme der Aussage über die Bahnen einzelner Teilchen. Das “Zerfließen des Wellenpakets” ist gerade ein “klassischer” Effekt.

Wir interessieren uns für die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Ortes zu verschiedenen Zeiten, besonders zu großer Zeit, das heißt, für die Ergebnisse von Ortsmessungen, wenn zwischen Präparation und Messung eine große Zeit  $t$  verstrichen ist. Wie am Ende von Abschnitt 1.7 angesprochen, haben wir zwei äquivalente Alternativen, um dieses Problem anzugehen: das Heisenbergbild und das Schrödingerbild. Im Schrödingerbild würden wir die Schrödingergleichung  $i\hbar\partial_t\Psi_t = H\Psi_t$  lösen, und dann das Ergebnis als  $|\Psi_t(x)|^2$  ablesen. Wir werden die Rechnung im Heisenbergbild durchführen, d.h. wir halten  $\Psi$  (oder die Dichtematrix  $\rho$ ) fest und berechnen die Operatoren

$$Q_\mu(t) = e^{itH/\hbar}Q_\mu e^{-itH/\hbar} . \quad (4.3)$$

Die gesuchte Wahrscheinlichkeitsverteilung ergibt sich dann durch die Erwartungswerte der Spektralprojektoren  $\chi_S(Q(t))$ .

Als nächstes suchen wir passende “Koordinaten”, in denen wir unsere Rechnung durchführen können. Wegen des Auftretens der Exponentialfunktion ist es naheliegend,



eine Darstellung des Hilbertraums zu wählen, in der der Operator  $H$  nach (4.1) ein Multiplikationsoperator ist, also die Impulsdarstellung  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3, dp)$ . Dann ist  $Q_\mu = Q_\mu(0) = i\hbar(\partial/\partial p_\mu)$ . Nach Produktregel ist

$$\begin{aligned} (Q_\mu(t)\hat{\Psi})(p) &= e^{it\omega(p)/\hbar}(Q_\mu(0)e^{-itH/\hbar}\hat{\Psi})(p) \\ &= e^{it\omega(p)/\hbar}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p_\mu}\right)(e^{-it\omega(p)/\hbar}\hat{\Psi}(p)) \\ &= t\frac{\partial\omega(p)}{\partial p_\mu}\hat{\Psi}(p) + i\hbar\frac{\partial\hat{\Psi}(p)}{\partial p_\mu}, \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} \text{also} \quad Q_\mu(t) &= t\frac{\partial\omega}{\partial p_\mu}(P) + Q_\mu(0) \\ &= tV_\mu + Q_\mu(0), \end{aligned} \quad (4.5)$$

wobei  $V_\mu$  die Funktion  $\partial\omega/\partial p_\mu$  ist, ausgewertet im Funktionalkalkül der  $P_\nu$ . Dies ist die genaue Entsprechung der klassischen Relation (4.2). Den Operator können wir also **Geschwindigkeitsoperator** nennen. Den Ausdruck  $\partial\omega/\partial p_\mu$  bezeichnet man auch als “Gruppengeschwindigkeit”, weil er die Geschwindigkeit von “Gruppen”, also Wellenpaketen beschreibt. Für nichtrelativistische Teilchen bekommen wir  $V = P/m$ .

Um die Zeitabhängigkeit des Erwartungswertes von  $Q_\mu(t)$  zu bekommen, braucht man nun nur noch auf beiden Seiten von (4.4) die Spur mit  $\rho$  zu nehmen. Die Operatorgleichung enthält aber viel mehr Information als nur das: Die Diagonalisierung der Operatoren  $Q_\mu(t)$  enthält ja alle Information über die Wahrscheinlichkeitsverteilungen des Ortes zur Zeit  $t$  in beliebigen Zuständen. Insbesondere bekommt man für jede stetige Funktion  $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ , die im Unendlichen gegen Null geht, und für alle Dichtematrizen  $\rho$ :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \text{tr}(\rho f(Q(t)/t)) = \text{tr}(\rho f(V)) . \quad (4.6)$$

Die technischen Voraussetzungen an  $f$  sind hier nötig um die Konvergenz auch für unbeschränkte Operatoren wie  $Q_\mu$  und  $V_\mu$  zu garantieren. Mathematisch wird die angegebene Konvergenzaussage als “schwache Konvergenz” der Verteilungen bezeichnet.

Das Aussehen der Ortswahrscheinlichkeitsverteilung zu großen Zeiten ist also völlig von der gemeinsamen Verteilung der Operatoren  $V_\mu$  bestimmt. Bei den relativistischen Ausdrücken für die kinetische Energie bleibt die Verteilung also innerhalb einer sich mit Lichtgeschwindigkeit aufblähenden Kugel. Für  $\omega(p) = c|p|$  liegt die Verteilung asymptotisch auch “genau” (d.h. mit jeder zu  $t$  proportionalen Genauigkeit) darauf. Ein “Zerfließen” des Wellenpakets passiert hier also nur quer zur Ausbreitungsrichtung (und in einer Dimension gar nicht).

Am Verhalten von  $Q(t)$  für große Zeiten ist also überhaupt kein Unterschied zwischen klassischen und quantenmechanischen Teilchen zu sehen. Wenn man will, so liegt das daran, dass der Kommutator von  $P$  mit  $Q/t$  etwa  $\hbar/t$  ist, also in diesem Grenzfall gegen Null geht: Wir haben es mit einem verkappten klassischen Limes zu tun. Bei endlichem  $t$  zeigen sich aber deutliche Unterschiede, wie das folgende Beispiel zeigt.

Beispiel: *Ortsverteilungen zu allen Zeiten.*

Angenommen man kennt für eine feste Präparation  $|\Psi\rangle\langle\Psi|$  nichtrelativistischer massiver Teilchen mit  $\omega(p) = p^2/(2m)$  die Ortswahrscheinlichkeitsdichte  $|\Psi_t(x)|^2$  für alle Zeiten  $t$ . Kann man daran erkennen, dass es sich um quantenmechanische Teilchen handelt und nicht um klassische freie Teilchen?

Im Heisenberg-Bild ausgedrückt, ist uns also die Verteilung aller Operatoren  $Q + tP/m$  gegeben, d.h., die Erwartungswerte von  $f(Q + tP/m)$  für beliebige Funktionen  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ . Die entsprechenden Erwartungswerte lassen sich auch in der klassischen Mechanik bilden, wobei die Präparation durch Phasenraumdichte  $s$  bei  $t = 0$  beschrieben wird. Wir suchen also nach einer solchen Dichte  $s$ , die für alle  $t$  und alle Funktionen  $f$  die Gleichung

$$\langle\Psi|f(Q + tP/m)|\Psi\rangle = \int dp dq s(p, q) f(q + pt/m) \quad (4.7)$$

erfüllt. Es sollen also die Verteilungen beliebiger Linearkombinationen von  $Q$  und  $P$  mit ihren klassischen Entsprechungen übereinstimmen. Es stellt sich heraus, dass eine solche Funktion stets existiert und eindeutig bestimmt ist. Man muss nur  $f(z) = \exp(iz)$  setzen, um zu sehen, dass die Fouriertransformierte von  $s$  sich direkt durch quantenmechanische Erwartungswerte (von Weyl-Operatoren) ausdrücken lässt. Man nennt diese Funktion  $s$  auch die **Wigner-Funktion** von  $\Psi$ . Nur: Sie ist im Allgemeinen nicht positiv, also keine Wahrscheinlichkeitsdichte. Die einzigen Wellenfunktionen, für die  $s$  positiv ausfällt, sind die Gaußschen Wellenpakete (Satz von Hudson [Hud74]). Außer in diesem sehr speziellen Fall kann man also den zu verschiedenen Zeiten gemessenen Ortsverteilungen ansehen, dass sich hier keine freien klassischen Teilchen (mit statistisch verteilten Anfangsdaten) bewegen.  $\diamond$

Die interessanteren Unterschiede zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik (und die wichtigeren Anwendungen der Quantenmechanik) finden sich allerdings bei Teilchen in äußeren Potentialen oder in Wechselwirkung miteinander. Daher brechen wir die Behandlung freier Teilchen hier ab.

## 4.2 Teilchen im Kasten

Wenn die Bewegungsfreiheit eines Teilchens durch äußere Wände eingeschränkt wird, äußert sich das zunächst einmal in der Einschränkung in den möglichen Werten der Ortsvariablen  $x$ . Wenn das Teilchen sich nur in einem Gebiet  $G \subset \mathbb{R}^3$  bewegen kann, modifizieren wir den Hilbertraum erst einmal zu  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(G, dx)$ , d.h. Wellenfunktionen sind nur noch auf  $G$  definiert und im Skalarprodukt wird die Integration ebenfalls auf  $G$  eingeschränkt. ( $G$  ist dann also das gemeinsame Spektrum der Ortsoperatoren  $Q_\mu$ ).

Den Hamiltonoperator versuchen wir erst einmal wieder als  $H = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta$  anzusetzen. Das geht allerdings leider schief. Das Versagen dieses Ansatzes macht in gewisser Weise den ganzen Unterschied zwischen Systemen im endlichen und im unendlichen

Raumgebiet aus, und ist auch entscheidend für die Quantisierung der Energie im endlichen Gebiet. Wir betrachten den eindimensionalen Fall, mit dem Einheitsintervall  $G = [0, 1]$  als Gebiet. Betrachten wir die Funktion  $\Psi(x) = e^{\lambda x}$ , für eine beliebige Zahl  $\lambda \in \mathbb{C}$ . Dann ist

$${}^{\text{“}H\text{”}}\Psi(x) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = \frac{-\hbar^2 \lambda^2}{2m} \Psi(x) , \quad (4.8)$$

d.h. für  $\lambda = 1 + i$  ist  $\Psi(x)$  Eigenvektor von “ $H$ ” zum *imaginären !!* Eigenwert  $2i\hbar^2/2m$ . Das verträgt sich nicht mit der gewünschten Hermitizität von  $H$ . Was da schiefgegangen ist, sieht man am Beweis der Hermitizität von  $H$  durch partielle Integration: Die Randterme fallen bei einem endlichen Intervall eben nicht automatisch weg.

Man kann die Hermitizität von  $H$  wieder herstellen, wenn man den Definitionsbereich von  $H$  auf solche Funktionen einschränkt, die gewisse **Randbedingungen** erfüllen. Diese Randbedingungen sind letztlich eine idealisierte Beschreibung der Wechselwirkung zwischen Teilchen und Wand (also einem Festkörper, der wiederum aus vielen Teilchen besteht). Eine häufig benutzte Randbedingung für den Hamiltonoperator ist die sogenannte Dirichlet-Randbedingung: Im Definitionsbereich von  $H$  werden nur Funktionen zugelassen, die auf dem Rand von  $G$  verschwinden.

Wenn das Gebiet  $G \subset \mathbb{R}^3$  endlich ist, hat der Hamiltonoperator  $H$  für freie Teilchen rein diskretes Spektrum, d.h. es gibt eine Basis aus Eigenfunktionen. Wir beginnen mit der Berechnung der Eigenfunktionen für den einfachsten Fall: ein “eindimensionales” Teilchen im Intervall  $[0, L] \subset \mathbb{R}$ . Die Eigenwertgleichung (Eigenwert  $E$ ) lautet dann also

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Psi''(x) = E \Psi(x) \quad (4.9)$$

$$\Psi(0) = \Psi(L) = 0 . \quad (4.10)$$

Dies ist eine lineare Differentialgleichung mit konstanten Koeffizienten, für die man die Basislösungen durch den Exponentialansatz  $\Psi(x) = e^{\mu x}$ , mit  $\mu \in \mathbb{C}$  bekommt. Einsetzen ergibt die Gleichung  $\mu^2 = -2mE/\hbar^2$ , also  $\mu = \pm i\sqrt{2mE}/\hbar$ , und damit (wie zu erwarten) zwei linear unabhängige Lösungen. Die allgemeine Lösung der Differentialgleichung ist damit:  $\Psi(x) = Ae^{\mu x} + Be^{-\mu x}$ , wobei  $\mu$  eine der beiden Lösungen ist, und  $A, B \in \mathbb{C}$ . Die Randbedingung  $\Psi(0) = 0$  erzwingt  $B = -A$ . Es bleibt also die Gleichung  $A(e^{\mu L} - e^{-\mu L}) = 0$  oder äquivalent:  $e^{2\mu L} = 1$ . Dies bedeutet  $2\mu L = n \cdot 2\pi i$  mit  $n \in \mathbb{Z}$ . Also ist  $\mu = in\pi/L$ , und die Eigenfunktion  $\Psi(x) = 2iA \sin(n\pi x/L)$ . Offensichtlich geben  $n$  und  $-n$  bis auf ein Vorzeichen die gleiche Eigenfunktion, und  $n = 0$  scheidet aus, weil  $\Psi = 0$  nie als Eigenfunktion zählt. Nach Normierung bekommen wir also die Eigenfunktionen und Eigenwerte

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \quad \text{und} \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad \text{für } n = 1, 2, \dots \quad (4.11)$$

Die  $\varphi_n$  bilden eine Basis von  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2([0, L], dx)$  und damit einen unitären Operator  $U : \mathcal{H} \rightarrow \ell^2(\mathbb{N})$ , nämlich  $(U\Psi)(n) = \langle \varphi_n, \Psi \rangle$ , der  $H$  diagonalisiert. Den Zeitentwicklungsoperator  $U_t = \exp(-itH/\hbar)$  bekommt man also durch Entwickeln nach der Basis

$\varphi_n$  (=Anwendung von  $U$ ), triviale Anwendung von  $U_t$  auf die Basisvektoren (=Multiplikation mit einer Funktion von  $n$ ) und Aufsummation der Reihe mit den neuen Komponenten (=Anwendung von  $U^*$ ):

$$U_t \Psi = \sum_n \varphi_n e^{-itE_n/\hbar} \langle \varphi_n, \Psi \rangle . \quad (4.12)$$

Als Merkregel in der Diracschen Bra-Ket Schreibweise also wiederum

$$U_t = \sum_n |\varphi_n\rangle e^{-itE_n/\hbar} \langle \varphi_n| . \quad (4.13)$$

Für ein dreidimensionales Teilchen in einer quaderförmigen Kiste ist damit die wesentliche Arbeit schon geleistet. Wir betrachten also das Gebiet

$$G = \left\{ (x_1, x_2, x_3) \mid 0 \leq x_\mu \leq L_\mu, \mu = 1, 2, 3 \right\} , \quad (4.14)$$

wobei  $L_1, L_2, L_3$  die Kantenlängen des Quaders sind. Der Hamiltonoperator ist nun  $(-\hbar^2/2m)\Delta$ , wieder mit der Randbedingung, dass Funktionen im Definitionsbereich von  $H$  auf dem Rand des Gebietes verschwinden. Zur Lösung der Eigenwertgleichung macht man einen **Separationsansatz**

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = \Phi_1(x_1)\Phi_2(x_2)\Phi_3(x_3) \quad (4.15)$$

und bekommt, dass die Funktion  $\Phi''_\mu/\Phi_\mu$  nicht mehr von  $x_\mu$  abhängt, also eine Eigenfunktion für das eben diskutierte Problem eines eindimensionalen Intervalls sein muss. Damit bekommen wir also Eigenfunktionen und Eigenwerte

$$\varphi_{n_1, n_2, n_3}(x_1, x_2, x_3) = \prod_{\mu=1}^3 \sqrt{\frac{2}{L_\mu}} \sin\left(\frac{n_\mu \pi}{L_\mu} x_\mu\right) \quad (4.16)$$

$$E(n_1, n_2, n_3) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \sum_{\mu=1}^3 \left(\frac{n_\mu}{L_\mu}\right)^2 . \quad (4.17)$$

Was kann man über anders geformte Kisten aussagen? Ein Separationsansatz funktioniert nur in wenigen Fällen, in denen man Koordinaten finden kann, in denen sich die Form der Kiste leicht beschreiben lässt, und in der der Laplace-Operator außerdem in eine Summe von zweiten Ableitungen zerfällt. Außer dem Quader kann man so noch die Kugel behandeln und auch noch Ellipsoide. Für allgemeine Gebiete  $G$  ist die Bestimmung der Eigenfunktionen und Eigenwerte des Laplace-Operators nicht geschlossen möglich, aber ein Problem, das bei verschiedenen Wellenphänomenen in der Physik eine Rolle spielt (Hohlraum-Resonanz, Eigenschwingungen einer gespannten Membran). Das Spektrum enthält dann viel an Information über das Gebiet, wenn auch Mark Kac's Frage "Can you hear the shape of a drum?" wohl negativ beantwortet werden muss [Kac66]. Wichtig für die statistische Mechanik ist das Verhalten bei großen Energien. Hier gilt für Systeme mit  $d$  Freiheitsgraden die Faustregel:

$$\boxed{\text{Anzahl der Eigenzustände unterhalb der Energie } E} \approx \boxed{\text{Phasenraum-Volumen des klassischen Problems in Einheiten von } h^d} . \quad (4.18)$$

Diese Formel wird gut (in einem geeignet präzisierten Sinn exakt) für große Intervalle, bei hohen Energien oder auch im klassischen Limes  $\hbar \rightarrow 0$ , und geht auf Herrmann Weyl zurück. Wir werden sie noch verschiedentlich antreffen.

Beispiel: *Weylsche Asymptotik für das Intervall.*

Auf der linken Seite von (4.18) bekommen wir nach (4.11) unterhalb von  $E$  die Eigenwerte  $E_n$  mit  $n \leq \sqrt{2mE} \cdot L/(\pi\hbar)$ . Bis auf Rundung zur nächsten ganzen Zahl ist dieser Ausdruck also die gesuchte Anzahl. Für die rechte Seite von (4.18) betrachten wir das Phasenraumgebiet für ein klassisches Teilchen im Ortsintervall  $[0, L]$  mit kinetischer Energie  $p^2/2m \leq E$ , also das Rechteck

$$\{(x, p) \mid 0 \leq x \leq L \quad \text{und} \quad -\sqrt{2mE} \leq p \leq \sqrt{2mE}\} . \quad (4.19)$$

Dies hat das Volumen  $V_E = 2L\sqrt{2mE}$  mit der Einheit “Ort mal Impuls”, also der gleichen Einheit wie  $\hbar$ . Die Faustregel lässt also unterhalb der Energie  $E$  gerade  $V_E/(2\pi\hbar)$  Zustände vermuten, was hier (bis auf Rundung) genau mit dem quantenmechanischen Ergebnis übereinstimmt. Natürlich stimmt die Faustregel selten so gut, bietet aber oft eine gute qualitative Einsicht.  $\diamond$

## 4.3 Harmonischer Oszillator

Der Hamiltonoperator eines eindimensionalen Oszillators ist gegeben durch

$$H = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{m\omega^2}{2}Q^2 , \quad (4.20)$$

wobei  $\omega$  die Frequenz des klassischen Oszillators mit dem gleichen Potential ist. Einen groben Überblick über die Eigenwerte von  $H$  gibt wiederum die klassische Faustregel: Der Bereich im klassischen Phasenraum mit Energie  $\leq E$  ist

$$\Gamma(E) = \{(q, p) \mid \left(\frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2}q^2\right) \leq E\} . \quad (4.21)$$

Dies ist eine Ellipse mit den Halbachsen  $\sqrt{2mE}$  und  $\sqrt{2E/(m\omega^2)}$ . In Einheiten von  $h$  hat sie die Fläche

$$\frac{1}{h} \pi \sqrt{2mE} \sqrt{2E/(m\omega^2)} = \frac{E}{\hbar\omega} . \quad (4.22)$$

Nach der klassischen Regel ist dies also etwa die Anzahl der Eigenwerte unterhalb  $E$ . Im Gegensatz zum Intervall wächst also hier der  $n$ -te Eigenwert linear und nicht quadratisch.

Der Oszillator tritt in vielen Kontexten der Physik auf: nämlich immer dann, wenn man kleine Bewegungen um eine Gleichgewichtslage näherungsweise untersucht. Ein freies Quantenfeld lässt sich als System von unendlich vielen Oszillatoren analysieren. Man kann auch sagen: Viele Probleme werden so lange verstümmelt, bis sie auf ein System von Oszillatoren zurückführt und damit lösbar werden. Es lohnt sich jedenfalls, dieses System genau kennenzulernen. Deshalb werden wir auch mehrere Betrachtungsweisen untersuchen.

### 4.3.1 Leiteroperatoren

Die direkteste Methode, das Spektrum zu erhalten, basiert auf der Beobachtung, dass sich  $H$  (im Wesentlichen) als Quadrat einer komplexen Linearkombination von  $P$  und  $Q$  schreiben lässt. Wir setzen

$$A = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} Q + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} P, \quad (4.23)$$

sodass

$$AA^* = \frac{m\omega}{2\hbar} Q^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} P^2 + \frac{i}{2\hbar}(PQ - QP) \quad (4.24)$$

$$A^*A = \frac{m\omega}{2\hbar} Q^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar} P^2 - \frac{i}{2\hbar}(PQ - QP). \quad (4.25)$$

Unter Verwendung der kanonischen Vertauschungsrelationen ist damit

$$\boxed{\begin{aligned} \mathbb{1} &= AA^* - A^*A \\ H &= \hbar\omega \left( A^*A + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}}. \quad (4.26)$$

Zunächst ist aus dieser Form von  $H$  klar, dass  $H \geq \hbar\omega/2$ . Der Oszillator ist also niemals “in Ruhe”:  $Q = 0$  und  $P = 0$  können wegen der Unschärferelation nicht beide beliebig genau präpariert werden.

Ist die “Nullpunktsenergie”  $\hbar\omega/2$  selbst ein Eigenwert? Der zugehörige Eigenvektor  $\varphi_0$  müsste die Gleichung  $A^*A\varphi_0 = 0$ , also  $\|A\varphi_0\| = 0$ , also  $A\varphi_0 = 0$  erfüllen. Bis auf Vorfaktoren ist dies genau die gewöhnliche Differentialgleichung (3.7), die wir schon zur Bestimmung der Zustände minimaler Unschärfe angetroffen hatten. Der Oszillator-Grundzustand ist also genau ein Zustand minimaler Unschärfe. Mit den Konstanten des Oszillators bekommen wir

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x\varphi_0(x) + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}} \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}\varphi_0(x) = 0, \quad (4.27)$$

also

$$\varphi_0'(x) = -\frac{m\omega}{\hbar} x\varphi_0(x), \quad (4.28)$$

mit der Lösung

$$\varphi_0(x) = N \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} \frac{x^2}{2}\right). \quad (4.29)$$

Für die weitere Rechnung brauchen wir die Relationen

$$HA^* = A^*H + \hbar\omega A^*, \quad \text{und} \quad (4.30)$$

$$HA = AH - \hbar\omega A, \quad (4.31)$$

die unmittelbar aus (4.26) folgen. Aus der Eigenwertgleichung  $H\Psi = E\Psi$  folgt nun  $HA^*\Psi = A^*E\Psi + \hbar\omega A^*\Psi = (E + \hbar\omega)A^*\Psi$ . Also erfüllt  $A^*\Psi$  die Eigenwertgleichung

zum Eigenwert  $E + \hbar\omega$ . Wegen  $\|A^*\Psi\|^2 = \langle \Psi, AA^*\Psi \rangle = \langle \Psi, (A^*A + \mathbb{1})\Psi \rangle \geq \langle \Psi, \Psi \rangle > 0$  kann  $A^*\Psi$  auch nicht Null sein: Wir bekommen also wirklich einen neuen Eigenvektor. Startend von  $\varphi_0$  erhalten wir so die Eigenvektoren und Eigenwerte

$$\boxed{\begin{aligned}\varphi_n &= \frac{(A^*)^n \varphi_0}{\|(A^*)^n \varphi_0\|} \\ E_n &= \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) .\end{aligned}} \quad (4.32)$$

Wegen dieses Verfahrens heißen übrigens die Operatoren  $A$  und  $A^*$  auch **Leiteroperatoren**, bzw. “Absteigeoperator” und “Aufsteigeoperator”. Den Absteigeoperator  $A$  verwenden wir, um zu zeigen, dass es auch keine weiteren Eigenwerte gibt. Denn wenn  $\Psi$  ein Eigenvektor zum Eigenwert  $E$  ist, erfüllt  $A^n\Psi$  die Eigenwertgleichung zum Eigenwert  $(E - n\hbar\omega)$ . Für genügend große  $n$  wird dieser Ausdruck negativ, kann also kein Eigenwert des positiven Operators  $H$  sein. Für große  $n$  muss also  $A^n\Psi = 0$  sein. Sei  $n$  die kleinste Zahl, für die dies gilt. Dann ist  $\Phi = A^{(n-1)}\Psi$  eine von Null verschiedene Lösung der Gleichung  $A\Phi = 0$ , also nach unserer obigen Rechnung proportional zu  $\varphi_0$ . Nach der Vertauschungsrelation für  $A, A^*$  ist  $\Psi$  dann ein Vielfaches von  $(A^*)^{(n-1)}\varphi_0$ . Mit einer Verfeinerung dieses Arguments kann man auch zeigen, dass  $H$  kein kontinuierliches Spektrum besitzt. Die angegebene vollständige Liste von Eigenfunktionen ist also eine Basis des Hilbertraums.

Die Norm  $\|(A^*)^n \varphi_0\|$  lässt sich ebenfalls allein aus der Vertauschungsrelation berechnen. Es ist

$$\begin{aligned}\|A^*\varphi_n\|^2 &= \langle \varphi_n, AA^*\varphi_n \rangle = \langle \varphi_n, \left(\frac{1}{\hbar\omega}H + \frac{1}{2}\mathbb{1}\right)\varphi_n \rangle \\ &= (n+1) \|\varphi_n\|^2 = (n+1) .\end{aligned}$$

Damit ist  $A^*\varphi_n = \sqrt{n+1} \varphi_{n+1}$ , und (durch Induktion)

$$\varphi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (A^*)^n \varphi_0 . \quad (4.33)$$

Da die  $\varphi_n$  eine Basis des Hilbertraumes bilden, lassen sich alle Operatoren durch ihre Matrixelemente bezüglich dieser Basis ausdrücken. Das ist immer dann sinnvoll, wenn zeitabhängige Größen untersucht werden sollen, da ja dann die Zeitentwicklungsoperatoren Multiplikationsoperatoren sind. Wir bekommen (mit der Matrixnotation  $C_{nm} = \langle \varphi_n, C\varphi_m \rangle$ )

$$(A^*)_{nm} = \sqrt{n} \delta_{n,m+1} \quad \text{und} \quad A_{nm} = \sqrt{m} \delta_{n+1,m} . \quad (4.34)$$

Mit  $P = (\sqrt{2m\omega\hbar}/(2i))(A - A^*)$  bekommt man daraus unmittelbar die Matrix für  $P$  und entsprechend die Matrix für  $Q$ . Dies sind die Objekte, mit denen man in der Heisenbergschen Matrizenmechanik umzugehen hatte. Hingemalt sind es:

$$P = \frac{\sqrt{2m\omega\hbar}}{2i} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{4} & 0 \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} ; \quad Q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} .$$

Nicht auszudenken, wie heute Quantenmechanik-Bücher aussähen, wenn nicht bald nach Heisenberg, Born und Jordan die mathematische Struktur der Theorie aufgeklärt worden wäre.

### 4.3.2 Hermite-Polynome

Ein wichtiger Vorteil der “algebraischen” Methode der Leiteroperatoren ist, dass die Ergebnisse sofort in jeder Darstellung des Hilbertraums zur Verfügung stehen. Zum Beispiel liefert die Formel (4.32) die Eigenfunktionen  $\varphi_n \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx)$  in der Ortsdarstellung sobald  $A$  konkret in dieser Darstellung eingesetzt wird. Durch Induktion sieht man, dass  $\varphi_n(x) = \tilde{H}_n(x)\varphi_0(x)$  sein muss, wobei  $\tilde{H}_n$  ein Polynom vom Grad  $n$  ist: Beide Terme in  $A^*$  nach (4.23) erhalten diese Form und erhöhen der Grad jeweils um Eins:  $Q$  durch direkte Multiplikation mit  $x$  und  $P$  durch Differentiation der Gaußfunktion  $\varphi_0$ . Außerdem sind die Funktionen  $\varphi_n$  ja paarweise orthogonal oder mit anderen Worten, die Polynome  $\tilde{H}_n$  sind orthogonal mit dem Skalarprodukt  $\langle f, g \rangle = \int dx |\varphi_0(x)|^2 \overline{f(x)}g(x)$ . Da  $\tilde{H}_n$  vom Grad  $= n$  ist, sind die  $\tilde{H}_n$  *genau* die Orthogonalpolynome bezüglich dieses Skalarprodukts. Man nennt sie **Hermite-Polynome**. Allerdings gibt es verschiedene Konventionen bei der Definition dieser Polynome, und die Tilde über  $H$  war als Warnung gegen die voreilige Identifikation mit einer dieser Konventionen gedacht. Mit der Konvention von Gradshteyn/Ryzhik [GR80] sind die Eigenfunktionen

$$\varphi_n(x) = c_n H_n(\lambda x) e^{-(\lambda x)^2/2} \quad (4.35)$$

$$\text{mit} \quad \lambda = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad \text{und} \quad c_n = \sqrt{\frac{\lambda}{2^n n!}}. \quad (4.36)$$

### 4.3.3 Heisenberg-Bewegungsgleichungen

Mit der Diagonalisierung des Hamiltonoperators haben wir natürlich auch detaillierte Informationen über die Zeitentwicklung des Oszillators gewonnen. Wie der klassische Oszillator ist auch der quantenmechanische periodisch mit der Periode  $T = 2\pi/\omega$ . Das folgt allein schon aus der Liste der Eigenwerte: Die Eigenwerte des Zeitentwicklungsoperators  $U_T = \exp(-iT\hat{H}/\hbar)$  sind ja nach Funktionalkalkül

$$\exp(-iT\hbar\omega(n + \tfrac{1}{2})/\hbar) = \exp(-2\pi i(n + \tfrac{1}{2})) = -1, \quad (4.37)$$

also unabhängig von  $n$ , und  $U_T = -\mathbb{1}$  ist ein Vielfaches des  $\mathbb{1}$ -Operators. Damit gilt für die Zeitabhängigkeit aller Erwartungswerte, nach Postulat 5 in Abschnitt 1.7 also für die Funktionen der Form  $f(t) = \text{tr}(U_t \rho U_t^* A)$ :

$$f(t+T) = \text{tr}(U_t U_T \rho U_T^* U_t^* A) = f(t). \quad (4.38)$$

Die Analogie mit der klassischen Entwicklung geht aber noch viel weiter, was wir später noch beim Studium von Systemen von Oszillatoren massiv ausnützen werden.



Am einfachsten sieht man das hier, indem man die Zeitabhängigkeit des Leiteroperators  $A$  berechnet. Es gilt nach (4.31)

$$\frac{d}{dt}U_t^*AU_t = U_t^*\left(\frac{i}{\hbar}(HA - AH)\right)U_t = -i\omega U_t^*AU_t, \quad (4.39)$$

$$\text{also } U_t^*AU_t = e^{-i\omega t}A. \quad (4.40)$$

Nimmt man dies wieder nach hermiteschen und  $i$ \*hermiteschen Anteilen auseinander, findet man, dass die quantenmechanischen Orts- und Impulsoperatoren genau den klassischen Bewegungsgleichungen folgen:

$$P(t) = U_t^*PU_t = P \cos(\omega t) - m\omega Q \sin(\omega t) \quad (4.41)$$

$$Q(t) = U_t^*QU_t = \frac{1}{m\omega}P \sin(\omega t) + Q \cos(\omega t). \quad (4.42)$$

Bei einer Viertelperiode ( $\omega t = \pi/2$ ) werden hier gerade  $P$  und  $Q$  vertauscht. Es ist also  $U_t$  (bis auf Konstanten) gleich der Fouriertransformation.

Die Möglichkeit, die Zeitentwicklung der Orts- und Impulsoperatoren explizit durch Lösung klassischer Hamiltonscher Bewegungsgleichungen anzugeben, ist immer dann gegeben, wenn diese Gleichungen linear sind, das heißt bei Hamiltonoperatoren, die höchstens quadratisch in den  $P_\mu$ ,  $Q_\mu$  sind ([Ü4.1] und Sect. 5.9).

## 4.4 Potentialtopf

In Abschnitt 4.1 hatten wir das Verhalten freier Teilchen untersucht, und in 4.2 und 4.3 Fälle, in denen das Teilchen durch eine Wand oder ein anwachsendes Potential am Entweichen nach Unendlich gehindert wurde. Hier betrachten wir jetzt eine Kombination von beidem: eindimensionale Teilchen in einem Potential  $V$  das im Unendlichen gegen Null geht. Weit draußen verhalten sich die Teilchen also wie freie Teilchen; da das Potential auch negativ werden kann, kann es aber außerdem "gebundene" Zustände geben.

Wieder ist die klassische Faustformel (4.18) nützlich um einen qualitativen Überblick zu bekommen: Betrachten wir zunächst ein Energieintervall  $I \subset \mathbb{R}^+$ . Das zugehörige Phasenraumgebiet enthält alle Paare  $(p, q)$  mit  $p^2/2m \in I$  und  $|q|$  groß genug, damit das Potential vernachlässigbar ist. Da wir  $V(q) \rightarrow 0$  für  $|q| \rightarrow \infty$  angenommen haben, ist dieses Phasenraumgebiet aber unendlich. Entsprechend sind im quantenmechanischen Problem die Spektralprojektoren von  $H$  zu allen positiven Energieintervallen unendlich dimensional: Die gesamte positive Halbachse gehört zum absolut stetigen Spektrum von  $H$ .

Anders liegt es bei negativen Energien: Diese können nur dort zustande kommen, wo die potentielle Energie  $V(q)$  negativ ist, und die kinetische Energie  $p^2/2m$  nicht zu groß. Genauer: Zum Phasenraumvolumen mit  $H(p, q) \leq E$  gehört über dem Ortsintervall

$[q, q + dq]$  das Impulsintervall der Länge  $2\sqrt{2m(E - V(q))}$ , falls  $E \geq V(q)$ , und Null sonst. Mit der Notation “ $x_+$ ” für den “Positivteil” einer reellen Zahl  $x$ , also  $x_+ = x$  für  $x \geq 0$  und  $x_+ = 0$  für  $x \leq 0$ , bekommen wir also die Schätzung

$$\text{“\#Zustände mit Energie } \leq E\text{”} \approx \frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar} \int dq \sqrt{(E - V(q))_+} . \quad (4.43)$$

Speziell für  $E = 0$  ist dies also eine Schätzung für die Anzahl der Zustände negativer Energie, in jedem Fall aber ein dimensionsloses Maß für die Größe des Potentialtopfes. [►Bild]

Betrachten wir den einfachsten Fall, der diesem Abschnitt den Namen gegeben hat: das Potential  $V$ , definiert durch

$$V(x) = \begin{cases} -W & \text{für } |x| \leq L/2 \\ 0 & \text{für } |x| > L/2 \end{cases} , \quad (4.44)$$

wobei  $L$  und  $W$  positive Konstanten sind. Wir erwarten hier also  $N = \frac{\sqrt{2mWL}}{\pi\hbar}$  negative Eigenwerte. In der Eigenwertgleichung stellt sich gleich wieder die Frage nach den Randbedingungen an den Sprungstellen des Potentials. Wieder ist dies eine physikalische Frage, die letzten Endes daraus zu beantworten ist, wofür dieser Sprung eigentlich steht. Wenn man es ganz genau nimmt, stellt sich diese Frage auch bei Sprüngen der Höhe Null, also überall: Wie sollen wir den Definitionsbereich des Hamiltonoperators festlegen? Für ein freies Teilchen haben wir dies schon getan, als wir den Impulsoperator und mit ihm den Operator der kinetischen Energie diagonalisierten: Im Definitionsbereich liegen solche  $\Psi$ , für die  $p^2 \mathcal{F}\Psi(p)$  immer noch quadratintegrabel ist. Für solche Funktionen gilt nach [Ü2.8] (nach Vertauschung von Ort und Impuls):

$$|\Psi(x)|^2 \leq \hbar^{-1} \|\Psi\| \|P\Psi\| \quad (4.45)$$

$$\text{und} \quad |\Psi'(x)|^2 \leq \hbar^{-3} \|P\Psi\| \|P^2\Psi\| . \quad (4.46)$$

Außerdem liefert die dortige Rechnung, dass die Fourier-Transformierten von  $\Psi$  und  $\Psi'$  integrabel sind. Also sind diese Funktionen nach dem Riemann-Lebesgue-Lemma auch stetig und gehen im Unendlichen gegen Null. Wenn also das Potential eine endliche Störung der kinetischen Energie sein soll, müssen wir verlangen:

Der Definitionsbereich von  $H = P^2/(2m) + V(Q)$  ist gleich dem Definitionsbereich der kinetischen Energie  $P^2$ . Er besteht also aus Funktionen  $\Psi$ , sodass  $\Psi$  und  $\Psi'$  überall stetig sind.

Zum Auffinden der Eigenfunktionen für den Standard-Potentialtopf (4.44) macht man am besten noch von der Symmetrie des Potentials Gebrauch: Der Hamiltonoperator vertauscht mit dem **Paritätsoperator**

$$(\Pi\Psi)(x) = \Psi(-x) . \quad (4.47)$$

Dies ist offenbar ein unitärer Operator mit  $\Pi^2 = \mathbb{1}$ , also mit den beiden Eigenwerten  $\pm 1$ . Die Eigenfunktionen zum Eigenwert  $+1$  (bzw.  $-1$ ) nennt man wie üblich *gerade* (bzw. *ungerade*). Da sich die beiden Operatoren gemeinsam diagonalisieren lassen,

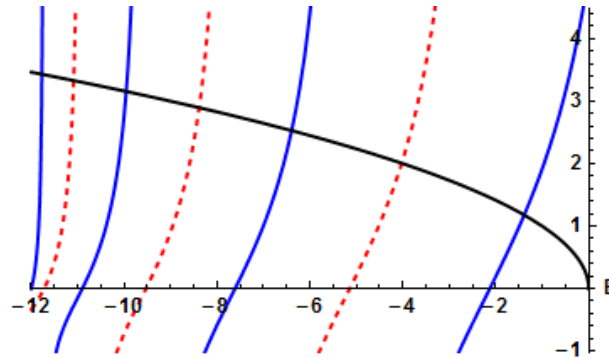
verlieren wir nichts, wenn wir von vorneherein nur nach Eigenfunktionen suchen, die entweder gerade oder ungerade sind. Wir gewinnen dabei allerdings eine Halbierung der zu berücksichtigenden Anpassungsbedingungen, da sich ja jeweils die Anpassungsbedingung bei  $x = -L/2$  zwangsläufig aus der bei  $x = +L/2$  ergibt. Es ist klar, dass jeder Eigenwert  $E$  im Intervall  $-W < E < 0$  liegt.

Im Bereich des Topfes müssen die Eigenfunktionen  $-\Psi''\hbar^2/(2m) = (W+E)\Psi$  erfüllen, und sind damit Linearkombinationen von  $e^{ikx}$  und  $e^{-ikx}$  mit  $(\hbar k)^2/(2m) = W+E$ . Also sind die geraden Lösungen  $a \cos(kx)$  und die ungeraden  $a \sin(kx)$ . Außerhalb brauchen wir  $be^{\pm\kappa x}$  mit  $-(\hbar\kappa)^2/(2m) = E$ , wobei das positive Vorzeichen auf der linken und das negative auf der rechten. Als Anpassungsbedingung bei  $x = L/2$  setzen wir Wellenfunktion und Ableitung als stetig an, also auch den Quotienten  $-\Psi'/\Psi$ . Aus dieser Kombination fallen die Vorfaktoren  $a$  und  $b$  direkt heraus und wir bekommen

$$k \tan\left(\frac{kL}{2}\right) = \kappa \quad \text{wenn } \Psi \text{ gerade} \quad (4.48)$$

$$-k \cot\left(\frac{kL}{2}\right) = \kappa \quad \text{wenn } \Psi \text{ ungerade}, \quad (4.49)$$

wobei wir berücksichtigen müssen, dass  $k = \hbar^{-1}\sqrt{2m(W+E)}$  und  $\kappa = \hbar^{-1}\sqrt{-2mE}$  gegebene Funktionen der Energie sind. Abb. 4.1 zeigt die beteiligten Funktionen. Schnittpunkte in diesem Diagramm ergeben jeweils einen Eigenwert. In Abb. 4.1 erkennt man



**Abb. 4.1:** Die rechte Seite und die linken Seiten der Gleichungen (4.48) (durchgezogen) und (4.49) (gestrichelt).

gut die Äste der  $\tan$  und  $\cot$  Funktionen zwischen je zwei Polen. Jeder dieser Äste kann höchstens einen Schnittpunkt mit der Wurzelfunktion haben, Die Abzählung der in Frage kommenden Äste (bzw. Pole) bestätigt dann mit einem Fehler von maximal 1 die halbklassische Spektralregel. Da der erste Ast von (4.48) bei  $E = -W$ , also  $k = 0$  beginnt, hat er immer einen Schnittpunkt. Das heißt, egal, wie schmal und flach ein Potentialtopf ist, er hat in jedem Fall wenigstens einen gebundenen Zustand.

Wir schließen diesen Abschnitt mit ein paar Bemerkungen über allgemeine qualitative Aussagen, die sich auch für allgemeinere Potentialtöpfe  $V$  anwenden lassen

- (1) *Die Eigenfunktionen lassen sich reell wählen.*

Dies liegt einfach daran, dass die Koeffizienten von  $\Psi$  und  $\Psi''$  in der Schrödingergleichung reell sind. Damit ist mit  $\Psi$  immer auch  $\bar{\Psi}$  eine Lösung zum gleichen

Eigenwert. Also sind auch die reellwertigen Funktionen  $\Re\Psi$  und  $\Im\Psi$  Lösungen und spannen den gleichen Raum wie  $\Psi, \bar{\Psi}$  auf. Offenbar gilt dies Argument in jeder Dimension, auch wenn manchmal die reelle Wahl nicht die beste ist.

- (2) *Alle Eigenwerte  $E < 0$  sind nicht entartet,*  
 das heißt: Alle Eigenräume sind eindimensional. Die Eigenwertgleichung ist eine Differentialgleichung zweiter Ordnung. Also gibt es bei jedem  $E$  genau zwei linear unabhängige Lösungen. Eine davon ist wegen  $E < 0$  bei  $x \rightarrow +\infty$  exponentiell wachsend, kommt also nicht für  $\Psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx)$  in Frage. Damit bleibt höchstens eine Lösung übrig, und auch die meistens nicht, da sie meist bei  $x \rightarrow -\infty$  divergiert. Die wenigen Werte von  $E$  bei denen dies nicht passiert, sind genau die Eigenwerte.

- (3) *Wenn überall  $V(x) \leq 0$  gilt, und  $V(x) \leq -\varepsilon < 0$  auf irgend einem Intervall, so gibt es wenigstens einen Eigenwert  $E < 0$ .*

Dies gilt nach der obigen direkten Untersuchung an jedem rechteckigen Potentialtopf  $V_\square$ . Die angegebenen Bedingungen bedeuten gerade, dass  $V(x) \leq V_\square(x)$  für einen geeigneten rechteckigen Topf. Die zugehörige Grundzustandseigenfunktion liefert dann einen strikt negativen Energie-Erwartungswert auch für  $V$ . Das widerspricht der Aussage  $H \geq 0$ , also  $\text{spec}(H) \subset \mathbb{R}_+$ . Das Spektrum von  $H$  enthält also auch negative Energien.

## 4.5 Rayleigh-Ritzsches Variationsprinzip

Das letzte Argument basiert auf dem Vergleich zweier Hamiltonoperatoren. Allgemeiner ist nützlich zu wissen, dass aus  $H_1 \leq H_2$  (im Sinne der Operatorordnung, also  $\forall \Psi \langle \Psi, H_1 \Psi \rangle \leq \langle \Psi, H_2 \Psi \rangle$ ) auch Ungleichungen für die Eigenwerte dieser Operatoren folgen. Wir beginnen mit einer einfachen Überlegung für Grundzustände: Als **Grundzustandsenergie** eines selbstadjungierten Operators  $H$  bezeichnen wir

$$E_0(H) = \inf \text{spec}(H) , \quad (4.50)$$

was natürlich auch  $-\infty$  sein kann. Speziell wenn sich am unteren Ende des Spektrums von  $H$  nur diskrete Eigenwerte finden, ist  $E_0(H)$  einfach der kleinste Eigenwert. (Beispiel, in dem  $E_0(H)$  selbst kein Eigenwert ist: Hamiltonoperator des freien Teilchens). Da ein selbstadjungierter Operator positiv ist genau dann, wenn sein Spektrum in  $\mathbb{R}_+$  liegt, und da Addition von  $E\mathbb{1}$  das Spektrum um  $E$  verschiebt, gilt also  $H \geq E_0(H)\mathbb{1}$  im Sinne der Operatorordnung, also

$$\langle \Psi, H \Psi \rangle \geq \langle \Psi, E_0(H)\mathbb{1} \Psi \rangle = E_0(H) \|\Psi\|^2 , \quad (4.51)$$

und damit für jeden normierten Vektor  $\Psi \in \mathcal{H}$ :

$$\langle \Psi, H \Psi \rangle \geq E_0(H) . \quad (4.52)$$

Die Variationsmethode besteht nun einfach darin, sich plausible Funktionen  $\Psi$  zu suchen, und durch Variation von Parametern in  $\Psi$  einen möglichst kleinen Erwartungswert zu erreichen. Was immer man so ausrechnet, ist dann eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie. Gleichheit gilt genau dann, wenn  $\Psi$  ein Eigenvektor zum kleinsten Eigenwert ist. Diese Abschätzung ist oft erstaunlich gut, auch wenn das gefundene optimale  $\Psi$  fast immer eine miserable Approximation an den wahren Eigenvektor ist.

Auch für höhere Eigenwerte gilt ein solches Prinzip: bezeichnen wir mit  $E_n(H)$  den  $(n+1)$ -ten Eigenwert von  $H$  von unten, d.h. in der Eigenwertliste  $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots$ , in der jeder Eigenwert gemäß seiner Vielfachheit wiederholt wird. Wenn nach einigen Eigenwerten ein Stück kontinuierliches Spektrum kommt, so setzen wir ab dieser Stelle alle  $E_n(H)$  gleich dem Infimum des kontinuierlichen Spektrums. (So gezählt ist also  $E_n(-\Delta) = 0$  für alle  $n$ ). Statt einer einzigen Versuchsfunktion betrachten wir nun  $N$  solche Funktionen  $\Phi_1, \dots, \Phi_N$ , die wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit orthonormiert wählen können, da es uns nur auf den  $N$ -dimensionalen Teilraum  $\mathcal{K} \subset \mathcal{H}$  ankommt, der von diesen Vektoren aufgespannt wird. Natürlich muss  $H\Phi_k$  nicht mehr in diesem Teilraum liegen. Dennoch wohldefiniert sind die Matrixelemente  $H_{k\ell}^{\mathcal{K}} = \langle \Phi_k, H\Phi_\ell \rangle$ , die wir als Matrixelemente eines Operators  $H^{\mathcal{K}}$  auf dem Teilraum  $\mathcal{K}$  auffassen können. Übrigens ist dies genau das Verfahren, mit dem in der numerischen Physik der gegebene unendlich dimensionale Hilbertraum gemäß der Speicherkapazität des Rechners verstümmelt wird.  $H^{\mathcal{K}}$  gilt dann als die "numerische Version" von  $H$ , wobei die geschickte Wahl des Teilraums  $\mathcal{K}$  eine Kunst ist, an der letztlich die Qualität der Ergebnisse hängt. Natürlich können wir auch für den Operator  $H^{\mathcal{K}}$  wieder eine Liste von Eigenwerten aufstellen. Es gilt dann die **Rayleigh-Ritz-Ungleichung**:

Sei  $H$  ein selbstadjungierter Operator auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$ , und  $\mathcal{K} \subset \mathcal{H}$  ein endlich dimensionaler Teilraum des Definitionsbereichs von  $H$ . Dann gilt für alle  $n \leq \dim \mathcal{K}$ :

$$E_n(H) \leq E_n(H^{\mathcal{K}}) . \quad (4.53)$$

In dieser Ungleichung gilt Gleichheit, wenn  $\mathcal{K}$  die Eigenvektoren zu den  $n$  niedrigsten Eigenwerten enthält.

Zum Beweis, der in einer geschickten Iteration des Arguments für Grundzustände besteht, siehe etwa Satz XIII.3 in [RS80]. Dann ist auch

$$E_N(H^{\mathcal{K}}) = \sup \{ \langle \Psi, H\Psi \rangle \mid \Psi \in \mathcal{K}, \|\Psi\| = 1 \} \quad (4.54)$$

$$\text{und} \quad E_N(H) = \inf \{ E_N(H^{\mathcal{K}}) \mid \dim \mathcal{K} = N \} . \quad (4.55)$$

Also lässt sich  $E_N(H)$  als Kombination von Infima und Suprema von Ausdrücken der Form  $\langle \Psi, H\Psi \rangle$  darstellen. Das bedeutet, dass die Operatorordnung, die ja über diese Ausdrücke definiert ist, sich auf Eigenwertabschätzungen überträgt:

$$H \leq K \implies E_n(H) \leq E_n(K) \quad \text{für alle } n . \quad (4.56)$$

Genau diese Konsequenz (mit  $n = 0$ ) haben wir oben für das Argument benutzt, dass kleineres Potential auch kleinere Eigenwerte bedeutet.

## 4.6 Eigenwerte allgemeiner Töpfe

Die Eigenwertgleichung  $H\Psi = E\Psi$ , also hier

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi \quad (4.57)$$

nennt man auch “stationäre Schrödingergleichung”. Sie entsteht aus der “zeitabhängigen” Schrödingergleichung  $i\hbar\partial_t\Psi_t = H\Psi_t$  durch den Separationsansatz  $\Psi_t(x) = f(t)\Psi(x)$ , der für  $f$  die Lösung  $f(t) = \exp(-iEt/\hbar)$  erzwingt, und für den Ortsanteil  $\Psi$ , jetzt abhängig von der Separationskonstanten  $E$ , die “stationäre Gleichung” (4.57). Dabei sind wir *nicht* von vornherein nur an Lösungen mit  $\Psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx)$  interessiert (diese geben ja Eigenwerte von  $H$ ), sondern auch an Lösungen für  $E$  im kontinuierlichen Spektrum von  $H$ . Aus diesen lässt sich dann evtl. durch Integration eine echte Lösung der Schrödingergleichung mit  $\Psi_t \in \mathcal{L}^2$  aufbauen.

In jedem Fall ist es für viele Probleme in der Quantenmechanik wichtig, gewöhnliche Differentialgleichungen zweiter Ordnung vom Typ (4.57) zu lösen, die in der Mathematik auch als **Sturm-Liouville** Probleme bekannt sind. Als erstes schreiben wir (4.57) um in ein System von Gleichungen erster Ordnung für die zwei Funktionen  $\Psi_1 = \Psi$  und  $\Psi_2 = \Psi'$ :

$$\frac{d}{dx} \begin{pmatrix} \Psi(x) \\ \Psi'(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi(x) \\ \Psi'(x) \end{pmatrix} = A(x) \begin{pmatrix} \Psi(x) \\ \Psi'(x) \end{pmatrix}. \quad (4.58)$$

Aus der allgemeinen Theorie solcher Systeme ist klar, dass es (bei nicht allzu wilder, also z.B. Lipschitz-stetiger Matrix  $A$ ) zu jedem Anfangswert  $(\Psi(x_0), \Psi'(x_0))$  an einem Punkt  $x_0$  genau eine Lösung in einer Umgebung von  $x_0$  gibt. Da man so die Lösungen durch den Wert an jeder beliebigen Stelle parametrisieren kann, ist der Lösungsraum zweidimensional, d.h. es gibt immer zwei linear unabhängige Lösungen. Wenn man irgend zwei Lösungen  $\Phi_1$  und  $\Phi_2$  zu einer Matrix

$$U(x) = \begin{pmatrix} \Phi_1(x) & \Phi_2(x) \\ \Phi_1'(x) & \Phi_2'(x) \end{pmatrix} \quad (4.59)$$

zusammenfasst, so erfüllt diese die Differentialgleichung  $U'(x) = A(x)U(x)$ , wie man durch elementweises Differenzieren sieht. Für linear unabhängige Lösungen müssen die Vektoren  $(\Phi_1(x_0), \Phi_1'(x_0))$  und  $(\Phi_2(x_0), \Phi_2'(x_0))$  eine Basis des Raumes  $\mathbb{C}^2$  bilden, also  $\det U(x_0) \neq 0$ . Da wir einen beliebigen Startpunkt wählen können, müsste daraus auch  $\det U(x) \neq 0$  für beliebige  $x$  folgen. In der Tat folgt aus der Matrix-Differentialgleichung  $U'(x) = A(x)U(x)$  die Gleichung

$$\frac{d}{dx} \det U(x) = (\operatorname{tr} A(x)) \det U(x), \quad (4.60)$$

also hier (wegen  $\operatorname{tr}(A(x)) = 0$ ) die Erhaltung der “**Wronski-Determinante**”

$$\det U(x) = \Phi_1(x)\Phi_2'(x) - \Phi_1'(x)\Phi_2(x) = \text{const}. \quad (4.61)$$

*Beweis zu (4.60):* überlegt man sich durch Entwicklung der Determinante, dass für beliebige Matrizen  $A$  gilt:  $\det(\mathbb{1} + \varepsilon A) = 1 + \varepsilon \operatorname{tr}(A) +$  “Terme höherer Ordnung in  $\varepsilon$ ”, und verwendet dies zusammen mit  $U(x + \varepsilon) \approx U(x) + \varepsilon A(x)U(x) = (\mathbb{1} + \varepsilon A(x))U(x)$ .

■

Jede Matrixlösung  $U(x)$  enthält auch die **Transferoperatoren**, die aus  $(\Psi(x), \Psi'(x))$  an einer Stelle den entsprechenden Vektor an einer anderen machen: Wenn  $\Psi$  eine Lösung ist, dann gilt

$$\begin{pmatrix} \Psi(y) \\ \Psi'(y) \end{pmatrix} = U(y)U(x)^{-1} \begin{pmatrix} \Psi(x) \\ \Psi'(x) \end{pmatrix}, \quad (4.62)$$

da ja die rechte Seite eine Lösung der Differentialgleichung mit den gleichen Anfangsbedingungen bei  $x$  ist.

Wir diskutieren zunächst noch einmal die gebundenen Zustände (d.h.  $E < 0$ ) in einem allgemeinen Potentialtopf, wobei wir der Einfachheit halber annehmen, dass  $V(x)$  für  $x < x_{\min}$  und  $x > x_{\max}$  verschwindet. Fangen wir im Intervall  $x < x_{\min}$  an. Dort sind die beiden linear unabhängigen Lösungen wie beim rechteckigen Potentialtopf  $\Psi(x) = \exp(\pm \lambda x)$  mit  $\lambda = \sqrt{-2mE}/\hbar$  (der Radikand ist positiv). Die Lösung mit dem negativen Vorzeichen im Exponenten scheidet als nicht quadratintegrabel aus, und damit haben wir einen Startwert  $(\Psi(x_{\min}), \Psi'(x_{\min})) \propto (1, \lambda)$  für die Integration der stationären Schrödingergleichung. Die Lösung ist also schon bis auf einen Faktor bestimmt. Ob dann auch die Bedingung  $(\Psi(x_{\max}), \Psi'(x_{\max})) \propto (1, -\lambda)$  gilt, die wir ja aus dem gleichen Grund fordern müssen ist nun eine Glücksache. Genauer gesagt, ist dies gerade die Bedingung daran, dass  $E$  ein Eigenwert ist. Genau so berechnet man übrigens numerisch Eigenwerte in eindimensionalen Potentialen: Man startet mit einem Wert  $E$  und der zulässigen Lösung bei  $x = x_{\min}$ , und schaut, ob man durch Variieren von  $E$  auch am anderen Ende des Intervalls die erlaubte (bei  $+\infty$  abfallende Lösung) trifft.

Die entscheidende Größe für dieses Verfahren ist das Verhältnis  $\Psi$  und  $\Psi'$  oder besser gesagt, die Richtung des Vektors  $(\Psi(x), \Psi'(x)) \in \mathbb{C}^2$ . Da wir schon gesehen haben, dass wir die Lösungen immer als reell ansetzen können, ist dies sogar ein Vektor in  $\mathbb{R}^2$ , und wir können eine Gleichung direkt für die Richtung  $\theta$  dieses Vektors aufstellen: Wir setzen  $\Psi(x) = r(x) \sin \theta(x)$  und  $\Psi'(x) = r(x) \cos \theta(x)$ . Aus der Differentialgleichung lässt sich  $r(x)$  dann eliminieren [Ü!], und wir bekommen eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung für  $\theta$ :

$$\theta'(x) = 1 + \left( \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) - 1 \right) \sin^2 \theta(x). \quad (4.63)$$

Da auf der rechten Seite nur Winkelfunktionen der Periode  $\pi$  in  $\theta$  auftauchen ist klar, dass mit jeder Lösung  $\theta$  auch  $\tilde{\theta} = \theta + \pi$  eine Lösung dieser Gleichung. Wir betrachten aber nicht einfach  $\theta$  und  $\theta + \pi$  als den “gleichen Wert” der Variable (wie bei Winkeln naheliegend), sondern interessieren uns gerade besonders für die Anzahl der Umläufe von  $\theta$ . Für eine Eigenfunktion gegebener Energie ist außerhalb des Potentials

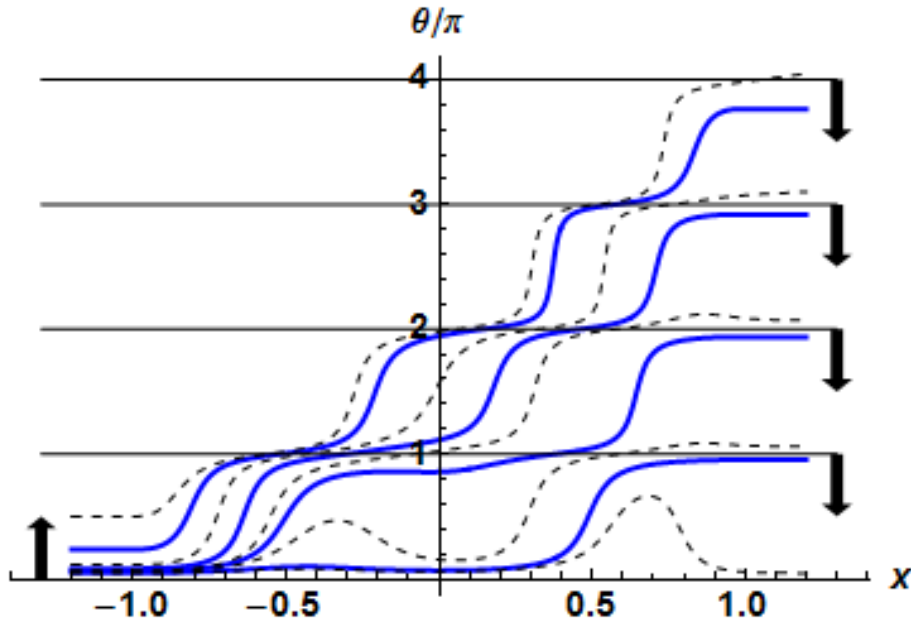
$\Psi(x) \propto \exp(\pm\lambda x)$  und damit  $\theta(x)$  konstant mit  $\cot \theta = \pm\lambda$ . Diese Werte können wir also direkt als Randwerte für  $\theta$  bei

kennen wir das Verhältnis  $\Psi'/\Psi$  bei  $x_{\min}$  und  $x_{\max}$  und damit die für eine Eigenfunktion nötigen Randwerte. Per Konvention wählen wir die Startwerte alle im gleichen Ast des Kotangens:

$$\theta_E(x_{\min}) = \operatorname{arccot} \left( \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \right) \in [0, \frac{\pi}{2}] \quad (4.64)$$

$$\theta_E(x_{\max}) = \operatorname{arccot} \left( \frac{-\sqrt{-2mE}}{\hbar} \right) \in \pi[n + \frac{1}{2}, n + 1] , \quad (4.65)$$

wobei  $n = 0, 1, \dots$ . Die Schar der Lösungen von (4.63) mit Anfangsbedingung (4.64) ist in Abb. 4.2 dargestellt. Da der  $\operatorname{arccot}$  monoton fallend ist, ist  $\theta_E(x_{\min})$  eine streng



**Abb. 4.2:** Lösungsschar der Gleichung (4.63) mit Anfangsbedingung (4.64). Durchgezogen sind die Lösungen, die auch die Endbedingung (4.65) erfüllen, also zu Eigenwerten gehören. Solche Kurven müssen an korrespondierenden Stellen der rechts und links dargestellten Pfeile herauskommen und außerhalb von  $[x_{\min}, x_{\max}] = [-1, 1]$  konstant verlaufen. Die Schnittpunkte mit den Linien  $\theta = n\pi$  entsprechen den Nullstellen. An diesen Stellen ist die Steigung positiv und überall gleich 1

wachsende Funktion von  $E$ . Da auch die rechte Seite von (4.63) mit  $E$  wächst, ist also an jeder Stelle  $\theta_E(x)$  streng monoton wachsend in  $E$ . Es gibt also keine Schnittpunkte in dieser Kurvenschar. Da aber die Endbedingung (4.65) fallend in  $E$  ist, kann es für jeden Wert  $n$  nur eine Lösung der Endbedingung, also einen Eigenwert, geben. Da  $\theta_E(x_{\max})$  in der Kurvenschar stetig wächst muss es auch für jedes  $n$  eine Lösung geben, das von der wachsenden Funktion  $\theta_E(x_{\max})/\pi$  überstrichen wird. Die Gesamtzahl der



Eigenwerte wird damit durch  $\theta_0(x_{\max})/\pi$  direkt angegeben:

$$\#\text{Eigenwerte} = \left\lfloor \theta_0(x_{\max})/\pi + \frac{1}{2} \right\rfloor, \quad (4.66)$$

wobei  $\lfloor x \rfloor$  die größte ganze Zahl  $\leq x$  bezeichnet.

Eine ausgezeichnete Rolle spielen die Stellen  $\theta = n\pi$  mit  $n \in \mathbb{Z}$ , also die Nullstellen von  $\Psi$ . Hier ist  $\theta' = 1$ , unabhängig von  $E$  oder  $V$ . Diese Linien können also nur in positiver Richtung überschritten werden. Damit hat also die Eigenfunktion  $\Psi_n$  mit dem  $n = 0, 1, \dots$  aus (4.65) genau  $n$  Nullstellen. Zwischen zwei Nullstellen wächst  $\theta_E$  gerade um  $\pi$ . Für eine größere Energie  $E' > E$  ist  $\theta_{E'}$  überall steiler, muss also ebenfalls mindestens die Höhe  $\pi$  überwinden. Daher liegt in diesem Bereich mindestens eine Nullstelle der Lösung zu  $E'$ .

Im “klassisch verbotenen Bereich”, also für  $E < V(x)$  wird an den Stellen  $\theta = (n + \frac{1}{2})\pi$  die Ableitung negativ, sodass diese Linien nicht überschritten werden können. Daraus ergibt sich: In jedem verbotenen Bereich kann es höchstens eine Nullstelle geben.

Die wichtigsten Ergebnisse aus der Diskussion von Gleichung (4.63) für die Eigenwerte  $E_n(H)$  und zugehörigen Eigenfunktionen  $\varphi_n$  sind (in Fortsetzung der am Ende von Abschnitt 4.4 erwähnten):

- (4) *Die Eigenfunktion  $\varphi_n$  hat genau  $n$  Nullstellen.*  
Insbesondere hat also die Grundzustandswellenfunktion  $\varphi_0$  keine Nullstellen.
- (5) *Zwischen je zwei Nullstellen von  $\varphi_n$  liegt genau eine Nullstelle von  $\varphi_{n+1}$  und wenigstens eine von jeder höheren Eigenfunktion  $\varphi_m$ ,  $m > n$ .*
- (6) *Die Anzahl  $N$  der Eigenwerte  $E_n < 0$  ergibt sich aus der Lösung  $\theta_0(x_{\max})$  von (4.63) mit  $E = 0$  und  $\theta_0(x_{\min}) = \pi/2$ .*

## 4.7 Streutheorie

### 4.7.1 Streumatrix

Auch bei Anwesenheit eines Potentialtopfs bleiben noch viele Züge der Bewegung freier Teilchen übrig. Zum Beispiel entfernen sich Teilchen positiver Energie (also nicht in gebundenen Zuständen) beliebig weit vom Potentialtopf. Es ist also plausibel, dass sich solche Wellenpakete asymptotisch wie freie Wellenpakete bewegen. Wir erwarten also, dass es zu jeder Lösung  $\Psi_t$  der (zeitabhängigen) Schrödingergleichung mit Potential “Asymptoten” gibt, die aus freien Wellenpaketen gebildet sind. Wenn  $U_t^0$  den unitären

Operator der freien Zeitentwicklung bedeutet, lässt sich diese Aussage präzisieren als die Existenz zweier Vektoren  $\Psi^{\text{in}}$  und  $\Psi^{\text{out}}$ , sodass

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \|\Psi_t - U_t^0 \Psi^{\text{in}}\| = 0 \quad \text{und} \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} \|\Psi_t - U_t^0 \Psi^{\text{out}}\| = 0. \quad (4.67)$$

Die **Streutheorie** beschäftigt sich nun gerade mit der Verbindung zwischen  $\Psi^{\text{in}}$  und  $\Psi^{\text{out}}$ : Die zentrale Aufgabe dieser Theorie ist Berechnung des “**Streuooperators**” (auch “S-Matrix”)  $S$ , mit der Eigenschaft  $S\Psi^{\text{in}} = \Psi^{\text{out}}$ . Dies entspricht genau der Situation in vielen Experimenten, bei denen Objekte wie Festkörper, Festkörperoberflächen, Atomkerne oder Elementarteilchen dadurch untersucht werden, dass man irgendwelche Projektile daraufschießt (theoretisch also: einen durch  $\Psi^{\text{in}}$  beschriebenen Strahl präpariert), und an den Streuprodukten (beschrieben durch  $\Psi^{\text{out}}$ ) irgendwelche Messungen durchführt. Die S-Matrix ist also gerade die Größe, die man durch die Gesamtheit all solcher Messungen bestimmen kann.

Um die Asymptoten an eine Lösung  $\Psi_t$  der Schrödingergleichung zu bestimmen, ist es praktisch, diese Lösung als Integral über Lösungen der stationären Schrödingergleichung (4.57) zu positiver Energie  $E$  zu schreiben. Außerhalb des Potentialgebiets waren diese Lösungen von der Form

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{für } x < x_{\min} \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} & \text{für } x > x_{\max} \end{cases}. \quad (4.68)$$

Für die Lösung im Potentialtopf  $[x_{\min}, x_{\max}]$  interessieren wir uns zunächst nicht. Das einzige, was davon eingeht, ist die Tatsache, dass die vier Koeffizienten nicht beliebig sind, sondern in einem zweidimensionalen Raum  $\mathcal{R}(E) \subset \mathbb{C}^4$  liegen, also  $(A, B, C, D) \in \mathcal{R}(E)$ , der sich zum Beispiel durch  $(\Psi(x), \Psi'(x))$  an irgendeiner Stelle  $x < x_{\min}$ , und damit durch  $A$  und  $B$  parametrisieren lässt. Durch Integration über  $E$  setzen wir daraus Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung zusammen:

$$\Psi_t(x) = \begin{cases} (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_0^\infty dp \left( A(p)e^{i(px-Et)/\hbar} + B(p)e^{i(-px-Et)/\hbar} \right) & \text{für } x < x_{\min} \\ (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_0^\infty dp \left( C(p)e^{i(px-Et)/\hbar} + D(p)e^{i(-px-Et)/\hbar} \right) & \text{für } x > x_{\max} \end{cases}, \quad (4.69)$$

wobei  $E = p^2/(2m)$ , und wir uns wieder nicht für den Zwischenbereich interessieren, sondern nur fordern, dass für jedes  $p$  eine interpolierende Lösung existiert, also  $(A(p), B(p), C(p), D(p)) \in \mathcal{R}(E)$ .

Wie sieht nun die Lösung (4.69) für große Zeiten aus? Für sich genommen ist der Ausdruck für  $x < x_{\min}$  identisch mit dem für ein freies Wellenpaket, dessen Impulsraum-Wellenfunktion (also die Fourier-Transformierte) für  $p > 0$  durch  $A(p)$  und für  $p < 0$  durch  $B(|p|)$  gegeben ist. Wie wir in Abschnitt 3.2 gesehen haben, ist der Beitrag von  $A$  zum Wellenpaket für  $t \rightarrow \infty$  auf der positiven  $x$ -Achse konzentriert, spielt also in dem hier interessierenden Bereich  $x < 0$  keine Rolle. Entsprechendes gilt für den Beitrag von  $D$ . Fasst man die übrigen Beiträge zusammen, so kann man direkt

die Asymptote  $\Psi^{\text{out}}$  ablesen (und analog  $\Psi^{\text{in}}$  aus dem Verhalten für  $t \rightarrow -\infty$ ):

$$(\mathcal{F}\Psi^{\text{out}})(p) = \begin{cases} B(p) & \text{für } p < 0 \\ C(p) & \text{für } p > 0 \end{cases} \quad \text{und} \quad (\mathcal{F}\Psi^{\text{in}})(p) = \begin{cases} A(p) & \text{für } p > 0 \\ D(p) & \text{für } p < 0 \end{cases} . \quad (4.70)$$

Für festes  $E$  führen wir nun die  $2 \times 2$ -Matrix  $S(E)$  mit

$$S(E) \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C \\ B \end{pmatrix} \quad \text{für } (A, B, C, D) \in \mathcal{R}(E) \quad (4.71)$$

ein, womit sich schließlich der Streuoperator  $S : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx) \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx)$  ergibt als

$$(\mathcal{F}S\Psi)(p) = S_{11}(E)(\mathcal{F}\Psi)(p) + S_{12}(E)(\mathcal{F}\Psi)(-p) \quad (4.72)$$

$$(\mathcal{F}S\Psi)(-p) = S_{21}(E)(\mathcal{F}\Psi)(p) + S_{22}(E)(\mathcal{F}\Psi)(-p) \quad \text{für } p > 0 . \quad (4.73)$$

Wir nennen  $S_{11}(E)$  den **Transmissionskoeffizienten** und  $S_{21}(E)$  den **Reflexionskoeffizienten** für von  $-\infty$  einlaufende Teilchen (analog  $S_{22}$  und  $S_{12}$  für von  $+\infty$  einlaufende Teilchen). Zur Berechnung dieser Größen kann man direkt auf (4.71) zurückgehen und Lösungen  $\Psi$  der stationären Schrödingergleichung mit  $A = 1$ ,  $D = 0$  und also  $B = S_{21}(E)$  und  $C = S_{11}(E)$  suchen, also

$$\Psi(x) \approx \begin{cases} e^{ikx} + S_{21}(E) e^{-ikx} & \text{für } x \rightarrow -\infty \\ S_{11}(E) e^{ikx} & \text{für } x \rightarrow +\infty \end{cases} . \quad (4.74)$$

Diese sogenannte **Streurandbedingung** für die stationäre Schrödingergleichung haben wir gleich so geschrieben, dass sie ihren Sinn auch für Potentiale behält, die im Unendlichen genügend schnell gegen 0 gehen (und nicht, wie sonst hier angenommen, sogar exakt gleich 0 außerhalb eines endlichen Gebietes sind).

Ohne das Potential zu kennen, können wir zwei allgemeine Aussagen treffen. Für alle  $E$  gilt:

$$\boxed{S(E) \text{ ist unitär und } S_{11}(E) = S_{22}(E) .} \quad (4.75)$$

Die erste Eigenschaft impliziert nach (4.73) unmittelbar, dass der Streuoperator  $S$  mit  $S\Psi^{\text{in}} = \Psi^{\text{out}}$  ebenfalls unitär ist. Das war erwartet, denn dies bedeutet einfach, dass alle einlaufenden Teilchen auch wieder auslaufen. Nach der zweiten Aussage sind die Transmissionskoeffizienten für von rechts und von links einlaufende Teilchen gleich. Dem Betrag nach folgt dies ohnehin aus der Unitarität, aber es gilt sogar mit den Phasen. Die entsprechende Aussage für die Reflexionskoeffizienten gilt nicht.

*Beweis von (4.75):* Wir können nur die allgemeinen, also vom Potential unabhängigen, Eigenschaften der stationären Schrödingergleichung benutzen. Zunächst ist das die Konstanz der Wronski-Determinante. Seien also  $\Psi$  und  $\tilde{\Psi}$  irgendwelche Lösungen mit den Koeffizienten  $(A, B, C, D) \in \mathcal{R}(E)$  und  $(\tilde{A}, \tilde{B}, \tilde{C}, \tilde{D}) \in \mathcal{R}(E)$ . Dann besagt die Konstanz der Wronski-Determinante für  $\Psi, \tilde{\Psi}$ :  $A\tilde{B} - B\tilde{A} = C\tilde{D} - D\tilde{C}$ . Wenn wir hier  $C, B, \tilde{C}, \tilde{B}$  nach (4.71) einsetzen und berücksichtigen, dass  $A, D, \tilde{A}, \tilde{D}$  beliebig sind, bekommen wir Gleichungen für die  $S$ -Matrixelemente, von denen einzig die oben angegebene nicht trivial ist.

Die zweite allgemeine Eigenschaft ist die Zeitumkehrinvarianz, also die Tatsache, dass zu  $\Psi$  auch die komplex konjugierte Funktion  $\bar{\Psi}$  eine Lösung ist. Wenn also  $(A, B, C, D) \in \mathcal{R}(E)$ , gilt auch  $(\bar{B}, \bar{A}, \bar{D}, \bar{C}) \in \mathcal{R}(E)$  und damit nach (4.71)

$$S(E) \begin{pmatrix} \bar{B} \\ \bar{C} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{D} \\ \bar{A} \end{pmatrix} \quad \text{für } (A, B, C, D) \in \mathcal{R}(E). \quad (4.76)$$

Bis auf eine Komplexkonjugation und eine Vertauschung der Matrix-Indizes haben wir damit die zu  $S$  inverse Matrix bestimmt:

$$S(E)^{-1} = \begin{pmatrix} \overline{S_{22}(E)} & \overline{S_{21}(E)} \\ \overline{S_{12}(E)} & \overline{S_{11}(E)} \end{pmatrix}. \quad (4.77)$$

Wenn wir nun noch  $S_{11} = S_{22}$  verwenden, erhalten wir, dass  $S(E)^{-1} = S(E)^*$ , also  $S(E)$  unitär. ■

### 4.7.2 Streuung an Topf oder Stufe

Das Standardbeispiel für Streuung ist wieder der Fall eines rechteckigen Potentialtopfes (4.44), wobei wir allerdings auch  $W < 0$ , also eine Barriere, zulassen. Die Rechnung, die auf der Lösung der Schrödingergleichung mit den Randbedingungen (4.74) und stetiger Anpassung von  $\Psi$  und  $\Psi'$  an den Grenzen des Topfes ist vollkommen analog zur Rechnung in Abschnitt 4.4. Das Ergebnis ist

$$S_{11}(E) = \frac{2e^{-ikL}}{2 \cos \kappa L - i\left(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa}\right) \sin \kappa L} \quad (4.78)$$

$$S_{21}(E) = \frac{ie^{-ikL}\left(\frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}\right) \sin \kappa L}{2 \cos \kappa L - i\left(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa}\right) \sin \kappa L}, \quad \text{wobei} \quad (4.79)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{und} \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(E+W)}}{\hbar}. \quad (4.80)$$

Betrachten wir zunächst den Fall  $(E+W) > 0$ , also Energien oberhalb des Plateaus im Topf/in der Barriere. Bei  $\kappa L = n\pi$ , also bei den Eigenwerten eines unendlich hohen Topfes mit gleichem Boden ( $-W$ ), hat der Transmissionskoeffizient den Betrag 1: In der Nähe solcher Energien wird das Potential also vollkommen “durchsichtig”, was man als **Resonanz** bezeichnet. Minima des Transmissionskoeffizienten findet man ungefähr dort, wo der Sinus im Zähler von  $S_{21}$  Eins wird. Auf dieser Kurve ist

$$|S_{11}|^2 = \frac{4k\kappa}{(k^2 + \kappa^2)}, \quad (4.81)$$

was klein wird für  $\kappa \gg k$ , also  $(E+W) \gg E$ , also einen tiefen Topf bei geringer Energie. In diesem Bereich ist also das Verhältnis zwischen Maxima (= 1) und Minima besonders ausgeprägt. Mathematisch sieht man dies auch an den Eigenschaften der

auf komplexe Argumente fortgesetzten Funktion  $S_{11}(E)$ : Sie hat dann Pole nahe der reellen Achse (siehe etwa die Diskussion [Sch88], Abschnitt 3.7.1).

Interessant für das hier betrachtete Streuproblem ist auch der Bereich  $E < -W$ , also eine Potentialbarriere, bei einer Einschussenergie unterhalb der Barrierenenergie  $-W$ . Für klassische Teilchen würde dies natürlich vollständige Reflexion bedeuten. Für quantenmechanische Teilchen aber offenbar nicht, was man auch als **Tunneleffekt** bezeichnet. In diesem Bereich ist also  $\kappa^2 < 0$ , es bietet sich an, mit der Größe  $\kappa' = \kappa/i$  zu arbeiten. Unter Verwendung von  $\cos(i\kappa'L) = \cosh(\kappa'L)$ ,  $\sin(i\kappa'L) = i \sinh(\kappa'L)$  und  $\cosh^2(x) = 1 + \sinh^2(x)$  bekommen wir dann

$$|S_{11}(E)|^2 = \frac{1}{1 + ((\kappa'/k) + (k/\kappa'))^2 \sinh^2(\kappa'L)} . \quad (4.82)$$

Wenn also  $\kappa'$  groß wird (hohe Barriere) oder  $L$  groß wird (lange Barriere), geht der Transmissionskoeffizient exponentiell gegen Null. Dieses Verhalten lässt sich leicht auf das exponentielle Abklingen der Wellenfunktion im “klassisch verbotenen Bereich” zurückführen.

### 4.7.3 °Tunneln und Hartmann-Effekt

## 4.8 Punktwechselwirkungen

### 4.8.1 Das $\delta$ -Potential

Sowohl für das Problem der gebundenen Zustände als auch für die Streutheorie ist ein interessanter Grenzfall der Fall schmaler Töpfe oder allgemeiner von Potentialen, die in einem sehr kleinen Intervall  $[-\varepsilon, \varepsilon]$  lokalisiert sind. A priori ist nicht klar, ob in diesem Fall etwas vom Potential übrig bleiben kann. Genauer, sei für jedes  $\varepsilon$  ein Potential  $V_\varepsilon$  gegeben, das nur in  $[-\varepsilon, \varepsilon]$  von Null verschieden ist. Dazu gehört dann ein Zeitentwicklungsoperator  $U_t^\varepsilon = \exp(-it(P^2/(2m) + V_\varepsilon(Q))/\hbar)$ . Kann es dann passieren, dass  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} U_t^\varepsilon$  in einem geeigneten Sinn existiert, aber *nicht* gleich der freien Zeitentwicklung ist? Könnte es für die Limes-Dynamik zum Beispiel gebundene Zustände geben?

Sowohl für die Streutheorie als auch für gebundene Zustände spielen die Transferoperatoren (4.62) eine wichtige Rolle, indem sie das Verhalten des Potentials in einem ganzen Intervall zusammenfassen. Wenn wir ein Intervall auf einen Punkt zusammenschrumpfen lassen, bleibt nur noch eine Bedingung, die  $\Psi$  und  $\Psi'$  links und rechts vom betrachteten Punkt verknüpft. Mit anderen Worten, das Potential wirkt sich nur als Randbedingung am betrachteten Punkt aus. Also beispielsweise für ein bei  $x = 0$  konzentriertes Potential bekommen wir, mit der Notation  $\Psi(0^+) = \lim_{x \rightarrow 0; x > 0} \Psi(x)$  und

entsprechend  $\Psi(0^-)$ , eine Bedingung von der Form

$$\begin{pmatrix} \Psi(0^+) \\ \Psi'(0^+) \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \Psi(0^-) \\ \Psi'(0^-) \end{pmatrix}. \quad (4.83)$$

Damit dies eine sinnvolle Einschränkung an den Definitionsbereich wird, darf  $T$  im Gegensatz zu normalen Transferoperatoren nicht von der Energie abhängen. Das kommt aber auch richtig heraus. Nehmen wir ein Potential, das auf einem kleinen Intervall der Länge  $\varepsilon$  den großen Wert  $a/\varepsilon$  annimmt. Dann ist

$$T = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \exp \left( \varepsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{2m}{\hbar^2} \left( \frac{a}{\varepsilon} - E \right) & 0 \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{2ma}{\hbar^2} & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.84)$$

Der Parameter  $a$  war tatsächlich als Integral über  $V$  eingeführt, sodass das Potential wie eine approximierende Folge für  $a * \delta(x)$  skaliert wurde. Der Hamiltonoperator wird daher oft einfach als

$$H_a \Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) + a\delta(x)\Psi(x) \quad (4.85)$$

hingeschrieben, was aber nur eine Kurzform für die Randbedingung (4.83) mit (4.84) ist. Für sich genommen ist der Operator  $\delta(Q)$  nicht zu definieren, schon weil der Wert einer Wellenfunktion an einem Punkt nicht definiert ist: Die Funktionswerte  $\Psi(x)$  darf ja auf einer Menge vom Maß Null modifiziert werden ohne den Hilbertraumvektor  $\Psi$  zu ändern. Zur Illustration von (4.85) setzen wir formal eine Funktion wie  $\Psi(x) = \exp(-\lambda|x|)$  mit  $\lambda > 0$  ein. Dann ergibt die Differentiation formal  $\Psi'(x) = -\lambda * \text{sign}(x)\Psi(x)$  und nach Produktregel für Distributionen  $\Psi''(x) = -2\lambda\delta(x)\Psi(x) + \lambda^2\Psi(x)$ . Gerade wenn  $a = -\hbar^2\lambda/m$  ist, ist einerseits die Randbedingung erfüllt und heben sich andererseits die  $\delta$ -Terme weg. Dies ist also die Lösung für einen gebundenen Zustand mit Energie  $E = -\hbar^2\lambda^2/(2m)$ . Offenbar ist dies nur beim attraktiven  $\delta$ -Potential möglich, und es gibt auch nur diesen einen gebundenen Zustand.

Wenn man sich mehr Mühe mit dem Potentialverlauf gibt, der dann auf einen Punkt herunterskaliert wird, kann man auch kompliziertere Matrizen  $T$  bauen. Wenn man auch Differentialoperatoren erster Ordnung zulässt, kann  $T$  auch komplex werden, wobei man dafür sorgen muss, dass der Hamiltonoperator mit dieser Randbedingung selbstadjungiert bleibt. Insgesamt bekommt man eine vierparametrische Schar von möglichen  $T$ . In zwei Raumdimensionen und in drei Raumdimensionen gibt es jeweils eine einparametrische Schar (wobei die Skalierung der Potentiale *nicht*  $\delta$ -funktionsartig (also mit konstantem Integral) gewählt wird. Ab vier Raumdimensionen gibt es gar keine Punktwechselwirkungen mehr. Diese vielleicht etwas merkwürdig anmutenden Behauptungen werden im folgenden Unterabschnitt hergeleitet.

## 4.8.2 \* $\circ$ Erweiterung symmetrischer Operatoren

Für diesen Abschnitt werden die weiterführenden Teile von Abschnitt 2.2.6, insbesondere die Definition des Adjungierten eines unbeschränkten Operators und die Unterscheidung zwischen symmetrischen und selbstadjungierten Operatoren vorausgesetzt.

Wir betrachten also einen symmetrischen Operator  $H_0$ . Zur Behandlung von “Potentialen am Punkt 0” wird dies der Operator der kinetischen Energie sein (Laplace-Operator mit Faktoren), eingeschränkt auf differenzierbare Funktionen, die in einer kleinen Umgebung des Ursprungs verschwinden. Damit ist gesagt, dass die Dynamik mit Potential für Wellenfunktionen, die weg vom Ursprung lokalisiert sind, wenigstens infinitesimal gleich der freien Dynamik ist. Der gesuchte Operator  $H$  soll also eine Erweiterung  $H \supset H_0$  sein. Wie man an der Definition (2.65) des Adjungierten direkt sieht, gilt dann  $H^* \subset H_0^*$ , und weil  $H$  ja wenigstens symmetrisch sein soll, gilt die Inklusionskette

$$H_0 \subset H \subset H^* \subset H_0^*. \quad (4.86)$$

Da alle vorkommenden Operatoren Einschränkungen von  $H_0^*$  sind, sind sie jeweils durch die Angabe des Definitionsbereichs, eines Teilraums von  $\text{dom } H_0^*$ , vollständig spezifiziert. Die gleichen Inklusionen gelten auch für die Abschlüsse, sodass wir im folgenden einfach  $H_0$  und  $H$  abgeschlossen, also  $H_0 = H_0^{**}$  und  $H = H^{**}$  annehmen können.

Die Geometrie solcher Inklusionen wird durch eine Art Skalarprodukt auf  $\text{dom } H_0^*$  bestimmt, nämlich

$$\langle\!\langle \varphi, \psi \rangle\!\rangle = \frac{i}{2} \left( \langle \varphi, H_0^* \psi \rangle - \langle H_0^* \varphi, \psi \rangle \right). \quad (4.87)$$

Es erfüllt die typischen Eigenschaften von Skalarprodukten, ist aber “indefinit” was bedeutet, dass  $\langle\!\langle \varphi, \varphi \rangle\!\rangle$  zwar stets reell ist, aber beide Vorzeichen haben kann. Die genaue Struktur wurde durch von Neumann [?] aufgeklärt: Dazu führen wir für  $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$  den **Defektraum**

$$\mathcal{D}_z = \left( (H_0 - z) \text{dom } H_0 \right)^\perp = \{ \psi \in \text{dom } H_0^* \mid H_0^* \psi = \bar{z} \psi \} \quad (4.88)$$

Wir fixieren nun einen Wert von  $z$  mit  $\Im m z > 0$  und setzen  $\mathcal{D}_+ = \mathcal{D}_z$  und  $\mathcal{D}_- = \mathcal{D}_{\bar{z}}$ . Von Neumann hat dann gezeigt, dass

$$\text{dom } H_0^* = \text{dom } H_0 \oplus \mathcal{D}_+ \oplus \mathcal{D}_- \quad (4.89)$$

ist, wobei das Symbol  $\oplus$  hier einerseits bedeutet, dass jeder Vektor  $\varphi \in \text{dom } H_0^*$  eine *eindeutige* Zerlegung  $\varphi = \varphi_0 + \varphi_+ + \varphi_-$  mit Summanden in diesen drei Räumen hat. Andererseits bedeutet es auch, dass die drei Teilräume orthogonal im Sinne des indefiniten Skalarprodukts sind. Dabei ist  $\text{dom } H_0$  der Nullraum  $\{ \varphi \mid \forall \psi \langle\!\langle \psi, \varphi \rangle\!\rangle = 0 \}$  und auf den Defekträumen  $\mathcal{D}_z$  gilt  $\langle\!\langle \psi, \psi \rangle\!\rangle = \Im m z \|\psi\|^2$ , also speziell  $\langle\!\langle \psi, \psi \rangle\!\rangle = \pm \|\psi\|^2$  für  $\psi \in \mathcal{D}_\pm$ .

*Beweis der Behauptungen des letzten Absatzes.* Zunächst folgt die zweite Gleichung in (4.88) aus der Definition des Adjungierten und direktes Nachrechnen [Ü!], ebenso die Gleichung für das indefinite Skalarprodukt auf diesen Räumen und deren Orthogonalität.

Dabei ist der Raum  $(H_0 - z) \text{dom } H_0$  bereits selbst abgeschlossen: Für  $z = x + iy$  mit  $x, y \in \mathbb{R}$  haben wir für  $\varphi = (H_0 - z)\psi$  mit  $\psi \in \text{dom } H_0$ :

$$\|\varphi\|^2 = \|(H_0 - x)\psi\|^2 + 2\Re \langle (H_0 - x)\psi, -iy\psi \rangle + |y|^2 \|\psi\|^2. \quad (4.90)$$

Weil  $H_0$  symmetrisch ist, verschwindet der mittlere Term. Wenn daher Vektoren  $\varphi_n = (H_0 - z)\psi_n$  eine Cauchy-Folge bilden, dann auch  $\psi_n$  und  $(H_0 - x)\psi_n$ . Weil wir aber  $H_0$  als abgeschlossen vorausgesetzt hatten, ist  $\lim_n \psi_n =: \psi \in \text{dom } H_0$  und  $\lim_n H_0\psi_n = H_0\psi$ . Damit ist  $\lim_n \varphi_n = (H_0 - z)\psi$ .

Sei nun  $\varphi \in \text{dom } H_0^*$ . Dann gibt es eine eindeutige orthogonale Zerlegung von  $(H_0^* - z)\varphi$  nach dem eben als abgeschlossen nachgewiesenen Unterraum und seinem Komplement  $\mathcal{D}_z$

$$(H_0^* - z)\varphi = (H_0 - z)\psi + (\bar{z} - z)\varphi_+. \quad (4.91)$$

Dabei haben wir den Faktor  $(\bar{z} - z) \neq 0$  zur späteren Bequemlichkeit gewählt. Nun gilt  $H_0\psi = H_0^*\psi$  und  $\bar{z}\varphi_+ = H_0^*\varphi_+$ . Also können wir die obige Gleichung zusammenfassen als  $(H_0^* - z)(\varphi - \psi - \varphi_+) = 0$ , also  $\varphi_- := (\varphi - \psi - \varphi_+) \in \mathcal{D}_-$ . Damit ist  $\varphi = \psi + \varphi_+ + \varphi_-$  die gesuchte Zerlegung. ■

Für die Lösung der Inklusion (4.86) sind die Anteile von  $\text{dom } H_0$  uninteressant: Die sind eh immer dabei. Wir gehen also zum Vektorraum-Quotienten  $\mathcal{K}_0 = \text{dom } H_0^* / \text{dom } H_0$  über, was einfach nur bedeutet, dass wir Vektoren als gleich betrachten, die sich um ein Element von  $\text{dom } H_0$  unterscheiden. Da dies der Nullraum des Skalarproduktes (4.87) ist, bleibt das Skalarprodukt auf  $\mathcal{K}_0$  wohldefiniert, und ist nicht ausgeartet, d.h. nur der Nullvektor ist auf allen anderen senkrecht. Räume mit indefinitem Skalarprodukt sind allgemein schwierig, und die Intuitionen aus dem definiten (Hilbert-) Fall oft falsch. Das fängt damit an, dass das Skalarprodukt keine Norm und keinen vernünftigen Konvergenzbegriff mehr definiert. Man braucht daher ein zweites, definites Skalarprodukt, oder noch spezieller, eine Zerlegung in zwei orthogonale Teilräume  $\mathcal{K}_+ \oplus \mathcal{K}_-$ , auf denen das Skalarprodukt positiv, bzw. negativ definit ist. Man nennt dann  $(\mathcal{K}, \langle \cdot, \cdot \rangle, \mathcal{K}_+)$  einen **Krein-Raum** [?]. Im vorliegenden Fall ist all dies durch von Neumann's Zerlegung (4.89) geregelt, denn es ist ja  $\mathcal{K}_0 = \mathcal{D}_+ \oplus \mathcal{D}_-$ . Die Dimensionen  $n_{\pm} = \dim \mathcal{K}_{\pm}$  heißen die Indizes des Krein-Raums  $(\mathcal{K}_0, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ , bzw. die **Defektindizes** des symmetrischen Operators  $H_0$ .

Nun entsprechen die Unterräume  $\text{dom } H$  mit  $\text{dom } H_0 \subset \text{dom } H \subset \text{dom } H_0^*$  gerade den Teilräumen  $\mathcal{K} \subset \mathcal{K}_0$ , wobei zu  $H^*$  gerade das Orthogonalkomplement  $\mathcal{K}^{\perp}$  bezüglich des indefiniten Skalarprodukts gehört. Die Inklusion  $\mathcal{K} \subset \mathcal{K}^{\perp}$  bedeutet, dass das indefinite Skalarprodukt auf  $\mathcal{K}$  verschwindet, also der Operator  $H$  symmetrisch ist. Dadurch wird (4.86) zu der Inklusionskette der Quotientenräume

$$\{0\} \subset \mathcal{K} \subset \mathcal{K}^{\perp} \subset \mathcal{K}_0. \quad (4.92)$$

Wir wollen jetzt alle abgeschlossenen Räume  $\mathcal{K}$  mit dieser Eigenschaft charakterisieren. Für Vektoren  $\varphi = \varphi_+ \oplus \varphi_- \in \mathcal{K}$  gilt dann  $\|\varphi_+\| = \|\varphi_-\|$ . Dies heißt zunächst, dass zu gegebenem  $\varphi_+$  der Partnervektor  $\varphi_-$  eindeutig bestimmt ist (Man betrachte die Differenz). Wir setzen  $\tilde{\mathcal{K}}_{\pm} \subset \mathcal{K}_{\pm}$  gleich der Menge der  $\varphi_{\pm}$ , die in solchen Zerlegungen vorkommen. Wegen der Gleichheit der Normen ist für eine Cauchyfolge in  $\tilde{\mathcal{K}}_+$  auch die Folge der Partnervektoren konvergent, also  $\tilde{\mathcal{K}}_+$  ein abgeschlossener Unterraum, der durch einen Projektor  $P_+ : \mathcal{K}_+ \rightarrow \tilde{\mathcal{K}}_+$  charakterisiert ist (entsprechend für  $\tilde{\mathcal{K}}_- =$



$P_- \mathcal{K}_-$ ). Dann definieren wir einen Operator  $S : \mathcal{K}_+ \rightarrow \mathcal{K}_-$  mit  $S\varphi_+ = \varphi_-$  für  $\varphi_+ \in \tilde{\mathcal{K}}_+$ , fortgesetzt auf das Orthogonalkomplement durch 0. Diese letzte Bedingung können wir ausdrücken als  $S(\mathbb{1} - P_+) = 0$ . Es ist dann  $\mathcal{K} = \{P_+\varphi \oplus SP_+\varphi\} = \{P_+\varphi \oplus S\varphi\}$ , jetzt mit beliebigem  $\varphi \in \mathcal{K}_+$ . Wegen  $\|\varphi_+\| = \|\varphi_-\|$  ist  $P_+ = S^*S$  und entsprechend  $P_- = SS^*$ . Der Operator  $S$  bestimmt also die Projektoren  $P_\pm$  und den Teilraum  $\mathcal{K}$  vollständig. Er unterliegt nur der Einschränkung  $S = S^*SS^*$  ist also eine **partielle Isometrie**. Wir fassen also zusammen:

Die abgeschlossenen Teilräume  $\mathcal{K}$  eines Krein-Raums mit  $\mathcal{K} \subset \mathcal{K}^\perp$  entsprechen genau den partiellen Isometrien  $S : \mathcal{K}_+ \rightarrow \mathcal{K}_-$ , so dass

$$\mathcal{K} = \{S^*S\varphi \oplus S\varphi \mid \varphi \in \mathcal{K}_+\} = \{S^*\psi \oplus SS^*\psi \mid \psi \in \mathcal{K}_-\} \quad (4.93)$$

Wenn wir den Raum  $\mathcal{K}$  weiter vergrößern wollen, also ein  $\mathcal{L}$  finden mit  $\mathcal{K} \subset \mathcal{L} \subset \mathcal{L}^\perp \subset \mathcal{K}^\perp$ , können wir wieder die Quotienten nach  $\mathcal{K}$  nehmen. Durch Zerlegen aller Vektoren in Anteile von  $P_\pm \mathcal{K}_\pm$  und Anteile orthogonal dazu, sieht man, dass dies darauf hinausläuft, die Räume  $\mathcal{K}_\pm$  durch  $(\mathbb{1} - S^*S)\mathcal{K}_+$  und  $(\mathbb{1} - SS^*)\mathcal{K}_-$  zu ersetzen. Wenn also  $m = \dim S^*S\mathcal{K}_+ = \dim SS^*\mathcal{K}_-$  ist, bekommen wir einfach das entsprechende Problem mit Indizes  $n'_+ = n_+ - m$  und  $n'_- = n_- - m$ . Dies geht, solange beide Indizes positiv sind, also bis das Skalarprodukt positiv definit oder negativ definit wird. Zusammenfassend gilt für einen abgeschlossenen symmetrischen Operator  $H_0$  mit Defektindizes  $(N_+, n_-)$ :

- $H_0$  ist **maximal symmetrisch**, das heißt  $H_0$  hat keine echten symmetrischen Erweiterungen, genau dann, wenn einer der Defektindizes verschwindet.
- $H_0$  hat eine **selbstadjungierte Erweiterung** genau dann, wenn  $n_+ = n_-$ . In diesem Fall sind die Erweiterungen durch die unitären Operatoren auf  $\mathbb{C}^n$  parametrisiert.
- Wenn  $n_+ = n_- = 0$  und  $H_0$  abgeschlossen ist, dann ist  $H_0$  schon selbstadjungiert. Wenn die Abgeschlossenheit nicht vorausgesetzt wird, zum Beispiel, weil  $H_0$  erst einmal auf einem bequem zu bearbeitenden Definitionsbereich hingeschrieben wurde, dann ist der Abschluss von  $H_0$  selbstadjungiert und damit  $H_0$  selbst **wesentlich selbstadjungiert**.

*Beispiel: Punktwechselwirkungen in beliebiger Dimension.*

Wir nehmen als  $H_0 = -\Delta$  den Laplace-Operator in  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^s, dx)$  in  $s$  Raumdimensionen, wobei wir den Definitionsbereich auf Funktionen einschränken, die glatt sind und mit all ihren Ableitungen am Ursprung verschwinden. Das schaut man sich am besten im Impulsraum an, wo diese Funktionen  $\Psi$  die Eigenschaft haben, dass  $f(p)\Psi(p)$  für beliebige Polynome  $f$  integrierbar ist, aber die Integrale alle Null sind. Der  $-\Delta$  wirkt in der Impulsdarstellung wie Multiplikation mit  $p^2 := \sum_i p_i^2$ .

Wir suchen nun eine Defektlösung, das heißt ein  $\varphi$ , das senkrecht auf allen

Funktionen der Form  $\psi(p)(p^2 - i)$  mit  $\psi \in \text{dom } H_0$  steht, also

$$\int dp \overline{\psi(p)}(p^2 + i)\varphi(p) = 0 \quad (4.94)$$

für alle  $\psi$  die mit beliebigen Polynomen integriert Null ergeben. Das heißt aber, dass  $(p^2 + i)\varphi(p) = f(p)$  selbst ein Polynom sein muss, also

$$\varphi(p) = \frac{f(p)}{p^2 + i} \quad (4.95)$$

für ein Polynom  $f$ . Wann ist eine solche Funktion in  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^s, dp)$ ? Dazu brauchen wir gerade

$$\int_0^\infty dq \int d\omega \frac{q^{s-1}}{q^4 + 1} |f(q\omega)|^2 < \infty. \quad (4.96)$$

Dabei haben wir  $p = q\omega$  gesetzt, mit  $q = |p|$  und einem Einheitsvektor  $\omega$ , und die Integration in Radial- und Winkelteil aufgespalten. Nun ist  $f$  eine Funktion, die im Unendlichen nicht abfällt. Es muss also der Vorfaktor genügend schnell abfallen, damit die Radialintegration existiert, also  $s - 5 < -1$ , bzw.  $s < 4$ . Für  $s \geq 0$  sind damit die Defektindizes 0, also  $H_0$  wesentlich selbstadjungiert. Für  $s = 2$  und  $s = 3$  bekommen wir eine Defektlösung mit konstantem  $f$ . Wenn  $f$  ein Polynom mit linearem Term ist, wächst  $|f|^2$  in einigen Richtungen quadratisch, und für Integrabilität brauchen wir  $s - 5 + 2 < -1$ , also  $s < 2$ . Höhere Potenzen sind offenbar ganz unmöglich. Damit sind die Defektindizes  $n_\pm = 2$  für  $s = 1$ ,  $n_\pm = 1$  für  $s = 2$  und  $s = 3$ , und  $n_\pm = 0$  für alle höheren Dimensionen.

Eine detaillierte Analyse findet sich in [?]. Zu den gebundenen Zuständen in  $s = 2$  und  $s = 3$ , siehe Übungsaufgabe.  $\diamond$

Beispiel: Punktwechselwirkung in einer Dimension.

Wir betrachten jetzt ein Teilchen in einer Dimension, mit herausgenommenem Punkt 0, diesmal aber direkt in der Ortsdarstellung.  $\diamond$

## Anmerkungen zum Kapitel 4

### Zu Abschnitt 4.1.2 (Zerfließen)

Die Meinung, das “Zerfließen des Wellenpakets” sei ein quantenmechanischer Effekt hält sich hartnäckig, obwohl Streutheoretiker es schon lange besser wissen. Zu der im Text aufgestellten Behauptung zum Thema “ $Q/t \rightarrow P/m$ ” enthalten die Übungsaufgaben eine Skizze.

### Zu Abschnitt 4.2 bis 4.6 (Eindimensionale Quantenmechanik)

All dies ist recht konventionell, und findet sich in vielen Büchern, zum Beispiel [Sch88, Sch68]. Vorsicht: Die Argumente, die zur Begründung der Anpassungsbedingungen bei Sprungstellen des Potentials angeführt werden, sind bei einigen Autoren (z.B. [Nol92]) missglückt.

**Zu Abschnitt 4.7** (Streutheorie)

Viele Behandlungen der Streutheorie beginnen sofort bei der Schrödingergleichung mit Streurandbedingungen (“Stationäre Streutheorie”), und begründen dies nicht weiter aus dem asymptotischen Verhalten quantenmechanischer Zustände für  $t \rightarrow \pm\infty$  (“zeitabhängige Streutheorie”). Ein Lehrbuch mit relativ starker Betonung der Streutheorie (überwiegend in drei Dimensionen) ist [Gra69]. Wer Streutheorie ernsthaft anzuwenden hat, sollte mal in das Buch von Newton [New82] schauen. Für die mathematische Ausarbeitung der zeitabhängigen Theorie [RS80, Vol.3]

**Zu Abschnitt 4.8.2** (Erweiterung symmetrischer Operatoren)

Von Neumanns Theorie der

## Aufgaben zum Kapitel 4

**Aufgabe 4.1:** Quadratic Hamiltonians

**Aufgabe 4.2:** Zeigen Sie: Wenn  $\Psi_0$  der nicht entartete Grundzustand eines Hamiltonoperators  $H$  ist, und zum nächst größeren Eigenwert  $E_1$  die Lücke  $E_1 - E_0 > 0$  besteht, dann gilt für jeden Dichteoperator  $\rho$  mit  $\text{tr } \rho H \leq E_0 + \varepsilon$ , dass  $\rho$  dem Eigenzustand  $\Psi_0$  nahe ist, in dem Sinn, dass  $\langle \Psi_0 | \rho | \Psi_0 \rangle \geq 1 - \varepsilon / (E_1 - E_0)$ .  $\vdash H$

**Aufgabe 4.3:** Sei  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  ein Zustand mit Unschärfeprodukt  $\Delta_\rho(P)\Delta_\rho(Q) \leq (\hbar/2) + \varepsilon$ . Wenden Sie Aufgabe 4.2 auf einen geeignet verschobenen und skalierten Oszillator an, und zeigen Sie so, dass es dann einen Vektor  $\Psi_0$  mit minimaler Unschärfe gibt, der nahe bei  $\rho$  liegt, in dem Sinn, dass  $\langle \Psi_0 | \rho | \Psi_0 \rangle \geq 1 - \varepsilon / (E_1 - E_0)$ .

**Aufgabe 4.4:** Punktstörung.



# Kapitel 5

## Drehungen und andere Symmetrien

### 5.1 Symmetrie-Transformationen des Zustandsraums

Die Quantenmechanik eines freien Teilchens ist invariant unter vielen Symmetrietransformationen, die alle eine unmittelbare Interpretation haben. Die Zeittranslationen, die durch die unitären Zeittranslationsoperatoren  $U_t = \exp(-itH/\hbar)$  implementiert werden, hatten wir schon ausführlicher diskutiert. Wenn  $\Psi \in \mathcal{H}$  ein bestimmtes Präparierverfahren beschreibt, dann beschreibt  $U_t\Psi$  das gleiche Verfahren, aber relativ zur Messung um die Zeit  $t$  früher als das zu  $\Psi$  gehörige durchgeführt.  $U_t$  ist also der “Warteoperator”. Als Transformation auf Dichtematrizen bedeutet dies  $|\Psi\rangle\langle\Psi| \mapsto |U_t\Psi\rangle\langle U_t\Psi| = U_t|\Psi\rangle\langle\Psi|U_t^*$ , also für allgemeine Dichtematrizen auch  $\rho \mapsto U_t\rho U_t^*$ . Ein Ziel dieses Abschnittes ist, zu erklären, dass diese Form für jede Art Symmetrie der Quantenmechanik zwingend ist.

Doch zunächst ein paar der anderen Symmetrien der nichtrelativistischen Quantenmechanik. Wir können ein gegebenes Präparierverfahren einfach an einem anderen Ort aufbauen. Da die Argumente der Wellenfunktionen  $\Psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3, dx)$  als Orte interpretiert sind, sollte dies einfach eine Verschiebung der Wellenfunktionen bedeuten, also

$$\text{Translation:} \quad (U_a^{(2)}\Psi)(x) = \Psi(x - a) , \quad (5.1)$$

wobei der obere Index einfach verschiedene Symmetrietypen durchnummeriert. Wie bei der Zeittranslation ist die Interpretation die einer *relativen* Verschiebung zwischen Präparier- und Registrierteil eines Experiments. Ebenso wie bei den Zeittranslationen könnten wir die Transformation äquivalent auch auf Observable anwenden (“Heisenbergbild”), bleiben aber hier der Einfachheit halber nur bei der Transformation der Zustände. Entsprechend bekommen wir

$$\text{Drehung:} \quad (U_R^{(3)}\Psi)(x) = \Psi(R^{-1}x) \quad (5.2)$$

$$\text{Impulstranslation (Schub):} \quad (U_p^{(4)}\Psi)(x) = e^{ip \cdot x/\hbar} \Psi(x) , \quad (5.3)$$

wobei  $R$  eine orthogonale (Dreh-)Matrix ist, und die Impulstranslation durch Fourier-Transformation, Verschiebung des Impulsarguments und Rücktransformation entsteht. Dazu kommen die Spiegelungsoperationen

$$\text{Raumspiegelung (Parität):} \quad (U^{(5)}\Psi)(x) = \Psi(-x) \quad (5.4)$$

$$\text{Zeitspiegelung:} \quad (U^{(6)}\Psi)(x) = \overline{\Psi(x)} . \quad (5.5)$$

Die Zeitspiegelung ist das Analogon der klassischen Bewegungsumkehr, bei der die Orte festgehalten werden, aber alle Geschwindigkeiten (bzw. Impulse) umgekehrt werden.  $U^{(6)}$  ist ein **antiunitärer** Operator, das heißt, komplexe Faktoren werden konjugiert durchgezogen:  $U^{(6)}(\lambda\Psi) = \bar{\lambda}(U^{(6)}\Psi)$ . Das verlangt einige kleine Vorsichtsmaßnahmen beim Rechnen mit solchen Operatoren, auf die wir hier aber nicht eingehen, da wir Zeitspiegelungen selten brauchen werden. All die hier aufgeführten Transformationen und ihre Produkte bilden zusammen die **Galilei-Gruppe**, also die gleiche Symmetriegruppe die wir auch schon für klassische nichtrelativistische Teilchen kennen.

In all diesen Fällen wird die Symmetrie auf Dichtematrizen in der Form  $\rho \mapsto U\rho U^*$  angewendet. Da die Dichtematrizen eine unmittelbare Bedeutung für die statistische Interpretation haben, ist dies die Transformation, auf die es eigentlich ankommt. Die Form  $U\rho U^*$  mit einem unitären  $U$  erscheint dabei ziemlich speziell. (Der Raum der hermiteschen Operatoren über einem  $d$ -dimensionalen Hilbertraum hat  $d^2$  reelle Dimensionen. Transformationen auf hermiteschen Matrizen sind also durch  $d^4$  Parameter bestimmt. Dagegen braucht man für eine unitäre Matrix nur  $d^2$  Parameter). Von einer Symmetrietransformation müssen wir natürlich fordern, dass sie invertierbar ist. Im folgenden **Satz von Wigner** kommt dazu nur noch die Linearität, genauer die Erhaltung von Konvexkombinationen der Dichtematrizen, die ja als statistische Mischung eine physikalische Bedeutung hat. Dies reicht tatsächlich aus, um die Standardform für Symmetrien in der Quantenmechanik abzuleiten:

Sei  $\mathcal{H}$  ein Hilbertraum und  $T$  eine bijektive und lineare Transformation der Menge der Dichtematrizen auf sich selbst. Dann gibt es einen unitären oder anti-unitären Operator  $U$ , sodass

$$T(\rho) = U\rho U^* . \quad (5.6)$$

$U$  ist durch  $T$  bis auf eine Phase eindeutig bestimmt.

Meist wird nicht eine einzelne Symmetrietransformation betrachtet, sondern eine **Gruppe** von solchen Transformationen. Bezeichnen wir die Menge dieser Transformationen mit  $G$  und deren Verknüpfungsregel mit “ $\circ$ ” (also  $(g_1, g_2) \mapsto g_1 \circ g_2$ ). Jedem Element  $g \in G$  entspricht dann eine Symmetrietransformation  $T_g$  der quantenmechanischen Zustände, und es muss natürlich auch die Verknüpfungsregel

$$T_{g_1 \circ g_2} = T_{g_1} T_{g_2} \quad (5.7)$$

gelten. Man nennt dann  $g \mapsto T_g$  auch eine **Darstellung** der Gruppe durch die Operatoren  $T_g$ . Nach dem Satz von Wigner können wir also schließen, dass es zu jedem

$g \in G$  einen (anti-)unitären Operator  $U_g$  gibt, mit  $T_g(\rho) = U_g \rho U_g^*$ . Wegen der Wahlmöglichkeit für die Phase folgt nun nicht mehr, dass die  $U_g$  ebenfalls eine Darstellung der Gruppe bilden, sondern nur noch, dass

$$U_{g_1 \circ g_2} = \zeta(g_1, g_2) U_{g_1} U_{g_2} \quad (5.8)$$

mit einer Phase  $\zeta(g_1, g_2)$ . Die Phasenfunktion  $\zeta$  hängt von der willkürlichen Wahl der Phasen für die  $U_g$  ab und kann oft, aber nicht immer, durch geschickte Wahl der Phasen der  $U_g$  zu 1 gemacht werden. Man nennt  $U_g$  eine **Strahldarstellung** der Gruppe  $G$  oder auch: “Darstellung bis auf einen Faktor” oder “projektive Darstellung”.

Ob die Phase trivial gewählt werden kann, hängt unter anderem auch von der Struktur der Gruppe ab (genauer: von deren “Kohomologie”). Für die Gruppe  $(\mathbb{R}, +)$  kann sie immer trivial gewählt werden. Wir brauchen dann also nur “echte” Darstellungen zu betrachten, die also die Relation  $U_{t+s} = U_t U_s$  erfüllen. Diese **einparametrischen unitären Gruppen**, von denen es oben mehrere Beispiele gibt werden wir im nächsten Abschnitt noch genauer behandeln.

Wir schließen diesen Abschnitt durch ein Beispiel, das zeigt, dass das Auftreten der Phasen  $\zeta$  keineswegs exotisch ist: Wir betrachten die Untergruppe der Galilei-Gruppe, die aus Translationen und Schüben besteht, also aus allen Translationen des Phasenraums. Die Gruppenelemente sind daher durch einen Ortsverschiebungsparameter  $q \in \mathbb{R}^d$  und einen Impulsverschiebungsparameter  $p \in \mathbb{R}^d$  parametrisiert. (Wir können hier ohne Schwierigkeiten  $d < \infty$  Ortskoordinaten statt  $d = 3$  zulassen). Die zugehörigen unitären Operatoren ergeben sich als Produkt aus Orts- und Impulsverschiebung, und wir multiplizieren sie zusätzlich mit einer Phase, um später eine besonders einfache Form für  $\zeta$  zu bekommen:

$$(W_{q,p} \Psi)(x) = \exp \left( -\frac{i}{2\hbar} p \cdot q + \frac{i}{\hbar} p \cdot x \right) \psi(x - q), \quad (5.9)$$

wobei der Punkt für das Skalarprodukt in  $\mathbb{R}^d$  steht ( $p \cdot q = \sum_{\mu} p_{\mu} q_{\mu}$ ). Für diese sogenannten **Weyl-Operatoren** gelten die “Weyl-Relationen”

$$W_{q_1, p_1} W_{q_2, p_2} = \exp \left( \frac{i}{2\hbar} (p_1 \cdot q_2 - p_2 \cdot q_1) \right) W_{q_1 + q_2, p_1 + p_2}. \quad (5.10)$$

Die Weyl-Operatoren bilden also eine Strahldarstellung der Gruppe  $(\mathbb{R}^{2d}, +)$ . Die Klammer im Exponenten des Faktors  $\zeta$  bezeichnet man auch als die **symplektische Form** auf dem Phasenraum. Da die Weyl-Operatoren durch die Operatoren  $P_j, Q_j$  “erzeugt” werden (siehe nächster Abschnitt), sind die Weyl-Relationen im Wesentlichen äquivalent zu den kanonischen Vertauschungsrelationen für Ort und Impuls.

## 5.2 Erzeuger und Vertauschungsrelationen

Die Gruppe  $(\mathbb{R}, +)$  tritt in vielfacher Weise auch als Untergruppe anderer Gruppen auf: in der Galilei-Gruppe beispielsweise als Gruppe der Translationen in einer festen

Richtung, der Schübe in einer festen Richtung, der Drehungen um eine feste Achse und so weiter. Eine Darstellung der Galilei-Gruppe liefert also immer auch eine Reihe von Darstellungen der Gruppe  $(\mathbb{R}, +)$ , d.h. eine einparametrische unitäre Gruppe. Es lohnt sich also, die Struktur solcher Gruppen allgemein zu klären.

Die Funktionalgleichung  $u_t u_s = u_{t+s}$  ist auch für Zahlen  $u_t$  wohl bekannt. Sie hat sehr wilde Lösungen (nicht “messbare” im Sinne der Maßtheorie) — und sehr brave. Jede messbare Lösung ist automatisch stetig, und von der speziellen Form  $u_t = e^{iat}$  für ein festes  $a \in \mathbb{C}$ . Dabei sind die Lösungen mit  $|u_t| = 1$  gerade die mit  $a \in \mathbb{R}$ . Für Operatoren  $U_t$  ist es analog: Die Operatoren  $U_t$  sind ja vertauschbare normale Operatoren, lassen sich also gleichzeitig zu Multiplikationsoperatoren transformieren. Dann ist  $(U_t \psi)(x) = u_t(x) \psi(x)$ , und die gerade betrachtete Funktionalgleichung muss an jedem Punkt  $x$  gelten, sodass  $u_t(x) = \exp(-ig(x)t/\hbar)$ , jedenfalls wenn man zeigen kann, dass die “wilden Fälle” mit Maß Null vorkommen. Die möglicherweise unbeschränkte Funktion  $g$  bildet wieder einen Multiplikationsoperator, der also gleich als gemeinsam mit den  $U_t$  diagonalisiert auftaucht. Umgekehrt ist auch klar, dass jeder unbeschränkte reelle Multiplikationsoperator (also auch jeder Operator, der sich unitär auf diese Form bringen lässt) auf diese Weise mit einer einparametrischen unitären Gruppe zusammenhängt. Zusammengefasst und präzisiert wird all dies durch den **Satz von Stone und von Neumann**:

Sei  $U_t$ ,  $t \in \mathbb{R}$  eine einparametrische Gruppe von unitären Operatoren in einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$ , die schwach stetig ist (d.h. alle Matrixelemente  $\langle \Phi, U_t \Psi \rangle$  sind stetige Funktionen von  $t$ ). Dann gibt es einen (möglicherweise unbeschränkten) selbstadjungierten Operator  $G$ , den **Erzeuger** von  $U_t$ , sodass  $U_t = \exp(\frac{-it}{\hbar} G)$ .  $G$  ist bestimmt durch die Formel

$$G\Psi = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i\hbar}{\varepsilon} (U_\varepsilon \Psi - \Psi) , \quad (5.11)$$

wobei der Definitionsbereich von  $G$  gerade aus den Vektoren  $\Psi$  besteht, für die dieser Limes in Norm existiert.

Orts und Impulsoperatoren sind offenbar von diesem Typ. Ebenso der Hamiltonoperator, der also der Erzeuger der Zeittranslationen ist. Übrigens hat  $\hbar$  in diesem mathematischen Satz eigentlich nichts verloren. Ich habe einfach die in der Physik übliche Konvention eingesetzt. Der tiefere Sinn dieser Konvention ist, dass die Erzeuger oft eine Doppelrolle als Observable spielen. Bei der Diskussion des klassischen Limes sieht man aber, dass ein Faktor  $\hbar$  zwischen den beiden Rollen des gleichen Operators liegt. Es wäre also “Erzeuger (definiert ohne  $\hbar$  im Exponenten)” gleich “Observable dividiert durch  $\hbar$ ”. Um also die Zahl der unabhängigen Formelbuchstaben nicht unnötig aufzublasen, ist es praktisch, den Faktor  $\hbar$  gleich in der Formel für Erzeuger unterzubringen. Dass jeder Erzeuger einer physikalisch relevanten Gruppe auch schon eine physikalisch relevante Observable sei, ist allerdings ein weit verbreiteter, nur an der nicht-relativistischen Quantenmechanik genährter Irrglaube.

Wenn wir für die Zeittranslationen  $U_t$  und einen festen Vektor  $\Psi$  setzen:  $\Psi_t = U_t \Psi$ ,



folgt mit der Gruppeneigenschaft:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_t = i\hbar \frac{\partial}{\partial \varepsilon} U_\varepsilon U_t \Psi = H U_t \Psi = H \Psi_t . \quad (5.12)$$

Dies ist genau die allgemeine Form (1.23) der Schrödingergleichung. Wir sehen also, dass diese Form nur die fast triviale Information enthält, dass die Zeittranslation eine Symmetrie der Quantentheorie ist. Wie man den Hamiltonoperator  $H$  zu wählen hat: Darin steckt allerdings eine nicht-triviale physikalische Aussage.

Als wichtiges Beispiel für Erzeuger betrachten wir die eindimensionalen Untergruppen der Drehgruppe, also die Drehungen um eine feste Achse. Aus der in Abschnitt 5.1 angegebenen Darstellung  $(U_R^{(3)} \Psi)(x) = \Psi(R^{-1}x)$  der Drehgruppe und

$$R(t) = \begin{pmatrix} \cos t & -\sin t & 0 \\ \sin t & \cos t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

für die Drehungen um die 3-Achse um den Winkel  $t$  bekommen wir den Erzeuger

$$L_3 = Q_1 P_2 - Q_2 P_1 , \quad (5.13)$$

also die dritte Komponente der schon in Abschnitt 1.6 per Korrespondenz geratenen Drehimpulsoperatoren. Die anderen beiden Komponenten (entstehend aus der obigen Formel durch zyklische Vertauschung) erzeugen entsprechend die Drehungen um die weiteren Achsen, wobei die Konvention über zyklische Vertauschungen genau für die Einhaltung des Drehsinnes sorgt. Die drei Operatoren fasst man auch zum Vektoroperator  $\vec{L} = \vec{Q} \times \vec{P}$  zusammen. Im Gegensatz zu den Komponenten von  $\vec{Q}$  oder  $\vec{P}$  vertauschen aber die Komponenten des Drehimpulses nicht miteinander. Statt dessen bekommen wir aus den kanonischen Vertauschungsrelationen für  $P_j, Q_j$ :

$$\frac{i}{\hbar} [L_1, L_2] = -L_3 \quad \text{und zyklisch} , \quad (5.14)$$

oder, in einer nützlichen Kurzfassung  $\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L}$ . (Bei nicht vertauschenden Komponenten kann also auch mal das Kreuzprodukt eines Vektors mit sich selbst ungleich Null sein).

Wir haben hier die Drehimpuls-Vertauschungsrelationen einfach aus der konkreten Darstellung  $U_R^{(3)}$  gewonnen. Ihre Bedeutung ist aber viel allgemeiner, was wir bei der Diskussion des Spins wieder aufnehmen werden: Sie sind einfach die infinitesimale Beschreibung der Drehgruppe selbst. Allgemeiner sind Kommutatoren von Erzeugern wieder Erzeuger, und die entsprechenden Vertauschungsrelationen sind charakteristisch für die betrachtete Gruppe. Seien  $t \mapsto g(t)$  und  $s \mapsto h(s)$  einparametrische Untergruppen einer Gruppe. (Das heißt, die  $g(t)$  sind Gruppenelemente mit  $g(t_1) \circ g(t_2) = g(t_1 + t_2)$ ). Eine unitäre Darstellung der Gruppe liefert also einparametrische unitäre Gruppen

$$U_{g(t)} = \exp\left(\frac{-it}{\hbar} G\right) \quad \text{und} \quad U_{h(s)} = \exp\left(\frac{-is}{\hbar} H\right) . \quad (5.15)$$

Wir betrachten nun in der Gruppe den “multiplikativen Kommutator”  $\gamma(t, s) = g(t) \circ h(s) \circ g(-t) \circ h(-s)$  für kleine Werte der Parameter  $t$  und  $s$ . Er wird dargestellt durch

$$\begin{aligned}
 U_{\gamma(t,s)} &= U_{g(t)} U_{h(s)} U_{g(-t)} U_{h(-s)} \\
 &\approx \left( \mathbb{1} - \frac{it}{\hbar} G - \frac{t^2}{2\hbar^2} G^2 + \dots \right) \left( \mathbb{1} - \frac{is}{\hbar} H - \frac{s^2}{2\hbar^2} H^2 + \dots \right) \times \\
 &\quad \times \left( \mathbb{1} + \frac{it}{\hbar} G - \frac{t^2}{2\hbar^2} G^2 + \dots \right) \left( \mathbb{1} + \frac{is}{\hbar} H - \frac{s^2}{2\hbar^2} H^2 + \dots \right) \\
 &\approx \left( \mathbb{1} - \frac{its}{\hbar} \frac{i}{\hbar} [G, H] + \dots \right) \\
 &\approx \exp\left(-\frac{its}{\hbar} K\right), \tag{5.16}
 \end{aligned}$$

mit  $K = \frac{i}{\hbar} [G, H]$ . Dabei steht “...” jeweils für Terme höherer als zweiter Ordnung in  $t$  oder  $s$ . Für kleine  $t$  und  $s$  ist also  $\gamma(t, s) \approx k(ts)$  für eine weitere einparametrische Untergruppe  $k$ . Wenn  $g(t)$  und  $h(s)$  vertauschen würden, wäre natürlich  $k(r)$  für alle  $r$  die Identität, und  $[G, H] = 0$ . Also “misst” die Untergruppe  $k$ , wie schlecht sich das kleine Viereck  $\gamma(t, s)$  in der Gruppe schließt.

Ein instruktives Beispiel für die Bildung eines solchen Kommutators, das ich zuerst bei E. Nelson gesehen habe, ist die “Autofahrergruppe”, deren Elemente die Veränderung des Ortes und der Ausrichtung eines Autos beschreiben. Es gibt zwei wichtige Untergruppen, nämlich  $g$  = “Fahren mit rechts eingeschlagenem Lenkrad” und  $h$  = “Fahren mit links eingeschlagenem Lenkrad”, wobei der Parameter die Fahrstrecke ist und negative Parameter “rückwärts fahren” bedeuten. Das kleine Viereck  $\gamma(t, s)$  beschreibt genau das, was jemand tut, der aus einer engen Parklücke heraus möchte. Sehr kleine Parameter  $t, s$  braucht man für enge Parklücken. Die Untergruppe  $k$  ist das Ziel der Aktion: seitwärts fahren. [►Bild]

Entsprechend macht man sich durch Drehen irgendwelcher Körper (am besten Quader um körperfeste Achsen) klar, dass der Kommutator von “Drehung um die 1-Achse” und “Drehung um die 2-Achse” in der Tat eine Drehung um die 3-Achse ist. Genau dies ist der tiefere geometrische Sinn der Drehimpuls-Vertauschungsrelationen.

### 5.3 Bahndrehimpuls

Da die drei Drehimpuls-Operatoren nicht miteinander vertauschen, ist es offenbar unmöglich, sie gemeinsam zu diagonalisieren. Alle drei vertauschen mit dem Operator

$$\vec{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2, \tag{5.17}$$

dem Quadrat des Drehimpulsvektors. Natürlich folgt diese Aussage aus den Vertauschungsrelationen (5.14). Noch direkter sieht man dies daran, dass  $\vec{P}, \vec{Q}$  und daher  $\vec{L}$  **Vektoroperatoren** sind. Das bedeutet (zum Beispiel geschrieben für  $\vec{L}$ ):  $U_R L_\mu U_R^* =$

$\sum_\nu R_{\nu,\mu} L_\nu$ , das heißt, unitäre Drehungen bilden die drei (operatorwertigen) Komponenten von  $\vec{L}$  wieder in eine Linearkombination der gleichen Operatoren ab, und zwar in die gleiche wie für einen gewöhnlichen Vektor. Insbesondere vertauschen also  $\vec{L}^2$  und  $L_3$ , und es ist üblich diese beiden zusammen zu diagonalisieren. Statt  $L_3$  wäre jede andere Linearkombination der drei Erzeuger, also der Erzeuger der Drehungen um jede beliebige Achse, gleich gut.

In vielen Büchern wird diese Aufgabe in Polarkoordinaten ausgeführt und führt als gemeinsame Eigenfunktionen auf die sogenannten Kugelflächenfunktionen  $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ . Hier beschreiben wir kurz einen anderen Zugang, der die Definition der Drehimpulsoperatoren in kartesischen Koordinaten benutzt, und daher mehr von der Drehsymmetrie des Problems bewahrt. Drehungen in Polarkoordinaten (außer um die Polarachse) sind nun mal scheußlich.

Wir beginnen mit der Beobachtung, dass alle  $L_\mu$  mit  $\vec{Q}^2$  vertauschen, und also auch mit Funktionen davon. Daher ist, für eine beliebige Funktion  $\Psi_0$ , die nur von  $|\vec{x}|$  abhängt:

$$L_3(x_1^{n_1} x_2^{n_2} x_3^{n_3} \Psi_0) = \frac{\hbar}{i} (n_2 x_1^{n_1+1} x_2^{n_2-1} x_3^{n_3} - n_1 x_1^{n_1-1} x_2^{n_2+1} x_3^{n_3}) \Psi_0. \quad (5.18)$$

Der Gesamtgrad  $n_1 + n_2 + n_3$  des Polynoms vor  $\Psi_0$  bleibt also bei Anwendung von  $L_\mu$  ( $\mu = 1, 2, 3$ ) erhalten, das heißt die Räume

$$\widetilde{\mathcal{H}}_\ell = \text{lin} \left\{ x_1^{n_1} x_2^{n_2} x_3^{n_3} \Psi_0 \mid n_1 + n_2 + n_3 = \ell; \Psi_0 = \Psi_0(|x|) \right\} \quad (5.19)$$

sind invariant unter den  $L_\mu$ . (Hier bedeutet “lin” die lineare Hülle, also die Menge aller Linearkombinationen von Vektoren aus der angegebenen Menge; “Invarianz” eines Unterraums  $\mathcal{K} \subset \mathcal{H}$  unter einem Operator  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  bedeutet allgemein, dass aus  $\Psi \in \mathcal{K}$  auch  $A\Psi \in \mathcal{K}$  folgt). Die Räume  $\widetilde{\mathcal{H}}_\ell$  sind nicht alle disjunkt: Wegen

$$x_1^{n_1} x_2^{n_2} x_3^{n_3} \Psi_0 = (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) x_1^{n_1-2} x_2^{n_2} x_3^{n_3} \frac{\Psi_0}{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)} \quad (5.20)$$

gilt  $\widetilde{\mathcal{H}}_\ell \subset \widetilde{\mathcal{H}}_{\ell+2}$ . Wenn wir uns also bei jedem  $\ell$  jeweils nur für die neu hinzukommenden Funktionen interessieren, müssen wir jeweils das Orthogonalkomplement von  $\widetilde{\mathcal{H}}_{\ell-2}$  in  $\widetilde{\mathcal{H}}_\ell$  betrachten, also

$$\mathcal{H}_\ell = \left\{ \Psi \in \widetilde{\mathcal{H}}_\ell \mid \Psi \perp \widetilde{\mathcal{H}}_{\ell-2} \right\}. \quad (5.21)$$

Auch diese Räume sind wiederum invariant unter allen  $L_\mu$ . Sie stellen sich gerade als die Eigenräume von  $\vec{L}^2$  heraus: Mit  $\Psi = x_1^{n_1} x_2^{n_2} x_3^{n_3} \Psi_0$  und  $n_1 + n_2 + n_3 = \ell$  bekommen wir

$$L_3^2 \Psi = \hbar^2 \Psi \left\{ 2n_1 n_2 + n_1 + n_2 - \frac{n_2(n_2-1)}{x_2^2} x_1^2 - \frac{n_1(n_1-1)}{x_1^2} x_2^2 \right\} \quad (5.22)$$

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 \Psi &= \hbar^2 \Psi \left\{ 2n_1 n_2 + 2n_2 n_3 + 2n_3 n_1 + 2(n_1 + n_2 + n_3) \right. \\ &\quad \left. + n_1(n_1-1) + n_2(n_2-1) + n_3(n_3-1) \right\} \end{aligned} \quad (5.23)$$

$$\begin{aligned}
& -\hbar^2 r^2 \Psi \left\{ \frac{n_1(n_1-1)}{x_1^2} + \frac{n_2(n_2-1)}{x_2^2} + \frac{n_3(n_3-1)}{x_3^2} \right\} \\
& = \hbar^2 \ell(\ell+1) \Psi + \Psi^\perp \quad \text{mit } \Psi^\perp \in \widetilde{\mathcal{H}}_{\ell-2}, \quad (5.24)
\end{aligned}$$

wobei wir bei der Zusammenfassung der Terme die Identität  $(x_1^2 + x_2^2) = (r^2 - x_3^2)$  benutzt haben. Der Term mit Division durch  $x_1^2$  taucht wegen des Faktors  $n_1(n_1-1)$  in  $\Psi^\perp$  übrigens nur auf, wenn  $n_1 \geq 2$ , also wenn  $x_1^{-2}\Psi$  immer noch von der Form “Polynom  $\cdot \Psi_0$ ” ist. Der Term  $\Psi^\perp$  war zu erwarten, da ja die ursprüngliche Funktion  $\Psi$  ebenfalls eine Komponente in  $\widetilde{\mathcal{H}}_{\ell-2}$  haben könnte. Wenn wir allerdings eine Linearkombination senkrecht zu  $\widetilde{\mathcal{H}}_{\ell-2}$  für  $\Psi$  einsetzen, muss die entsprechende Linearkombination der  $\Psi^\perp$ -Terme wegen der Invarianz von  $\mathcal{H}_\ell$  automatisch verschwinden. Also bekommen wir

$$\vec{L}^2 \Psi = \hbar^2 \ell(\ell+1) \Psi \quad \text{für } \Psi \in \mathcal{H}_\ell. \quad (5.25)$$

Damit haben wir also die Eigenwerte und Eigenräume von  $\vec{L}^2$  bestimmt.

Für die Bestimmung der Eigenwerte von  $L_3$  ist es sinnvoll, statt  $x_1, x_2, x_3$  die drei Kombinationen  $x_+ = x_1 + ix_2, x_- = x_1 - ix_2$  und  $x_3$  als Variable zu benutzen. Denn man rechnet leicht nach, dass

$$L_3(x_\pm^m x_3^n \Psi_0) = \pm \hbar m x_\pm^m x_3^n \Psi_0. \quad (5.26)$$

Funktionen der hier angegebenen Form, die also entweder einen Faktor  $x_+^m$  oder einen Faktor  $x_-^m$  enthalten, aber nicht beide, reichen wegen  $x_+ x_- = (x_1^2 + x_2^2) = (r^2 - x_3^2)$  als Basispolynome aus, wenn wir  $r$ -abhängige Koeffizienten zulassen. Damit ist klar, dass die Funktionen  $x_\pm^m P(x_3) \Psi_0$ , mit  $\Psi_0 = \Psi_0(r)$  und  $P$  ein Polynom, die Eigenfunktionen von  $L_3$  sind. Da von einem Polynom der Form  $x_\pm^m P(x_3)$  kein Faktor  $r^2$  mehr abzuspalten ist (die eindeutige Faktorisierbarkeit von Polynomen in kleinstmögliche Faktoren gilt auch für Polynome in mehreren Variablen), ist auch klar, dass eine solche Eigenfunktion zu  $\widetilde{\mathcal{H}}_m$  gehört, also gilt für gemeinsame Eigenfunktionen von  $L_3$  und  $\vec{L}^2$ :  $|m| \leq \ell$ .

Zur genaueren Bestimmung der Eigenfunktionen verwenden wir die Orthogonalität der Eigenfunktionen zu festem  $m$  mit verschiedenen  $\ell \geq m$ . Dazu ist es zweckmäßig, zunächst die Abhängigkeit von der Radialkoordinate loszuwerden. Wir schreiben also Wellenfunktionen als Funktionen der Variablen  $r = |\vec{x}|$  und  $\vec{u} = \vec{x}/r$ . Bei Bedarf parametrisieren wir die Einheitsvektoren weiter durch die Winkel  $\theta, \varphi$  des Polarkoordinatensystems. Analog zu  $x_\pm$  führen wir auch  $u_\pm = u_1 \pm iu_2$  ein:

$$u_1 = \sin \theta \cos \varphi \quad u_2 = \sin \theta \sin \varphi \quad (5.27)$$

$$u_3 = \cos \theta \quad u_\pm = \sin \theta e^{\pm i\varphi}. \quad (5.28)$$

Integrale über die Kugeloberfläche (das heißt, die Menge der Einheitsvektoren  $\vec{u}$ ) sind auszuführen bezüglich des “Raumwinkelements”  $d\vec{u} = \sin \theta d\theta d\varphi$ . Die Räume  $\mathcal{H}_\ell$  haben nun eine Entsprechung in Räumen  $\mathcal{H}_\ell^\circ$  von Funktionen auf der Kugel:  $\widetilde{\mathcal{H}}_\ell^\circ$  besteht aus allen Polynomen in  $(u_1, u_2, u_3)$  vom Gesamtgrad  $\ell$ , und  $\mathcal{H}_\ell^\circ$  ist das Orthogonalkomplement (bezüglich des Maßes  $d\vec{u}$ ) von  $\widetilde{\mathcal{H}}_{\ell-2}^\circ$  in  $\widetilde{\mathcal{H}}_\ell^\circ$ . Die alten Räume  $\mathcal{H}_\ell$  bekommen wir zurück als die Menge der Linearkombinationen von Elementen aus  $\mathcal{H}_\ell^\circ$  mit  $r$ -abhängigen

Koeffizienten, sofern sie sich als quadratintegrabel herausstellen. (In der Notation von Abschnitt 5.1:  $\mathcal{H}_\ell = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}_+, r^2 dr) \otimes \mathcal{H}_\ell^\circ$ ). Die Drehimpulsoperatoren  $L_3$  können wir auch als Operatoren auf den Räumen  $\mathcal{H}_\ell^\circ$  auffassen, indem wir in (5.18)  $x$  durch  $u$  ersetzen, und den Faktor  $\Psi_0$  weglassen.

Die Räume  $\mathcal{H}_\ell^\circ$  sind nun endlich dimensional. Die Dimension von  $\widetilde{\mathcal{H}}_\ell^\circ$  bekommt man durch Abzählen der erlaubten Monome  $u_1^{n_1} u_2^{n_2} u_3^{n_3}$ , also als Anzahl der Tupel  $(n_1, n_2, n_3)$  mit  $n_1 + n_2 + n_3 = \ell$ : Es ist  $\dim \widetilde{\mathcal{H}}_\ell^\circ = \frac{1}{2}(\ell+1)(\ell+2)$ . Damit ist  $\dim \mathcal{H}_\ell^\circ = \dim(\widetilde{\mathcal{H}}_\ell^\circ) - \dim(\widetilde{\mathcal{H}}_{\ell-2}^\circ) = (2\ell+1)$ . Das deckt sich mit der Anzahl der erlaubten Eigenwerte  $\hbar m$  von  $L_3$ , für die wir ja die Bedingung  $|m| \leq \ell$  gefunden hatten.

Die gesuchten Eigenfunktionen von  $L_3$  sind nach (5.26) von der Form  $\Psi(\vec{u}) = u_\pm^m P(u_3)$ , wobei  $P$  ein Polynom ist. Wir erwarten für jedes  $\ell \geq |m|$  ein solches Polynom, und zwar ein Polynom vom Grade  $\ell - |m|$ , da ja die Funktion  $\Psi$  ein Polynom in  $(u_1, u_2, u_3)$  vom Grad  $\leq \ell$  sein muss. Sei  $\tilde{P}_\ell^m$  das gesuchte Polynom. Dann muss die Orthogonalitätsrelation

$$\delta_{\ell\ell'} = \int d\vec{u} \overline{u_\pm^m \tilde{P}_\ell^m(u_3)} u_\pm^m \tilde{P}_{\ell'}^m(u_3) \quad (5.29)$$

$$= \int d\vec{u} (1 - u_3^2)^{|m|} \overline{\tilde{P}_\ell^m(u_3)} \tilde{P}_{\ell'}^m(u_3) \quad (5.30)$$

$$= \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi (1 - \cos^2 \theta)^{|m|} \overline{\tilde{P}_\ell^m(\cos \theta)} \tilde{P}_{\ell'}^m(\cos \theta) \quad (5.31)$$

$$= 2\pi \int_{-1}^{+1} d\tau (1 - \tau^2)^{|m|} \overline{\tilde{P}_\ell^m(\tau)} \tilde{P}_{\ell'}^m(\tau) \quad (5.32)$$

gelten. (Dabei wurde die Identität  $|u_+|^2 = |u_-|^2 = (1 - u_3^2)$  benutzt und  $\tau = u_3 = \cos \theta$  substituiert). Wir suchen also genau die Orthogonalpolynome auf dem Intervall  $[-1, 1]$  mit Gewicht  $(1 - \tau^2)^{|m|}$ . Für  $m = 0$  sind das genau die Legendre-Polynome. Für andere Werte von  $m$  sind dies assoziierte Legendre-Polynome. Aus irgend einem Grund ist es üblich, den halben Gewichtungsfaktor dem Polynom zuzuschlagen. In Formelsammlungen findet man also  $P_\ell^m(\tau) = C \cdot (1 - \tau^2)^{|m|/2} \tilde{P}_\ell^m(\tau)$ , wobei  $C$  noch ein geeigneter Normierungsfaktor ist. Damit werden die gemeinsamen Eigenfunktionen von  $\vec{L}^2$  und  $L_3$ :

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_\ell^m(\tau) e^{im\varphi} . \quad (5.33)$$

Soweit der übliche Ausdruck. Merken sollte man sich aber, dass diese **Kugelflächenfunktionen** einfach Polynome in den  $u_\mu$  sind. Bis auf Faktoren also zum Beispiel:

$$\begin{array}{lll} Y_{00} \sim 1 & Y_{10} \sim u_3 & Y_{1,\pm 1} \sim (u_1 \pm iu_2) \\ Y_{2,\pm 2} \sim (u_1 \pm iu_2)^2 & Y_{2,\pm 1} \sim (u_1 \pm iu_2)u_3 & Y_{20} \sim (3u_3^2 - 1) . \end{array}$$

## 5.4 Spin

Im letzten Abschnitt sind wir von einer konkreten Darstellung der Drehgruppe und damit der Drehimpulse ausgegangen, und haben den Hilbertraum für ein dreidimensionales Teilchen nach den Eigenwerten von  $\vec{L}^2$  und  $L_3$  zerlegt. Es stellt sich heraus, dass wir damit noch nicht alle Möglichkeiten erschöpft haben wie Drehsymmetrie in der Quantenmechanik realisiert sein kann. Deswegen rollen wir die Theorie noch einmal auf, und benutzen nur die Vertauschungsrelationen, also die Struktur der Drehgruppe:

$$\frac{i}{\hbar} [L_1, L_2] = -L_3 \quad \text{und zyklisch .} \quad (5.34)$$

Eine der Darstellungen, die im Bahndrehimpuls nicht vorkommen, haben wir schon kennengelernt: Wir nehmen die Pauli-Matrizen  $\sigma_\mu$ , und setzen  $L_\mu = \frac{\hbar}{2}\sigma_\mu$ . Wegen  $\sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3 = -\sigma_2\sigma_1$  sind dann die Drehimpuls-Vertauschungsrelationen erfüllt. Weiter ist

$$\vec{L}^2 = \frac{\hbar^2}{4}(\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2) = \frac{3\hbar^2}{4}\mathbb{1} = \hbar^2 \left(\frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} + 1\right) \mathbb{1} . \quad (5.35)$$

Dies passt zur Formel (5.25) mit  $\ell = 1/2$ , ebenso wie die Dimension  $2 = 2\frac{1}{2} + 1 = 2\ell + 1$  und die Eigenwerte  $\pm\hbar/2$  von  $L_3$ . Wir haben also hier einen Satz von Drehimpulsoperatoren mit  $\ell = 1/2$ . Warum ist uns diese Darstellung bisher entgangen? Dafür gibt es eine einfache Antwort: Wenn wir in dieser Darstellung eine Drehung um  $2\pi$  um die 3-Achse, erhalten wir

$$U_{2\pi} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}2\pi L_3\right) = \exp(-i\pi\sigma_3) = -\mathbb{1} . \quad (5.36)$$

Das gleiche Ergebnis bekommen wir um jede andere Achse. Natürlich ist eine Drehung um  $2\pi$  einfach das gleiche wie gar keine Drehung, aber auch das passt zu (5.36), denn der Operator  $-\mathbb{1}$  stellt ja die identische Transformation dar. Bei den Darstellungen des Bahndrehimpulses konnte das aber nicht vorkommen, denn hier ging ja die Drehmatrix  $R$  direkt in die Transformation  $\Psi(x) \mapsto \Psi(R^{-1}x)$  ein. Wir haben es also bei der Darstellung durch Pauli-Matrizen mit einer projektiven Darstellung der Drehgruppe zu tun.

Betrachten wir also irgendeinen Satz von Operatoren  $L_1, L_2, L_3$ , die die Vertauschungsrelationen erfüllen. Wir werden dabei voraussetzen, dass die drei ein **irreduzibles** System von Operatoren bilden. Das bedeutet, dass nur Vielfache des Operators  $\mathbb{1}$  mit allen drei  $L_\mu$  vertauschen. Gleichbedeutend ist, dass es keinen echten Unterraum des Hilbertraums gibt, der unter allen drei Operatoren invariant ist. Später kann man dann eine allgemeine Realisierung der Relationen so analysieren, dass man zunächst den Raum so fein wie möglich in invariante Unterräume zerlegt. Auf diesen gilt dann die Voraussetzung der Irreduzibilität. Eine ganz ähnliche Strategie haben wir auch bei der Analyse des Bahndrehimpulses verfolgt.

Die Irreduzibilität hat zunächst die Konsequenz, dass der Operator  $\vec{L}^2$ , der ja schon allein auf Grund der Relationen mit den drei  $L_\mu$  vertauscht, ein Vielfaches von  $\mathbb{1}$  sein

muss, sagen wir  $\vec{L}^2 = \hbar^2 \lambda \mathbb{1}$ . Wir suchen als nächstes Eigenwerte und Eigenvektoren zu  $L_3$ . Dazu ist es zweckmäßig, die Operatoren

$$L_+ = L_1 + iL_2 \quad \text{und} \quad L_- = L_1^* = L_1 - iL_2 \quad (5.37)$$

mit den Vertauschungsrelationen

$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_3 \quad \text{und} \quad [L_3, L_\pm] = \pm \hbar L_\pm \quad (5.38)$$

einzuführen. So, wie beim harmonischen Oszillator die Eigenvektoren von  $H$  durch Iteration eines Leiteroperators aus dem Grundzustand erzeugt werden konnten, dienen hier die Operatoren  $L_\pm$  als Leiteroperatoren.

Aus jedem Eigenvektor  $L_3 \varphi_m = \hbar m \varphi$  bekommen wir mit  $L_3(L_\pm \varphi_m) = \hbar(m \pm 1)(L_\pm \varphi_m)$  Eigenvektoren mit um 1 erhöhtem/erniedrigtem  $m$ . Dieser Prozess muss abbrechen, denn es ist ja  $L_3^2 \leq \vec{L}^2$  und also  $m^2 \leq \lambda^2$ . Betrachten wir also die Norm der Vektoren  $L_\pm \varphi$ . Dazu brauchen wir

$$L_\mp L_\pm = L_1^2 + L_2^2 \pm i[L_1, L_2] = \vec{L}^2 - L_3^2 \mp \hbar L_3 \quad (5.39)$$

und also

$$\|L_\pm \varphi_m\|^2 = \hbar^2(\lambda - m^2 \mp m) \|\varphi_m\|^2. \quad (5.40)$$

Die oberste Stufe der Leiter ist für ein  $m = m_+$  erreicht, für das  $\|L_+ \varphi_{m_+}\|^2 = 0$  gilt, die unterste für ein  $m_-$ . Wir haben also

$$\lambda = m_+(m_+ + 1) = m_-(m_- - 1) \quad (5.41)$$

Die Differenz dieser Ausdrücke ist  $(m_+ - m_- + 1)(m_+ + m_-)$ . Dabei ist der erste Faktor 1+ die Anzahl der Leiterschritte, also strikt positiv, sodass wir auf  $m_- = -m_+$  schließen. Nennen wir wieder den größten Eigenwert  $m_+ = \ell$ , dann ist  $2\ell = m_+ - m_- \in \mathbb{N}$ , also  $\ell$  selbst entweder ganzzahlig oder "halbzahlig". Ferner ist  $\lambda = \ell(\ell + 1)$  und die Eigenwerte von  $L_3$  sind  $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$ .

Betrachten wir nun den Raum der Vektoren  $\varphi$  mit  $L_+ \varphi = 0$ . Wenn dieser Raum zweidimensional wäre, also orthogonale  $\varphi_1, \varphi_2$  enthielte, wären auch die darauf aufgebauten Leitern  $L_-^{k_1} \varphi_1$  und  $L_-^{k_2} \varphi_2$  orthogonal. Für  $k_1 \neq k_2$  folgt dies ohnehin, weil dies Eigenvektoren zu  $L_3$  mit verschiedenen Eigenwerten wären. Für  $k_1 = k_2$  sieht man das durch Induktion aus

$$\begin{aligned} \langle L_-^{k+1} \varphi_1 | L_-^{k+1} \varphi_2 \rangle &= \langle L_-^k \varphi_1 | \vec{L}^2 - L_3^2 + L_3 | L_-^k \varphi_2 \rangle \\ &= \hbar^2(\ell(\ell + 1) - (\ell - k)(\ell - k - 1)) \langle L_-^k \varphi_1 | L_-^k \varphi_2 \rangle \end{aligned}$$

Damit hätten wir zwei invariante orthogonale Teilräume, im Widerspruch zur Irreduzibilität. Der Eigenraum zu  $L_+ = 0$  ist also eindimensional, und die Darstellung hat genau Dimension  $2\ell + 1$ . Es ist üblich die Basisvektoren dieser Darstellung als  $|\ell, m\rangle$  zu schreiben. Mit der entsprechenden Normierung bekommen wir also für

$m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$ :

$$\begin{aligned}
 L_3|\ell, m\rangle &= \hbar m|\ell, m\rangle \\
 L_+|\ell, m\rangle &= \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)}|\ell, m+1\rangle \\
 L_-|\ell, m\rangle &= \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)}|\ell, m-1\rangle \\
 \vec{L}^2|\ell, m\rangle &= \hbar^2\ell(\ell+1)|\ell, m\rangle.
 \end{aligned}
 \tag{5.42}$$

Die Lösungen mit ganzzahligem  $\ell$  hatten wir alle schon in anderer Einkleidung beim Bahndrehimpuls gefunden. Alle Lösungen mit halbzahligem  $\ell$ , also  $2\ell$  eine ungerade ganze Zahl, haben auch halbzahlige  $m$ , und damit  $U_{2\pi} = \exp(2\pi i L_3/\hbar) = -\mathbb{1}$ .

Dass eine “Drehung um  $2\pi$ ” tatsächlich etwas anderes sein kann als “keine Drehung” zeigt sich nicht nur in der Quantenmechanik, sondern auch bei geometrischen Aufgaben, bei denen es nicht nur auf die Lage eines Körpers ankommt, sondern auch auf eine gewisse “Verdrillung” gegenüber der Umgebung. Der Umstand in der Struktur der Drehgruppe, der solche zusätzliche Unterscheidungen ermöglicht, ist, dass sie *nicht* “einfach zusammenhängend” ist: Eine volle Drehung um eine Achse, aufgefasst als ein “Drehprozess” an einem Körper, lässt sich — im Gegensatz zu einer Drehung um  $4\pi$  nicht stetig in “gar keine Drehung” überführen. Für nicht einfach zusammenhängende Gruppen lässt sich durch eine allgemeine Konstruktion eine weitere Gruppe (“universelle Überlagerungsgruppe” [12.1.1]) angeben, die zwar in der Nähe der Eins das gleiche Multiplikationsgesetz hat (und also die gleichen Vertauschungsrelationen für die Erzeuger), in der aber außerdem noch nicht-äquivalente Wege zu einem gegebenen Gruppenelement unterschieden werden. Für die Drehgruppe bekommt man so genau wieder die einfach zusammenhängende Gruppe  $SU(2)$ .

Obwohl die Phase  $-1$  für eine  $2\pi$ -Drehung physikalisch irrelevant sein sollte, kann man sie sichtbar machen, wenn man verschiedene Teile eines Systems um verschiedene Winkel drehen kann. In einem berühmten Neutronen-Interferenz-Experiment wird ein Strahl geteilt, und die Neutronen in einem Strahl durch Anlegen eines Magnetfeldes “um  $2\pi$  gedreht”. Neutronen haben Spin  $1/2$ . Deshalb ist der Gesamtdrehimpuls (Spin+Bahndrehimpuls) auf jeden Fall halbzahlig, also  $U_{2\pi} = -\mathbb{1}$ . Deshalb bekommt man beim Zusammenführen der Strahlen destruktive, nicht konstruktive Interferenz.

## 5.5 Zentralpotentiale

Betrachten wir nun einen Hamiltonoperator  $H = P^2/(2m) + V(Q)$  für ein Teilchen in drei Dimensionen mit einem Potential  $V$ , das nur vom Betrag des Ortsvektors abhängt. Wir bezeichnen diese Funktion wieder mit  $V$ , sodass  $V(x_1, x_2, x_3) = V(\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2})$ . Aus der klassischen Hamiltonschen Mechanik weiß man, wie man diese Symmetrie und die damit verbundene Drehimpulserhaltung ausnutzen kann: Wir schreiben die Energie



in Kugelkoordinaten als

$$H_{\text{klass}} = \frac{1}{2m} \left( p_r^2 + \frac{\vec{L}^2}{r^2} \right) + V(r) , \quad (5.43)$$

wobei im Drehimpulsquadrat die zu den Winkeln  $\vartheta$  und  $\varphi$  und die dazu konjugierten Impulse stecken. Offenbar ist  $\vec{L}$  eine Erhaltungsgröße, und bei bekanntem Wert  $\ell^2$  für  $\vec{L}^2$  bleibt ein eindimensionales Problem für die Radialkoordinate im effektiven Potential  $V_{\text{eff}}(r) = \ell^2/(2mr^2) + V(r)$  übrig. Unser Ziel ist es, genau eine solche Reduktion auch für die Quantenmechanik zu erreichen.

Die Idee funktioniert natürlich in jeder Dimension  $d$ , wobei wir uns hauptsächlich für  $d = 2, 3$  interessieren. Für die kinetische Energie in  $d$  Dimensionen bekommen wir dann

$$\frac{1}{2m} \sum_{\alpha} P_{\alpha}^2 = \frac{-\hbar^2}{2m} \left( \partial_r^2 + \frac{d-1}{r} \partial_r \right) + \frac{L^2}{2mr^2} . \quad (5.44)$$

Dabei haben wir die Radialableitung  $\partial_r = \sum_{\alpha} \frac{x_{\alpha}}{r} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}$  benutzt und die Drehimpuls-Operatoren  $L_{\alpha\beta} = Q_{\alpha}P_{\beta} - Q_{\beta}P_{\alpha}$  mit  $L^2 = \sum_{\alpha < \beta} L_{\alpha\beta}^2$ . In drei Dimensionen ist  $L_{12} = L_3$  und zyklisch, und diese Definition des Drehimpulsquadrats stimmt mit unserer früheren überein. Die  $L_{\alpha\beta}$  sind ja Richtungsableitungen nach einem Drehwinkel in der  $\alpha$ - $\beta$ -Ebene, können also als Ableitungen nach irgendwelchen Winkelkoordinaten gedeutet werden. Der Vorteil der hier gegebenen Zerlegung ist, dass wir uns bei der Wahl der Winkelkoordinaten nicht festlegen müssen. Wir fassen sie einfach symbolisch in einer Größe  $u \in \Omega_d$ , der Einheitssphäre in  $d$  Dimensionen, zusammen. Für Integrale über diesen Winkelanteil schreiben wir  $\int du \dots$  und  $|\Omega_d|$  bezeichnet das  $(d-1)$ -dimensionale Volumen der Sphäre. (Also  $|\Omega_3| = 4\pi$ ). Da wir ja gemeinsame Eigenfunktionen von  $H$  und  $L^2$  suchen können wir  $L^2$  einfach durch den entsprechenden Eigenwert ersetzen. Das entspricht einem Separationsansatz  $\Psi(x) = \Phi(r)Y(u)$ , wobei  $Y$  eine Eigenfunktion von  $L^2$  ist. So behalten wir eine eindimensionale Schrödingergleichung für  $\Phi(r)$ . Merkwürdig an dem Operator (5.44) könnte die erste Ableitung nach  $r$  erscheinen: Sie trägt keinen Faktor  $i$ , was wir bei einem hermiteschen Operator erwarten. Dennoch ist der Operator natürlich hermitesch, insbesondere auch auf Funktionen, die nur von  $r$  abhängen. Dafür muss man bedenken, dass das Skalarprodukt noch das Volumenelement enthält:  $\|\Psi\|^2 = |\Omega_d| \int_0^{\infty} r^{d-1} dr |\Phi(r)|^2$ . Wir möchten daraus wieder das Standard-Skalarprodukt ohne Gewichtsfunktion  $r^{d-1}$  machen, denn nur so können wir von einem "äquivalenten eindimensionalen Problem" sprechen, auf das wir alle in Kapitel 4 gewonnenen Erkenntnisse anwenden können. Dafür gibt es einen allgemeinen Trick, nämlich jeweils den halben Gewichtsfaktor zur Wellenfunktion zu schlagen. Wir machen unseren Separationsansatz also eher als  $\Psi(x) = r^{-(d-1)/2} \Phi(r)Y(u)$  und erwarten, dass dann für dieses  $\Phi$  die Schrödingergleichung wieder die übliche Form annimmt. Etwas feiner formuliert benutzen wir den unitären Operator  $\Psi \mapsto M\Psi = \Phi$

$$\begin{aligned} M : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d, dx) &\cong \mathcal{L}^2(\mathbb{R}_+ \times \Omega_d, r^{(d-1)} dr du) \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}_+ \times \Omega_d, dr du) \\ (M\Psi)(r, u) &= r^{-(d-1)/2} \Psi(r, u). \end{aligned} \quad (5.45)$$

Hierbei ist die erste Isomorphie wirklich nur die Umschreibung von kartesischen auf Kugelkoordinaten  $(r, u)$ . Der Hamiltonoperator wird in dieser Darstellung

$$MHM^{-1} = H_r = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{L^2}{2m r^2} + \frac{\hbar^2(d-1)(d-3)}{8m r^2} + V(r) . \quad (5.46)$$

Der merkwürdige dritte Term verschwindet freundlicherweise gerade in drei Dimensionen. Für  $d = 2$  ist er negativ [CRS<sup>+</sup>01]. Wegen des zweiten Terms, der “Zentrifugalbarriere” kann dies nur bei  $L\Psi = 0$  zum Tragen kommen, denn der nächste Eigenwert von  $L^2$  ist  $\hbar^2$ . Könnte man mit diesem attraktiven Potential, der “Antizentrifugalkraft”, einen gebundenen Zustand auch mit  $V = 0$  erzeugen? Wenn wir alles richtig gemacht haben, darf die Antwort nur “nein” sein, denn wir haben ja nur den Laplace-Operator umgeschrieben, der sicher keine gebundenen Zustände hat. Man sieht aber hier, dass wir noch nicht ganz fertig sind mit dem Umschreiben. Was fehlt ist gerade die Randbedingung bei  $r = 0$ . Wir haben ja schon in einer Dimension bei den Punktwechselwirkungen gesehen, dass die Änderung einer Randbedingung an einem Punkt eine echte Änderung des Operators darstellt. Das ist hier völlig analog. Nun folgt für  $d \leq 3$  aus  $\Psi \in \text{dom } \Delta$  auch  $\mathcal{F}\Psi \in \mathcal{L}^1$ , also  $\Psi$  stetig nach dem Riemann-Lebesgue Lemma ([Ü2.86] und [RS80, Thm. IX.28]). Daher gilt in Dimensionen 2 und 3 für  $\Phi = M\Psi = r^{(d-1)/2}\Psi$  die Randbedingung  $\Phi(0) = 0$ .

Für  $d \leq 3$  muss für den Radialoperator (5.46), sofern er die  $\ell = 0$ -Komponente des Laplaceoperators darstellen soll, die Dirichlet-Randbedingung  $\Phi(0) = 0$  verwendet werden.

Für  $d > 3$  oder höhere  $\ell$  ist die Frage nicht so entscheidend, weil die abstoßende Zentrifugalbarriere dafür sorgt, dass der Ursprung kaum erreicht werden kann, also sowieso  $\Phi(0) = 0$  gilt. (Technisch gesprochen: Der Operator ist schon wesentlich selbstadjungiert auf Funktionen die am Ursprung verschwinden). Damit ist es dann auch unmöglich, Punktpotentiale wie  $\delta$  einzuführen.

Setzen wir von nun an  $d = 3$ , und fixieren wir den Winkelanteil der Lösung als Eigenfunktion von  $\tilde{L}^2$  zum Eigenwert  $\hbar^2\ell(\ell + 1)$ . Wir suchen dann Funktionen  $\Phi$ , die für ein  $E < 0$  der Gleichung

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Phi''(r) + \frac{\hbar^2\ell(\ell + 1)}{2m r^2} \Phi(r) + (V(r) - E)\Phi(r) = 0 \quad (5.47)$$

mit Randbedingung  $\Phi(0) = 0$  genügen. Diese Gleichung hat bei  $r = 0$  ist eine sogenannte **reguläre Singularität**. Das Wort “regulär” in diesem wundersam widersprüchlichen Ausdruck zeigt, wie auch sonst in der Mathematik, den Fall an, den man im Griff hat. In diesem Fall ist die Methode der Wahl der auf Frobenius zurückgehender Ansatz  $\Phi(r) = r^s \Phi_s(r)$ , wobei  $s$  nicht unbedingt eine ganze Zahl ist und  $\Phi_s$  eine Potenzreihe mit nicht verschwindendem konstanten Term. Durch Vergleich der singularsten Terme, also der Ordnung  $r^{s-2}$  findet man als notwendige Bedingung die “Index-Gleichung”, in unserem Fall  $s(s-1) = \ell(\ell+1)$  mit den Lösungen  $s_1 = \ell + 1$  und  $s_2 = -\ell \leq 0$ . Man setzt nun den Potenzreihenansatz ein und bekommt durch Koeffizientenvergleich ein

Gleichungssystem für die Koeffizienten. Dieses wird allerdings singular für den kleineren der Indizes  $s_2 \leq s_1$ , wenn die beiden sich um eine ganze Zahl unterscheiden (wie in unserem Fall). Dennoch bekommt man auch hier eine zweidimensionale Schar von Lösungen, und zwar in der Form

$$\Phi = Ar^{s_1}\Phi_{s_1}(r) + B\left(r^{s_1}\Phi_{s_1}(r) \log r + r^{s_2}\Phi_{s_2}(r)\right) \quad (5.48)$$

mit  $A, B \in \mathbb{C}$  beliebig. Die logarithmische Korrektur sorgt dann dafür, dass nun die Rekursion für die Koeffizienten der Potenzreihe für  $\Phi_{s_2}$  lösbar wird. Lösungen dieser Form werden auch genau gebraucht, wenn man zusätzlich eine Punktwechselwirkung bei  $r = 0$  einführt. Bei Dirichlet-Randbedingungen ist aber für die Lösung jeder Anteil von  $\Phi_{s_2}$  in der Linearkombination verboten und somit  $B = 0$ . Es bleibt also  $\Phi(r) \approx r^{\ell+1}$ . Man kann sich das so merken: Der Winkelanteil lässt sich als Polynom vom Grad  $\ell$  in den Einheitsvektor-Komponenten  $u_i = x_i/r$  schreiben. Mit  $\Psi = \Phi/r$  bedeutet das für die Wellenfunktion  $\Psi(\vec{x})$  die Form "Polynom vom Grad  $\ell$  in den  $x_i$  mal eine Funktion von  $r$ , die einen endlichen Wert bei  $r = 0$  besitzt".

### 5.5.1 Coulomb-Potential

Wir betrachten also von nun an das Coulombpotential  $V(r) = -Ze^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ , wobei  $Ze$  die Ladung des Kerns ist und  $-e$  die des Elektrons. Höhere  $Z$  mitzubehandeln, also z.B.  $\text{He}^+$ , ist kein zusätzlicher Aufwand. Als erstes bereinigen wir die Konstanten in (5.47) ein wenig. Nach Division durch  $E$  und Einführung von  $\kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar > 0$  bekommen wir

$$\frac{1}{\kappa^2}\Phi''(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{(\kappa r)^2}\Phi(r) + \left(\frac{\rho_0}{\kappa r} - 1\right)\Phi(r) = 0 \quad (5.49)$$

$$\text{mit } \rho_0 = \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa} . \quad (5.50)$$

Wenn man hierfür eine Potenzreihe  $\sum_k c_k r^k$  ansetzt, bekommt man eine Rekursion 2. Ordnung, die jeweils  $c_k, c_{k-1}, c_{k-2}$  enthält. Dabei kommt der Beitrag zu  $c_{k-2}$  jeweils von der 1 in der letzten Klammer, also dem Term der bei  $r \rightarrow \infty$  dominiert. Man kann daher die Rekursion vereinfachen indem man das asymptotische Verhalten für große  $r$  abspaltet, also einen Ansatz  $\Phi(r) = f(\kappa r) \exp(-\kappa r)$  macht. Dabei haben wir gleich die Variable auf  $\rho = \kappa r$  gewechselt, was einige überflüssige Konstanten in (5.49) eliminiert. Die Gleichung für  $f$  wird

$$\rho f''(\rho) - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho} f(\rho) + \rho_0 f(\rho) - 2\rho f'(\rho) = 0 . \quad (5.51)$$

In den Potenzreihenansatz  $f(\rho) = \sum_{k=\ell+1}^{\infty} c_k \rho^k$  verarbeiten wir durch Wahl des ersten von Null verschiedenen Terms noch unsere Erkenntnisse über das Verhalten bei  $\rho = 0$  und erhalten aus dem Koeffizientenvergleich bei  $\rho^k$  die Rekursion

$$(k(k+1) - \ell(\ell+1))c_{k+1} - (2k - \rho_0)c_k = 0 \quad (5.52)$$

für  $k \geq \ell + 1$ . Für große  $k$  wird daraus  $c_{k+1} \approx 2/(k+1)c_k$ , was zur Potenzreihe  $c_k \approx 2^k/k!$  passen würde und aufsummiert zu einem asymptotischen Verhalten  $\Phi(r) = f(\kappa r)e^{-\kappa r} \approx e^{\kappa r}$ . Wir haben hier also eine Spur der asymptotisch exponentiell wachsenden Lösung gefunden, die wir ja auch für alle Werte von  $\rho_0$  außer denen mit Eigenwerten  $E_n$  erwarten. Wir schließen, dass die Potenzreihe für  $f$  abbrechen muss, also  $c_k = 0$  für irgend ein  $k > \ell + 1$ , und damit für alle weiteren.

*Beweis:* Genauer geht das Argument so: Wir wählen ein kleines  $\varepsilon > 0$  und ein geeignetes  $K$ , sodass

$$\frac{2k - \rho_0}{k(k+1) - \ell(\ell+1)} \geq \frac{2 - \varepsilon}{k+1} \quad (5.53)$$

für alle  $k \geq K$ . Zum Beispiel reicht  $K \geq \max\{\ell + 1, \rho_0/\varepsilon\}$ . Wenn nun  $c_K \neq 0$ , dann gilt per Induktion

$$\frac{c_{k+1}}{c_K} = \frac{2k - \rho_0}{k(k+1) - \ell(\ell+1)} \frac{c_k}{c_K} \geq \frac{2 - \varepsilon}{k+1} \frac{c_k}{c_K} \geq \frac{(2 - \varepsilon)^{k+1}}{(k+1)!} C. \quad (5.54)$$

Mit einer positiven Konstanten  $C$ . Damit ist für  $\rho \rightarrow \infty$ :

$$\frac{1}{c_K} f(\rho) = \frac{1}{c_K} \sum_{k=K}^{\infty} c_k \rho^k + \mathbf{O}(\rho^{K-1}) \geq C e^{(2-\varepsilon)\rho} + \mathbf{O}(\rho^{K-1}), \quad (5.55)$$

wobei  $\mathbf{O}(\rho^{K-1})$  für ein (i.A. jeweils verschiedenes) Polynom vom Grad  $K-1$  steht. Die Radiallösung  $\Phi = e^{-\rho} f(\rho)$  wächst also wenigstens wie  $\exp((1-\varepsilon)\rho)$ , was definitiv nicht quadratintegrabel ist. Die einzige Annahme hier war  $c_K \neq 0$ . Mit anderen Worten, die Potenzreihe für  $f$  muss abbrechen. ■

Wir bekommen  $c_{n+1} = 0$  trotz  $c_n \neq 0$  genau dann, wenn  $2n = \rho_0$ . Damit sind die möglichen Eigenwerte nach (5.50)

$$E_n = \frac{-R}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad \text{mit } R = \frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)^2}. \quad (5.56)$$

Die sogenannte Rydberg-Energie  $R \approx 13,6 \text{ eV}$  gehört zu den am genauesten gemessenen Naturkonstanten. Zur Angabe der Eigenwerte gehört natürlich auch der Entartungsgrad. Wir hatten  $n$  als den Index des höchsten von Null verschiedenen Koeffizienten  $c_n$  genommen<sup>1</sup>. Offenbar ist dann  $n \geq \ell + 1$ . Zu jedem  $\ell$  gehören  $2\ell + 1$  Eigenwerte  $m$  von  $L_3$ , sodass der Gesamtentartungsgrad (Dimension des Eigenraums  $\mathcal{H}_n$  zum Eigenwert  $E_n$ )

$$\dim \mathcal{H}_n = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2 \quad (5.57)$$

ist.

<sup>1</sup>Vorsicht: Damit ist die Grundzustandsenergie nicht " $E_0$ ", wie sonst in diesem Text, sondern  $E_1$

Auch die Eigenfunktionen haben wir praktisch schon berechnet. Da die Potenzreihe für  $f$  abbricht, ist die Radialfunktion  $\Phi(r) = r^{\ell+1} P_{\ell,n}(\kappa r) e^{-\kappa r}$ , wobei  $P$  ein Polynom vom Grad  $n - (\ell + 1)$ . Explizit bekommen wir die Polynome  $P_{\ell,n}$  aus der Lösung der Rekursion (5.52). Also

$$\Psi_{n\ell m}(x) = c e^{-\kappa_n |x|} P_{\ell,n}(\kappa_n |x|) \left( r^\ell Y_{\ell m}\left(\frac{x}{|x|}\right) \right). \quad (5.58)$$

Dabei ist der letzte Faktor ein Polynom in den Koordinaten  $x_i$  und eine Eigenfunktion zu  $L_3$  mit Eigenwert  $\hbar m$ . Die Polynome  $P_{\ell,n}$  sind bis auf Normierungsfaktoren als Laguerre-Polynome  $L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}$  in den Formelsammlungen zu finden. Dabei gibt wie üblich der untere Index den Grad des Polynoms an und der obere bezieht sich auf die Wahl der Gewichtsfunktion.

Eine Merkwürdigkeit bleibt noch aufzuklären: Wenn man für ein beliebiges Potential  $V$  die Radialgleichung (5.47) löst bekommt man für jedes  $\ell$  einen Satz von Eigenwerten, aber es gibt keinen Grund, warum die für verschiedene  $\ell$  jemals gleich ausfallen sollten. Was wir gefunden haben, ist, dass der Eigenwert  $E_n$  für alle  $\ell \leq n - 1$  vorkommt. Das wird gelegentlich als **zufällige Entartung** bezeichnet (z.B. [LL79]), aber es ist eine spezielle Eigenschaft des  $1/r$ -Potentials, die sonst nur das  $r^2$ -Potential des dreidimensionalen harmonischen Oszillators aufweist. Dies sind genau die Potentiale, die in der klassischen Mechanik durch das sogenannte Bertrandsche Theorem charakterisiert sind. Normalerweise bekommt man für das klassische Problem (5.43) eine Oszillation in der Radialkoordinate, sodass zu jeder vollen Schwingung, also zwischen je zwei Perihel-Punkten ein Winkel zurückgelegt wird, der fast nie ein rationaler Bruchteil von  $2\pi$  ist: Die meisten Bahnen schließen sich nicht. Genau für das  $1/r$ -Potential und für das  $r^2$ -Potential tun sie das aber doch für alle Bahnen, die nicht nach Unendlich gehen [Arn78, Sect. 2.8.D]. Einen direkten Zusammenhang kann man hier kaum erkennen, weil es ja im quantenmechanischen Fall die Bahnen nicht gibt. Allerdings gibt es in beiden Problemen einen Zusammenhang mit zusätzlichen Erhaltungsgrößen. Für den Oszillator kann man sie als quadratische Ausdrücke in Orten und Impulsen hinschreiben, für das Coulomb-Problem sind sie durch den sogenannten **Lenz-Runge Vektor** gegeben:

$$\vec{M} = \frac{\vec{Q}}{r} + \frac{2\pi\epsilon_0}{me^2} (\vec{L} \times \vec{P} - \vec{P} \times \vec{L}). \quad (5.59)$$

Die Kreuzprodukte der Vektoroperatoren in der Klammer sind so gemeint, dass die Reihenfolge der Operatoren respektiert werden muss, also  $(\vec{L} \times \vec{P})_1 = L_2 P_3 - L_3 P_2$ . Die Klammer ist also eine hermitisierte Form des klassischen Ausdrucks  $2\vec{L} \times \vec{P}$ . Dann vertauscht tatsächlich jede Komponente  $M_\alpha$  mit  $H^2$ . Man kann sich die erweiterte Symmetrie genauer anschauen und feststellen, dass sie bei gegebener Energie der Gruppe

<sup>2</sup>Diese Symmetrie erlaubte es Pauli 1926, das Wasserstoffproblem in der dafür eigentlich ziemlich untauglichen Matrixmechanik zu lösen. Für ein anderes Potential (außer  $V(r) = r^2$ ) hätte er kaum eine Chance gehabt. Schrödinger hatte es da leichter, denn die Theorie der singulären Stellen von Differentialgleichungen 2. Ordnung war damals schon (bzw. noch) Lehrbuchstoff. Dennoch dankt er in einer Fußnote dem Mathematiker Hermann Weyl (und damit dem Liebhaber seiner Frau) für die "Anleitung zur Lösung dieser Gleichung".

$SO(4)$  der Drehungen in 4 Dimensionen entspricht [Rol03]. Aus den von  $\vec{M}$  erzeugten klassischen Symmetrie-Transformationen im 6-dimensionalen Phasenraum könnte man hoffen, etwas Geometrisches über das Problem zu lernen, aber ich kenne keinen, dem das gelungen ist. Was man aber sofort verstehen kann, ist, wie eine zusätzliche Symmetrie zu “zufälliger” Entartung führt. Dazu braucht man nur den Operator  $M_1$  auf eine gemeinsame Eigenfunktion  $\Psi$  von  $H$  und  $\vec{L}^2$  anzuwenden und festzustellen, dass dies aus dem Eigenraum  $\mathcal{H}_\ell$  herausführt. Da sich der Eigenwert von  $H$  dabei nicht ändert, findet man durch Zerlegung von  $M\Psi$  nach  $\vec{L}^2$  Eigenräumen  $\mathcal{H}_{\ell'}$  weitere Werte  $\ell'$  zu denen der gleiche Eigenwert existiert. [Ü5.2].

### 5.5.2 Realerer Wasserstoff

Was haben wir mit der Bestimmung der Eigenwerte nun für die Theorie des Wasserstoffatoms erreicht? Einerseits war die Auffindung der Energieniveaus in Übereinstimmung bei den experimentell bekannten Werten eine entscheidende Bestätigung für die beiden Zugänge (Matrix- und Wellenmechanik) in ihrer Anfangsphase. Auch Bohr hatte ja diesen Erfolg schon erzielt, lag aber beim Drehimpuls ziemlich daneben: Wie wir gesehen haben ist der Drehimpuls für den Grundzustand  $\ell = 0$ , während er für die niedrigste Bohrsche Kreisbahn  $\hbar$  ist. In jedem Fall ist dieser Erfolg erst die nullte Näherung. Wie geht es weiter?

Zunächst bestehen reale Wasserstoffatome nicht aus einem Elektron, das um ein im Raum festgenageltes Coulomb-Potential kreist. Mindestens ein Proton brauchen wir, und eine Coulomb-Wechselwirkung zwischen Proton und Elektron. Dieses Zweikörperproblem lässt sich vollständig analog zum klassischen Fall behandeln: Man geht über zu Schwerpunkt- und Relativkoordinaten, was sich dann auch auf die Impulse überträgt. Für die Relativkoordinate erhält man dann genau den eben untersuchten Hamiltonoperator, wenn auch mit der reduzierten Masse  $m = (m_e m_K)/(m_e + m_K)$ , während die Schwerpunktskoordinate sich wie ein freies Teilchen verhält. Da die Kernmasse  $m_K$  eingeht, kann man also Wasserstoff und Deuterium/Tritium spektroskopisch unterscheiden. Das Spektrum des kombinierten Systems ist rein stetig, hat also keine diskreten Eigenwerte mehr.

Eine weitere gravierende Auslassung ist, die Teilchen als spinlos zu behandeln. Ein Hinweis darauf, dass hier etwas fehlte kam schon früh aus der Spektroskopie. Wir hatten ja gesehen, dass die Eigenwerte zum Drehimpulsquadrat  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$  entartet ist, und zwar  $(2\ell + 1)$ -fach. Wenn man die Symmetrie aufhebt, zum Beispiel durch ein zusätzliches Magnetfeld, wird diese Entartung aufgehoben, das heißt das vorigen Niveau spaltet proportional zum Feld in eine Gruppe nahe beieinander liegender Niveaus auf (Zeeman-Effekt). Andererseits misst man aber für manche Niveaus eine Aufspaltung in zwei Niveaus. Dies entspräche  $\ell = 1/2$ , einem Wert, der nach unserer Diskussion des Bahndrehimpulses nicht möglich ist. Dies war historisch einer der Hinweise für den Spin des Elektrons. Erklärt wurde die Sache letzten Endes durch Diracs relativistische Wellengleichung für Elektronen, in der ein Spin notwendigerweise vorkommt. Diese

Größe “Spin” bleibt auch in der nicht-relativistischen Näherung erhalten, allerdings so, dass oft in erster Näherung keine Wechselwirkung zwischen Spin und den übrigen Freiheitsgraden übrig bleibt. Dies ist der Grund, warum man viele Phänomene mit einer spinlosen Schrödingergleichung schon ganz gut beschreiben kann. Zu den relativistischen Korrekturen, gehört eine Spin-Bahnwechselwirkung und die Präzession des Spins in einem äußeren Magnetfeld.

Allerdings trägt auch die genaueste Bestimmung der Energieniveaus erst mal noch nichts zu der Frage bei, warum die beobachteten Spektrallinien bei den Differenzfrequenzen liegen. Wie also passieren Bohrs Quantensprünge? Offenbar ist dazu die Kopplung des Atoms an ein äußeres Strahlungsfeld nötig, das natürlich auch wiederum quantenmechanisch beschrieben werden muss. Die eben ausgerechneten stationären Eigenzustände sind dann natürlich nicht mehr stationär: Sie strahlen ja Photonen ab. Der einzige diskrete Eigenzustand des Gesamtsystems sollte also der atomare Grundzustand gepaart mit dem Vakuum-Zustand des Feldes sein. Auch in nicht-relativistischen Modellen lässt sich diese Grundstruktur schon sehen [?], aber die mathematisch strenge Behandlung liegt weit jenseits der Reichweite dieser Vorlesungen. Die praktische Disziplin, die sich mit den Phänomenen der Abstrahlung und Absorption auseinandersetzt ist die **Quantenoptik**. Sie hat ihre eigenen charakteristischen Näherungen, die vielfach an der Praxis getestet sind, deren Behandlung aber hier zu weit führt.

## 5.6 $\circ$ Streuung im Zentralpotential

Die gleiche Symmetrie-Reduktion, die man bei gebundenen Zuständen einsetzt kommt auch bei Streuproblemen an Zentralpotentialen zum Tragen.

## 5.7 Periodische Potentiale

Periodische Potentiale kommen vor allem in der Festkörperphysik vor, bei der Beschreibung der Bewegung von Elektronen im effektiven Potential kristallin angeordneter Atomrümpfe. Wir erlauben daher wieder mehr als eine Raumdimension, also Teilchen in  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d, dx)$  mit Hamiltonoperator  $H = P^2/(2m) + V(Q)$ . Die Periodizität des Potential wird dann ausgedrückt durch die Gleichung

$$V(x + g) = V(x) \quad \text{für } x \in \mathbb{R}^d \text{ und } g \in G, \quad (5.60)$$

Die Menge  $G \subset \mathbb{R}^d$  der Perioden bildet offenbar eine Gruppe mit der Vektoraddition als Verknüpfung. Wir setzen voraus, dass sie ein  $d$ -dimensionales “Bravais”-**Gitter** bildet, also einerseits keine beliebig kurzen Vektoren enthält und andererseits auch nicht in einem echten Unterraum von  $\mathbb{R}^d$  enthalten ist. Daraus folgt dann, dass  $G$  von  $d$  linear unabhängigen Vektoren  $\gamma_1, \dots, \gamma_d$  erzeugt wird, in dem Sinne, dass

$$G = \left\{ \sum_{\alpha} n_{\alpha} \gamma_{\alpha} \mid n_{\alpha} \in \mathbb{Z} \right\}. \quad (5.61)$$

Bevor wir den Hamiltonoperator durch Ausnutzung der Gittersymmetrie weiter vereinfachen, ist es hilfreich die Fourier-Analyse für periodische Funktionen, also zum Beispiele für Potentiale aber auch für quadratintegrable Funktionen zu betrachten. Das Gitter  $G$  ist dabei fest gewählt.

### 5.7.1 Periodische Funktionen

Für periodische Funktionen  $\Psi \neq 0$  kann  $\int_{\mathbb{R}^d} dx |\Psi(x)|^2$  nicht endlich sein, da ja jede der unendlich vielen Perioden den gleichen Beitrag zum Integral liefert. Wir definieren daher das Skalarprodukt für periodische Funktionen nicht über das Integral sondern über das Mittel von  $\overline{\Psi(x)}\Phi(x)$ :

$$\langle \Psi, \Phi \rangle = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{1}{|rM|} \int_{x \in rM} dx \overline{\Psi(x)} \Phi(x) , \quad (5.62)$$

wobei  $M$  z.B. eine Kugel um den Ursprung ist oder allgemeiner eine beschränkte messbare Menge, die eine Umgebung des Ursprungs enthält.  $|rM| = r^d |M|$  bezeichnet das Lebesgue-Maß der um einen Faktor  $r$  aufgeblasenen Menge. Man kann sich leicht überlegen, dass für periodische Funktionen der Limes existiert und nicht von  $M$  abhängt. Bezeichnen wir mit  $\mathcal{H}_G$  den Hilbertraum von periodischen Funktionen mit diesem Skalarprodukt.

Natürlich rechnet man für (5.62) immer wieder das gleiche Integral aus. Es ist also praktischer, sich auf einen Bereich  $W$  einzuschränken, der, bis auf Gittertranslationen, gerade alle Punkte einmal enthält. Man nennt das einen **Fundamentalebereich** des Gitters. Das ist eine messbare Menge  $W \subset \mathbb{R}^d$ , sodass jeder Punkt  $x$  eine eindeutige Zerlegung  $x = w + g$  mit  $w \in W$  und  $g \in G$  hat. Im eindimensionalen Fall entspricht dies gerade den bekannten Methoden des Rundens, also der Zerlegung einer beliebigen reellen Zahl  $x$  in einen ganzzahligen Teil und einen Rest. Je nachdem, ob man den ganzzahligen als die nächstkleinere, die nächstgrößere oder die nächstliegende Zahl  $n \in \mathbb{Z}$  wählt, also abrundet, aufrundet oder rundet, erhält man für  $W$  verschiedene Intervalle der Länge 1 um 0 herum.

Da man jede periodische Funktion auf  $W$  einschränken kann und umgekehrt jede Funktion auf  $W$  eindeutig zu einer periodischen Funktion fortgesetzt werden kann, gilt

$$\mathcal{H}_G \cong \mathcal{L}^2 \left( W, \frac{dx}{|W|} \right) , \quad (5.63)$$

wobei der Isomorphismus einfach durch Einschränkung gegeben ist. Das Volumen  $|W|$  ist übrigens für jeden Fundamentalebereich gleich dem Betrag der Determinante der Matrix, deren Spalten die Basisvektoren  $\gamma_1, \dots, \gamma_d$  sind.

Für die Wahl von  $W$  gibt es viele Möglichkeiten. Zum einen können wir eine Basis wählen und setzen  $W = W_1 = \{ \sum_{\alpha} x_{\alpha} \gamma_{\alpha} \mid 0 \leq x_{\alpha} < 1 \}$ . Diese "Einheitszelle" drückt aus, dass bis auf eine lineare Transformation alle Gitter gleich sind: Sie unterscheiden



sich nur durch Wahl einer Basis von  $\mathbb{R}^d$ . Andererseits liegt in der Wahl der Basis eine Willkür und es ist oft wichtiger, die Symmetrie des Problems zu respektieren, also die Drehungen und orthogonalen Spiegelungen, die das Gitter invariant lassen. Dies sind Begriffe, die vom Abstandsbegriff (bzw. einem Skalarprodukt) in  $\mathbb{R}^d$  abhängen. Man wählt daher am besten die **Voronoi-Konstruktion**, die zu jeder diskreten Punktmenge  $G$  (also zum Beispiel für unser Gitter) den Raum in Zellen aufteilt danach, welchem Punkt von  $G$  sie am nächsten liegen. Als Fundamentalbereich wählen wir dann die Zelle des Ursprungs, die sogenannte **Wigner-Seitz-Zelle**

$$W = \{x \in \mathbb{R}^d \mid \forall_{0 \neq g \in G} |x| < |x - g|\} + \text{Randpunkte} . \quad (5.64)$$

Mögliche Randpunkte sind solche, für die  $|x| \leq |x - g|$  für alle Gitterpunkte  $g \neq 0$  gilt, mit Gleichheit für mindestens ein  $g$ . Da solche Punkte sich gerade wieder um einen Gittervektor unterscheiden können, muss man eine Auswahl treffen, damit  $W$  ein Fundamentalbereich wird. Für diese Auswahl gibt es kein Verfahren, das automatisch die Gittersymmetrie respektiert. Die Wahl ist aber auch weitgehend unerheblich, weil die Randpunkte vom Maß Null sind, und so alle Wahlen den gleichen Raum  $\mathcal{L}^2(W)$  definieren. Beispiele solcher Zellen sind in Abb. ?? dargestellt.

Eine weitere Alternative zur Untersuchung von  $\mathcal{H}_G$  ist die Einführung einer Basis aus Funktionen der Form  $e_p(x) = e^{ip \cdot x/\hbar}$ . Zunächst ist nach dem Skalarprodukt (5.62)  $\langle e_p, e_{p'} \rangle = 0$  wenn  $p \neq p'$ , wobei wir nicht einmal nach der Periodizität von dieser Funktionen gefragt haben: Das Mittel einer nicht-konstanten Exponentialfunktion (hier im Integranden des Skalarproduktes  $e_{p'-p}$ ) ist eben Null. Andererseits ist offenbar  $\langle e_p, e_p \rangle = 1$ . Die  $e_p$  sind tatsächlich eine überabzählbare Orthonormalbasis für den nicht-separablen Hilbertraum von “fastperiodischen” Funktionen. Wir interessieren uns aber nur für den Teilraum der  $G$ -periodischen Funktionen. Die Bedingung  $e_p \in \mathcal{H}_G$  ist gerade, dass  $\exp i(x+g \cdot p)/\hbar = \exp ix \cdot p/\hbar$  für alle  $g \in G$  und  $x \in \mathbb{R}^d$ , also  $g \cdot p \in 2\pi\hbar \mathbb{Z}$ . Für die  $p$  mit dieser Eigenschaft führen wir die Bezeichnung

$$\hat{G} = \{p \in \mathbb{R}^d \mid \forall_{g \in G} p \cdot g \in 2\pi\hbar \mathbb{Z}\} \quad (5.65)$$

ein. Auch dies ist offenbar wieder ein Gruppe, und auch ein diskretes  $d$ -dimensionales Gitter, das man das zu  $G$  **duale Gitter** nennt. Da alle Gitter bis auf eine lineare Transformation gleich sind, können wir dies an Hand des kubischen Einheitsgitters überprüfen, das von den Achsen-Einheitsvektoren aufgespannt wird. Die Basisvektoren  $\hat{\gamma}_1, \dots, \hat{\gamma}_d$  für  $\hat{G}$  wählt man so, dass  $\hat{\gamma}_\alpha \cdot \gamma_\beta = 2\pi\hbar \delta_{\alpha\beta}$ . Damit sind die aus diesen Vektoren gebildeten  $d \times d$ -Matrizen invers zueinander, was die direkteste Methode liefert, das duale Gitter zu berechnen. Man nennt es deshalb auch das “reziproke Gitter”. Die  $e_p$  mit  $p \in \hat{G}$  bilden also ein Orthonormalsystem in  $\mathcal{H}_G$  und man kann sich leicht vergewissern, dass das System auch vollständig ist, also eine Basis bildet. Die Entwicklungsformeln dazu bilden die Theorie der **Fourier-Reihen** und ergeben eine unitäre Transformation  $\mathcal{F}_G : \ell^2(\hat{G}) \rightarrow \mathcal{H}_G$

$$(\mathcal{F}_G \varphi)(x) = \sum_{\hat{g} \in \hat{G}} \varphi(\hat{g}) e^{ix \cdot \hat{g}/\hbar} \quad (5.66)$$

$$(\mathcal{F}_G \Psi)(\hat{g}) = \langle e_{\hat{g}}, \Psi \rangle . \quad (5.67)$$

Insgesamt haben wir also drei isomorphe Räume

$$\mathcal{H}_G \cong \mathcal{L}^2(W, \frac{dx}{|W|}) \cong \ell^2(\hat{G})$$

die wir zur Beschreibung  $G$ -periodischer Funktionen heranziehen können.

### 5.7.2 Blochtransformation

Der Hamiltonoperator  $H = p^2/(2m) + V(Q)$  vertauscht mit den Translationsoperatoren  $(U_g\Psi)(x) = \Psi(x - g)$  mit  $g \in G$ : Für das Potential ist dies gerade gleichbedeutend mit (5.60) und die kinetische Energie vertauscht ohnehin mit allen Translationen. Wir werden daher  $H$  gemeinsam mit den Gittertranslationen diagonalisieren, wobei es ausreicht die Basistranslationen  $U_{\gamma_\alpha}$  zu betrachten. Zuerst diagonalisieren wir die Gittertranslationen. Das ist einfach, weil schon wissen wie wir *alle* Translationen gemeinsam diagonalisieren können: durch Fouriertransformation. Es gilt ja  $(\mathcal{F}U_g\Psi)(p) = \exp(ip \cdot g/\hbar)(\mathcal{F}\Psi)(p)$ . Das gemeinsame Spektrum der  $U_g$  besteht also aus den Funktionen  $g \mapsto \exp(ip \cdot g/\hbar)$  die für jeden der Operatoren angeben mit welcher Phase die Wellenfunktion an der Stelle  $p$  zu multiplizieren ist. Natürlich würde die Angabe dieser Phasen für die Basisvektoren ausreichen, um alle anderen zu bestimmen. Verschiedene  $p$  können aber zu den gleichen Phasen führen, nämlich gerade dann wenn  $p - p' \in \hat{G}$ . Um die möglichen Eigenwertsätze der  $U_g$  zu bestimmen reicht also die Angabe auf einem Fundamentalbereich  $B$  des dualen Gitters  $\hat{G}$ . In diesem Fall nennt man die Voronoi-Zelle des Ursprungs die **Brillouin-Zone**. Die eindeutige Zerlegung  $p = b + \hat{g}$  eines Impulses in seinen Anteil  $b \in B$  in der Brillouin-Zone und einen dualen Gittervektor  $\hat{g} \in \hat{G}$  hat für die Diagonalisierung von  $H$  jetzt eine direkte Bedeutung:  $b$  wird von  $H$  nicht verändert, der Operator “wirkt” also nur auf die  $\hat{g}$ -Koordinate. Konkret können wir die unitäre Transformation  $\tilde{\mathcal{B}}: \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d, dx) \rightarrow \mathcal{L}^2(B \times \hat{G}, dp z(d\hat{g}))$  verwenden, die einfach diese Zerlegung an der Fourier-Transformierten vornimmt und damit aus der Funktion des einen Argumentes  $p \in \mathbb{R}^d$  eine Funktion von zwei Argumenten macht:

$$(\tilde{\mathcal{B}}\Psi)(b, \hat{g}) = (\mathcal{F}\Psi)(b + \hat{g}) . \quad (5.68)$$

Damit dies unitär wird, muss das Skalarprodukt in  $\mathcal{L}^2(B \times \hat{G}, dp z(d\hat{g}))$  als  $\langle \varphi, \psi \rangle = \sum_{\hat{g}} \int_B db \overline{\varphi(b, \hat{g})} \psi(b, \hat{g})$ , das heißt,  $z(d\hat{g})$  bedeutet das Zählmaß auf  $\hat{G}$ . Der Hamiltonoperator wirkt dann gemäß

$$(\tilde{\mathcal{B}}H\Psi)(b, \hat{g}) = \frac{(b + \hat{g})^2}{2m} (\tilde{\mathcal{B}}\Psi)(b, \hat{g}) + \sum_{\hat{r} \in \hat{G}} \hat{V}(\hat{r}) (\tilde{\mathcal{B}}\Psi)(b, \hat{g} - \hat{r}) , \quad (5.69)$$

wobei  $\hat{V}(\hat{r})$  die Fourierkoeffizienten des Potentials sind. Wie man sieht, tritt der Brillouin-Impuls  $b$  hier nur auf als Parameter für eine Familie  $H_b$  von Operatoren auf  $\ell^2(\hat{G})$ :

$$(H_b\Psi)(\hat{g}) = \frac{(b + \hat{g})^2}{2m} \Psi(\hat{g}) + \sum_{\hat{r} \in \hat{G}} \hat{V}(\hat{r}) \Psi(\hat{g} - \hat{r}) . \quad (5.70)$$

Wir können diesen Operator für jedes  $b$  getrennt diagonalisieren, und bekommen dann einen Satz von  $b$ -abhängigen Eigenwerten, die als die **Bandstruktur** des Potentials bezeichnet werden (Siehe Abb).

### 5.7.3 ° Zustandsdichte

## 5.8 Eichsymmetrie: Bewegung im Magnetfeld

Bewegung in äußeren elektrischen Feldern kann man durch Potentiale wie gehabt beschreiben. Magnetische Felder sind aber oft genauso wichtig, wie zum Beispiel im Elektronenmikroskop. Wie beschreibt man also die Bewegung eines quantenmechanischen Teilchens in solchen Feldern? Da wir auch den elektrischen Fall durch Korrespondenz aus der klassischen Mechanik geraten haben, versuchen wir es auch hier. Für ein Teilchen der Ladung  $\kappa$  im Magnetfeld  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$  und elektrischen Feld  $\vec{E} = -\vec{\nabla}V$  lautet die Hamiltonfunktion

$$H(q, p) = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{\kappa}{c} \vec{A}(q) \right)^2 + \kappa V(q) . \quad (5.71)$$

Die Rechtfertigung hierfür ist, dass die zugehörigen Hamiltonschen Bewegungsgleichungen gerade die Bewegung unter der Lorentz-Kraft  $\kappa(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B})$  ergeben. Wir raten also den Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2m} \left( \vec{P} - \frac{\kappa}{c} \vec{A}(Q) \right)^2 + \kappa V(Q) . \quad (5.72)$$

Die Ersetzung von  $P_\mu$  durch

$$\tilde{P}_\mu = P_\mu - (\kappa/c) A_\mu(Q) \quad (5.73)$$

nennt sich auch **magnetische Substitution**. Die charakteristische Eigenschaft dieser Operatoren ist, dass sie nicht mehr vertauschen. Statt dessen gilt

$$\frac{i}{\hbar} [P_\mu, P_\nu] = -\frac{\kappa}{c} \left( \frac{\partial A_\nu(x)}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A_\mu(x)}{\partial x_\nu} \right) = -\frac{\kappa}{c} F_{\mu\nu}(x) \quad (5.74)$$

$$F_{\mu\nu}(x) = \sum \varepsilon_{\mu\nu\lambda} B_\lambda(Q) . \quad (5.75)$$

Diese Form des Hamiltonoperators lässt sich noch auf einem anderen Wege bekommen, der typisch für die Wechselwirkung mit den Feldern in sogenannten **Eichtheorien** ist. Wir wissen, dass eine Änderung der Wellenfunktionen um eine feste Phase alle Erwartungswerte ungeändert lässt. Anders ausgedrückt ist die Multiplikation mit dem unitären Operator  $U = e^{i\chi} \mathbb{1}$  eine (recht triviale) Symmetrie der Theorie. Was passiert aber, wenn man diese Phase *ortsabhängig* macht? Wir bekommen dann einen unitären Operator der Form

$$(U\Psi)(x) = \exp\left(\frac{i\kappa}{\hbar c} \chi(x)\right) \Psi(x) , \quad (5.76)$$

den man auch eine **Eichtransformation** nennt. Als Multiplikationsoperator vertauscht  $U$  mit allen Funktionen der Ortsoperatoren  $Q_\mu$ . Dagegen bekommen wir für die Impulsoperatoren

$$UP_\mu U^* = P_\mu - \frac{\kappa}{c} A_\mu(Q) \quad (5.77)$$

$$\text{mit } A_\mu(x) = \frac{\partial \chi(x)}{\partial x_\mu} . \quad (5.78)$$

Also ist  $U(P^2/(2m) + V(Q))U^*$  gerade der Operator (5.72). Aufgrund der Ableitung ist aber klar, dass der so gewonnene Operator (bis auf eine unitäre Koordinatentransformation) der gleiche ist wie der Operator ohne Magnetfeld, und in der Tat ist ja für das Vektorpotential  $A = \nabla \chi$  das Feld  $B = \nabla \times A = 0$ . Wir haben also durch die Eichtransformation  $U$  nicht etwa aus der Form des Hamiltonoperators ohne Feld plötzlich einen Operator mit Magnetfeld gezaubert. Die einzigen Operatoren (5.72), die wir so bekommen, sind solche, für die das Wegintegral des Vektorpotentials  $A$  entlang geschlossener Wege verschwindet. Lässt man aber diese “Integrabilitätsbedingung” fallen, so hat man die Form des Operators für allgemeine Magnetfelder.

### 5.8.1 $\circ^*$ Bündelableitungen

Die eben gegebene Einführung von Eichsymmetrien wird den Anforderungen in komplexeren Problemen nicht ganz gerecht. Der geometrische Grundbegriff, der hier dahinter steht ist der eines **Vektorbündels**. Die Idee dabei ist, dass der Wert der Wellenfunktion an der Stelle  $x$  ein Vektor in einem Hilbertraum  $\mathcal{H}_x$  ist, der von  $x$  abhängt. In unserem Fall wäre  $\mathcal{H}_x = \mathbb{C}$ , aber der Witz dieser Betrachtungsweise ist gerade, dass in  $\mathcal{H}_x$  keine Basis fest vorgegeben ist. Es macht also zunächst keinen Sinn zu sagen, die Wellenfunktion sei in der Nähe eines Punktes konstant: Erst wenn ich eine Basis in jedem  $\mathcal{H}_x$  gewählt habe, könnte ich sagen, dass alle Komponenten konstant sind. Im Fall  $\dim \mathcal{H}_x = 1$  ist daher nur eine Phase zu wählen und der Basiswechsel ist gerade ein Operator der Form (5.76).

### 5.8.2 Konstantes Magnetfeld

Wenn das Magnetfeld räumlich konstant ist und  $V = 0$ , sind die räumlichen Translationen offenbar eine Symmetrie des Systems. Das scheint allerdings zunächst nicht zum Operator (5.72) zu passen, da das Vektorpotential für  $B \neq 0$  nicht konstant sein kann. Wie passt das zusammen?

Seien  $R_\mu$  ( $\mu = 1, 2, 3$ ) die Erzeuger der räumlichen Translationen. Weil die Translationsgruppe kommutativ ist, müssen diese Erzeuger bis auf eine (konstante!) Phase vertauschen. Außerdem soll die Symmetrie auf die Ortsobservablen wie eine Verschiebung wirken, was die Vertauschungsrelation  $(\hbar/i)[R_\mu, Q_\nu] = \delta_{\mu\nu} \mathbb{1}$  nach sich zieht, also

genau die kanonischen Vertauschungsrelationen(1.33), die wir normalerweise und aus dem gleichen Grund für die Impulse benutzen. Damit vertauscht also  $R_\mu - P_\mu = C_\mu$  mit dem Ort, und wirkt daher wie  $(C_\mu \Psi)(x) = C_\mu(x) \Psi(x)$ . Damit haben die  $R_\mu$  genau die Form eines magnetisch substituierten Impulsoperators, mit

$$\frac{i}{\hbar} [R_\mu, R_\nu] = \frac{\partial C_\nu(x)}{\partial x_\mu} - \frac{\partial C_\mu(x)}{\partial x_\nu} = f_{\mu\nu} = \text{const} . \quad (5.79)$$

Die Bedingung, dass der Hamiltonoperator mit den durch  $R_\mu$  erzeugten Translationen vertauscht verschärft wir dahin, dass  $R_\mu$  mit allen magnetisch substituierten Impulsen  $P_\nu - (\kappa/c)A_\nu(Q)$  vertauschen soll, was dann auf

$$-\frac{\kappa}{c} \frac{\partial A_\nu(x)}{\partial x_\mu} - \frac{\partial C_\mu(x)}{\partial x_\nu} = 0 \quad (5.80)$$

führt. Wenn wir dies direkt in (5.79) einsetzen bekommen wir  $f_{\mu\nu}$

### 5.8.3 [old text]

Natürlich kann man die Eichtransformation  $U$  auch auf Hamiltonoperatoren der Form (5.72) mit nicht-trivialem Feld anwenden. Man erhält dann lediglich einen Zusatzterm im Vektorpotential:  $A$  wird ersetzt durch  $A + \nabla\chi$ . Es ist daher oft praktisch, Größen zu benutzen, die unter Eichtransformationen ungeändert bleiben. Dies sind natürlich die Ortsoperatoren  $Q_\mu$ , aber auch die **Geschwindigkeitsoperatoren**

$$V_\mu = \frac{1}{m} (P_\mu - \frac{\kappa}{c} A_\mu(Q)) . \quad (5.81)$$

(Vorsicht: nicht mit dem Potential  $V$  verwechseln, und ebenfalls nicht mit den Gruppengeschwindigkeiten aus Abschnitt 3.2. Der Name sollte nicht zu wörtlich genommen werden. Er stammt aus der klassischen Analogie). Diese Größen sind **eichinvariant** im Sinne, dass  $UV_\mu U^*$  die entsprechende Größe mit dem umgekehrten Vektorpotential  $A + \nabla\chi$  wird. Insbesondere bleiben die Vertauschungsrelationen dabei ungeändert. Wir haben  $\frac{i}{\hbar} [V_\mu, Q_\nu] = m^{-1} \delta_{\mu\nu}$  und

$$\frac{i}{\hbar} [V_\mu, V_\nu] = \frac{-\kappa}{m^2 c} \sum_\sigma \varepsilon_{\mu\nu\sigma} B_\sigma \mathbb{1} , \quad (5.82)$$

wobei  $\varepsilon$  der vollständig antisymmetrische Einheitstensor ist. Hier taucht also nur das Magnetfeld und nicht mehr das Vektorpotential auf.

Als Beispiel betrachten wir ein Teilchen im konstanten Magnetfeld  $\vec{B} = (0, 0, B)$ . Dann erfüllen  $V_1$  und  $V_2$  (bis auf einen Faktor) kanonische Vertauschungsrelationen. Um diesen Umstand deutlicher herauszubringen führen wir die Operatoren

$$\tilde{P}_1 = \sqrt{\frac{m}{\omega}} V_1 \quad \tilde{Q}_1 = -\sqrt{\frac{m}{\omega}} V_2 \quad (5.83)$$

$$\tilde{P}_2 = \sqrt{m\omega} (Q_1 + \frac{1}{\omega} V_2) \quad \tilde{Q}_2 = \sqrt{m\omega} (Q_2 - \frac{1}{\omega} V_1) \quad (5.84)$$

$$\tilde{P}_3 = P_3 \quad \tilde{Q}_3 = Q_3 , \quad (5.85)$$

wobei  $\omega = \kappa B/mc$  die sogenannte **Zyklotronfrequenz** ist. Dann erfüllen die  $\tilde{P}$  und  $\tilde{Q}$  kanonische Vertauschungsrelationen, und

$$H = \frac{m}{2}(V_1^2 + V_2^2 + V_3^2) = \frac{\omega}{2}(\tilde{P}_1^2 + \tilde{Q}_1^2) + \frac{1}{2m}\tilde{P}_3^2. \quad (5.86)$$

Dieser Operator ist leicht zu diagonalisieren: Wir bekommen einen Oszillator für den ersten Freiheitsgrad, gar kein Auftreten des zweiten Freiheitsgrades im Hamiltonoperator, also Erhaltungsgrößen  $\tilde{P}_2, \tilde{Q}_2$ , und ein freies eindimensionales Teilchen in der Richtung des Feldes. Die Erhaltungsgrößen  $\tilde{P}_2, \tilde{Q}_2$  sind für das entsprechende klassische Problem (bis auf einen Faktor) die Mittelpunktskoordinaten des in der 1–2-Ebene beschriebenen Kreises. Als zusätzlicher quantenmechanischer Dreh kommt hier hinzu, dass diese Koordinaten nicht kommutieren, also der Unschärferelation unterliegen.

Da wir von vornherein mit den eichinvarianten Vertauschungsrelationen der  $V_\mu$  gearbeitet haben, brauchten wir hier nicht einmal ein spezielles Vektorpotential (eine spezielle “Eichung”) für unser Feld zu suchen. Schreibt man das Problem in den ursprünglichen “kanonischen” Impulsoperatoren, so hängt die Bedeutung der Impulse von der Eichung ab. Beispielsweise ist in einer gewissen Eichung  $P_1$  proportional zur 2-Komponente des Mittelpunktes. Diese Abhängigkeit wird manchmal dadurch ausgedrückt, dass die kanonischen Impulse (im Gegensatz zu den “kinetischen Impulsen”  $mV_\mu$ ) für nicht beobachtbar erklärt werden. Diese Äußerung ist mit Vorsicht zu genießen, denn die  $P_\mu$  sind natürlich nach wie vor ordentliche selbstadjungierte Operatoren, deren prinzipielle Messbarkeit genauso wie für alle anderen selbstadjungierten Operatoren grundsätzlich unterstellt wird. Vermutlich kommt der Spruch aus der Quantentheorie des elektromagnetischen Feldes, die man zunächst in Vektorpotentialen formuliert, um auch die Ankopplung an Ladungen beschreiben zu können. Dadurch werden in der Tat viele eichabhängige, nicht-observable Größen in die Theorie eingeschleppt, die dann später wieder eliminiert werden müssen.

Dass die Bewegung im äußeren Feld unter Verwendung von Vektorpotentialen geschrieben werden muss, verursacht manchen Leuten Bauchschmerzen. Besonders schmerzhaft ist dies beim sogenannten **Aharonov-Bohm-Effekt**. Hierbei betrachtet man Teilchen in einem Raumgebiet, aus dem eine Linie herausgeschnitten (für die Teilchen unzugänglich) ist. In einem solchen mehrfach zusammenhängenden Gebiet ist es möglich ein Vektorpotential mit  $B = \nabla \times A = 0$  zu konstruieren, für das aber keine Funktion  $\chi$  mit  $A = \nabla\chi$  existiert. Es ist also in dem für die Teilchen zugänglichen Gebiet *kein Feld* da, wenn auch in dem unzugänglichen Draht ein (singulärer) magnetischer Fluss vorhanden ist. Macht also das Vektorpotential hier überhaupt irgendeinen Unterschied? Die Antwort ist “ja”. Man bekommt zum Beispiel eine nicht-triviale Veränderung der Streuquerschnitte an einem solchen Aharonov-Bohm-Objekt. In der meist diskutierten Anordnung dieser Art wird eine unendlich lange Gerade aus dem Raum ausgenommen. Diese Version wurde auch experimentell überprüft (soweit man ein Experiment als Annäherung an diese idealisierte Anordnung akzeptieren möchte).

## 5.9 Phasenraum-Symmetrie

In machen Fällen kann die Lösung der quantenmechanischen Bewegungsgleichungen fast völlig auf das zugehörige klassische Problem zurückgeführt werden. Es liegt auf der Hand, dass dies eine gewaltige Vereinfachung bedeuten kann. Gemeint ist der Fall, in dem die Hamiltonfunktion ein Polynom vom Grad  $\leq 2$  in Orten und Impulsen ist. Der Kürze halber nennen wir dies eine **quadratische Hamiltonfunktion**. Die rechten Seiten der klassischen Bewegungsgleichungen  $\dot{q}_\mu = \frac{\partial H}{\partial p_\mu}$  und  $\dot{p}_\mu = -\frac{\partial H}{\partial q_\mu}$  sind dann offenbar höchstens vom Grad 1, also von der Form “linear plus Konstante”, wofür der Mathematiker auch “affin” sagt.

Ersetzt man in einer solchen Hamiltonfunktion die Orts/Impulskoordinaten durch die entsprechenden Operatoren, so bekommt man einen quadratischen Hamiltonoperator. Hier kann man die Bewegungsgleichungen für die kanonischen Operatoren  $P_\mu$ ,  $Q_\mu$  im Heisenberg-Bild aufstellen und bekommt Kommutatoren  $[H, P_\mu]$ , die nach Verwendung der kanonischen Vertauschungsrelationen wieder zu linearen Ausdrücken in  $P_\mu$  und  $Q_\mu$  werden. Die gesamte Zeitentwicklung bildet daher den Raum der Linearkombinationen  $c\mathbb{1} + \sum_\mu (a_\mu Q_\mu + b_\mu P_\mu)$  in sich ab. Aus der Analogie mit den klassischen Poissonklammern ist weiterhin klar, dass die Bewegungsgleichung für die Koeffizienten  $c(t)$ ,  $a_\mu(t)$ ,  $b_\mu(t)$  genau die gleiche ist wie für die klassischen Phasenraumfunktionen  $f(p, q) = c + \sum_\mu (a_\mu q_\mu + b_\mu p_\mu)$ . Hier funktioniert also die “Quantisierung” prächtig, bei der aus Funktionen Operatoren werden und aus Poissonklammern Kommutatoren.

Leider ist damit dann auch schon Schluss. Wenn man Poissonklammer oder Kommutator von Polynomen  $n$ ten und  $m$ ten Grades in  $P, Q$  bildet, erhält man ein Polynom vom Grad  $n + m - 2$ , weil bei jeder Verwendung der Vertauschungsrelationen der Grad um zwei abnimmt, und sie in jedem Kommutator von Polynomen wenigstens einmal Anwendung finden. Bei quadratischen Hamiltonoperatoren wächst der Grad der betrachteten Observablen also nicht, aber bei Polynomen dritten Grades wächst der Grad mit jeder Kommutator-Anwendung um 1, sodass die Bewegungsgleichung sich nicht schließt. Letzten Endes liegt alldem eine Symmetriegruppe der Quantenmechanik zu Grunde, nämlich die **affine symplektische Gruppe**, die man in der klassischen Mechanik auch als die Gruppe der linearen kanonischen Transformationen mit Translationen bezeichnen würde. Die Erzeuger dieser Gruppe sind, im Sinne der klassischen Mechanik wie in der Quantenmechanik, die quadratischen Hamiltonfunktionen/Operatoren. Diese Gruppe ist also im quantenmechanischen Hilbertraum unitär dargestellt und man nennt dies ihre **metaplektische Darstellung**. Verschiedene solcher unitären Transformationen haben wir schon kennengelernt: Die Phasenraum-Translationen, und Drehungen, so wie die Zeitentwicklungen für freie Teilchen und den harmonischen Oszillator. Im letzten Beispiel enthalten ist die Fouriertransformation, entsprechende einer viertel Periode der Oszillator-Zeitentwicklung. Ein weiteres Beispiel ist die Umschreibung eines Zweiteilchen-Problems auf Schwerpunkt- und Relativkoordinaten.

Die Arbeitersparnis, statt einer Operator-Exponentialfunktion nur eine affine Trans-

formation im Phasenraum berechnen zu müssen, ist enorm. Allerdings möchte man am Ende doch oft den entsprechenden unitären Operator haben. Dabei stellt sich also zuerst die Frage: Gibt es einen solchen denn für alle linearen symplektischen Transformationen? Bisher hatten wir dafür ja nur Beispiele gesehen. Die entscheidende Struktur für die klassische Mechanik [Arn78], die auch der Gruppe ihren Namen gibt ist die **symplektischen Form** des Phasenraums  $\mathbb{R}^{2d}$ . Diese Bilinearform auf dem Phasenraum, nennen wir sie  $\sigma$ :

$$\sigma((q, p), (q', p')) = p \cdot q' - p' \cdot q \quad (5.87)$$

war uns schon in den Weyl-Relationen (5.10) begegnet. Mit dieser Notation wird die Weylrelation

$$W_\xi W_\eta = e^{\frac{i}{2\hbar} \sigma(\xi, \eta)} W_{\xi + \eta} , \quad (5.88)$$

wobei wir jeweils alle  $2d$  Phasenraumkoordinaten eines Phasenraumpunktes  $(q, p) = \xi \in \mathbb{R}^{2d}$  zu einem Vektor zusammengefasst haben. Ein linearer Operator  $\theta : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$  heißt nun symplektisch, wenn  $\sigma(\theta\xi, \theta\eta) = \sigma(\xi, \eta)$ . Das ist völlig analog zu den Bezeichnungen “unitär” oder “orthogonal” für Operatoren, die das Skalarprodukt auf einem Hilbertraum oder einem reellen Raum mit Skalarprodukt invariant lassen. Die affinen kanonischen Transformationen sind nun genau diejenigen von der Form  $\xi \mapsto \theta\xi + \eta$ , mit einem symplektischen linearen Operator  $\theta$ .

Jede solche Transformation können wir (durch Einsetzen von Operatoren anstatt Phasenraumkoordinaten) auch auf unsere kanonischen Operatoren  $(Q_1, \dots, P_d)$  anwenden, und bekommen dabei Operatoren  $(Q'_1, \dots, P'_d)$ . Da  $\theta$  symplektisch ist, erfüllen diese neuen Operatoren wieder die kanonischen Vertauschungsrelationen. Können wir nun zu dieser Transformation einen unitären Operator finden, sodass  $UQ_\mu U^* = Q'_\mu$  und  $UP_\mu U^* = P'_\mu$ ? Entlang einparametriger Untergruppen können wir  $U$  als “Zeitentwicklungsoperator” zu einem quadratischen Hamiltonoperator konstruieren. Die Frage hat aber noch einen allgemeineren Zug, der auch gerade in der Frühzeit der Quantenmechanik diskutiert wurde: *Sind die Operatoren  $P_\mu, Q_\mu$  durch die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen eigentlich schon eindeutig bestimmt?* Das kann natürlich nur heißen: bis auf eine unitäre Transformation eindeutig bestimmt, und beim Problem der affinen symplektischen Transformationen wäre  $U$  gerade der unitäre Operator, der die Isomorphie zwischen den beiden Sätzen von Operatoren herstellt. Mathematisch ist das Knifflige an dieser Frage, dass sie sich auf unbeschränkte Operatoren bezieht. Man kann nämlich recht einfach zeigen, dass zwei beschränkte Operatoren die Vertauschungsrelationen nie erfüllen können. Das bedeutet, dass die Frage selbst erst dann wohldefiniert ist, wenn man geeignete Voraussetzungen an die Definitionsbereiche der Operatoren macht. Ohne weitere Voraussetzungen bekommt man haufenweise Lösungen, die mit der üblichen nichts zu tun haben (z.B. kann *einer* der Operatoren beschränkt sein). Wir haben hier nicht die Mittel, um die “richtige” Voraussetzung (alle Operatoren wesentlich selbstadjungiert auf dem Definitionsbereich von  $\sum_\mu (P_\mu^2 + Q_\mu^2)$ ) zu formulieren und auszuwerten. Es ist daher ein Segen, dass es eine Version der Vertauschungsrelationen gibt, die von vornherein in beschränkten Operatoren formuliert



ist: die Weyl-Relationen (5.10). Wir können die Weyloperatoren (5.9) ja als

$$W_{q,p} = e^{\frac{i}{\hbar}(p \cdot Q - q \cdot P)} \quad (5.89)$$

schreiben, wodurch sich die kanonischen Vertauschungsrelationen der  $P, Q$  durch Differentiation aus den Weyl-Relationen ergeben. All die technischen Voraussetzungen an  $P, Q$  sind also jetzt hier in der Voraussetzung verschwunden, dass man die Exponentialfunktion sinnvoll bilden kann (was nicht für beliebige unbeschränkte Operatoren möglich ist). Um einen sinnvollen Eindeutigkeitssatz zu bekommen müssen wir noch eine Voraussetzung treffen, die die Anwesenheit weiterer Freiheitsgrade ausschließt, die mit den betrachteten Weyl-Operatoren gar nichts zu tun haben. Dies besorgt die Voraussetzung der “Irreduzibilität”: Kein Operator außer den Vielfachen der  $\mathbb{1}$  soll mit allen Weyl-Operatoren vertauschen. Damit gilt nun der **von Neumannsche Eindeutigkeitssatz** von 1931:

Sei  $W_\xi$ , für  $\xi$  im  $2d$ -dimensionalen Phasenraum, ein irreduzibles System von unitären Operatoren auf einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$ , die die Weyl-Relationen erfüllen und stetig von  $\xi$  abhängen.

Dann gibt es einen unitären Operator  $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d, dx)$ , sodass die Operatoren  $UW_\xi U^*$  die in Gleichung (5.9) angegebene Form haben.

“Stetigkeit” bedeutet hier, dass alle Matrixelemente  $\langle \Psi, W_\xi \Phi \rangle$  stetig von  $\xi$  abhängen. Eine weitere Voraussetzung ist nur stillschweigend gemacht worden:  $d$  muss *endlich* sein. Der Fall  $d = \infty$  ist durchaus wichtig für die Quantenfeldtheorie, in der es ja um die quantentheoretische Beschreibung unendlich vieler Freiheitsgrade geht. Es gibt dann auch wirklich viele verschiedene (nicht zueinander unitär äquivalente) Realisierungen der Weyl-Relationen, und es braucht einigen Scharfsinn, darunter die (immer noch unendlich vielen) physikalisch relevanten auszusondern.

Wir sehen also, dass auch aus abstrakten Gründen zu jeder affinen symplektischen Transformation ein unitärer Operator gehören muss, der im Allgemeinen nur bis auf eine Phase bestimmt ist. Für die Verschiebungen sind das einfach die Weyl-Operatoren. Von den Operatoren  $U_\theta$  zu den linearen symplektischen Transformationen  $\theta$  haben wir auch schon einige kennengelernt. Hier einige Beispiele:

- (1) Die Transformation  $p \mapsto q, q \mapsto -p$  ist symplektisch. Sie kommt zum Beispiel beim harmonischen Oszillator als Zeitentwicklung für eine Viertelperiode vor. Andererseits kennen wir auch schon einen Operator, der  $P$  und  $Q$  vertauscht (bis auf das unvermeidliche Vorzeichen): die *Fourier-Transformation*. Wir sehen also, dass die Fourier-Transformation sich auch als Oszillator-Drehung um eine Viertelperiode verstehen lässt. Offenbar sind die Oszillator-Eigenfunktionen also auch Eigenfunktionen der Fourier-Transformation zum Eigenwert  $i$ . (Übungsaufgabe: Man finde das zugehörige Integral in [GR80]).
- (2) Die Phasenraumstreckungen  $(q, p) \mapsto (e^{-\tau}q, e^\tau p)$  sind eine einparametrische Gruppe von symplektischen Transformationen. (Man beachte: Kanonische Transfor-

mationen sind bekanntlich volumenerhaltend; Streckung in einer Richtung bedeutet also Stauchung in der anderen). Sie wird erzeugt von der Hamiltonfunktion  $h(q, p) = \sum_{\mu} p_{\mu} q_{\mu}$ . Der zugehörige Operator  $\mathfrak{Q}(h)$  erzeugt gerade die Gruppe der unitären Operatoren

$$(U_{\tau}\Psi)(x) = e^{\tau d/2}\Psi(e^{\tau}x) . \quad (5.90)$$

- (3) Allgemeiner bekommen wir zu jeder invertierbaren linearen Transformation  $D : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$  des Ortsraums den symplektischen Operator  $(q, p) \mapsto (Dq, (D^{-1})^{\top}p)$  und die unitäre Transformation

$$(U_D\Psi)(x) = \det(D)^{-1/2}\Psi(D^{-1}x) . \quad (5.91)$$

Dies schließt offenbar auch die Drehgruppe ein.

- (4) Unter den von uns schon betrachteten Zeitentwicklungsoperatoren gehören zu dieser Klasse diejenigen für das freie Teilchen, das Teilchen im Schwerfeld, den harmonischen Oszillator und das Teilchen im konstanten elektromagnetischen Feld, zusammen mit entsprechenden Versionen für mehr als einen Freiheitsgrad.

Alle Transformationen dieser Art kann man verwenden, um einen gegebenen quadratischen Hamiltonoperator zu vereinfachen: Eine symplektische Transformation der Argumente der Hamiltonfunktion bedeutet ja lediglich eine unitäre Umtransformation der Hamiltonoperatoren. Bei einem Freiheitsgrad lassen sich so alle rein quadratischen Hamiltonoperatoren (kein linearer Term) auf einen der drei Operatoren

$$\frac{\omega}{2}(P^2 + Q^2) , \quad \tau(P^2 - Q^2) \quad \text{und} \quad P^2 \quad (5.92)$$

mit geeigneten Konstanten  $\omega, \tau$  reduzieren. Dass diese drei sich nicht mehr ineinander transformieren lassen, erkennt man am Verhalten der Niveaulinien der klassischen Funktionen.

Allgemeiner kann man die Aufgabe, alle quadratischen Hamiltonfunktionen auf möglichst einfache Form zu reduzieren, als das **symplektische Normalformenproblem** bezeichnen. Es ist analog zu der Aufgabe, die Erzeuger unitärer Gruppen (bis auf unitäre Äquivalenz) anzugeben. Hier kennen wir die Lösung: Die Erzeuger unitärer Gruppen sind hermitesch, und hermitesche Operatoren mit den gleichen Eigenwerten sind (in endlicher Dimension) unitär äquivalent. Genau dies (d.h. Diagonalisierung) haben wir auch benutzt, um Zeitentwicklungen zu berechnen. Leider ist das allgemeine symplektische Normalformenproblem nicht so einfach. In einem in der Physik sehr wichtigen Fall hat es aber eine einfache Lösung: Jede *positive* rein quadratische Hamiltonfunktion lässt sich symplektisch transformieren auf eine Summe von unabhängigen Oszillatoren, d.h.

$$H(q, p) = \sum_{\mu} \frac{\omega_{\mu}}{2} (p_{\mu}^2 + q_{\mu}^2) . \quad (5.93)$$

Positive Hamiltonfunktionen gehören zu **harmonisch gebundenen Systemen**: Zusammen mit der Energieerhaltung verhindert die Positivität der quadratischen Hamiltonfunktion, dass das System ins Unendliche verschwinden kann. (Wir verlangen hier

auch, dass die Funktion außer am Ursprung strikt positiv ist). Beispielsweise gehört die Beschreibung der **Gitterschwingungen** eines Kristalls in linearer Näherung in diese Kategorie. Wir können sofort das Spektrum des zugehörigen Hamiltonoperators angeben: Es besteht aus den Zahlen  $\sum_{\mu} \hbar \omega_{\mu} (n_{\mu} + 1/2)$  mit  $n_{\mu} \geq 0$  und den *klassischen Eigenfrequenzen*  $\omega_{\mu}$ , wie sie auch in der Normalform der Hamiltonfunktion auftreten.

### 5.9.1 \*Faltungen und Fourier-Transformierte von Operatoren

Wir betrachten nun einen Kalkül, der die Beziehungen zwischen klassischen Observablen und Wahrscheinlichkeitsdichten, also Funktionen auf dem Phasenraum, und ihren quantenmechanischen Gegenstücken, den Hilbertraum-Operatoren, kompakt zusammenfasst [Wer84]. Der Grundbegriff ist eine Verallgemeinerung der Faltung von Wahrscheinlichkeitsdichten auf den Fall von Dichteoperatoren, wobei die Faltung einer Funktion mit einem Operator einen Operator ergibt und die Faltung zweier Operatoren eine Funktion.

Wir werden hier zwischen Orts- und Impulskoordinaten nicht unterscheiden müssen, sodass wir alle  $2d$  Koordinaten in einem Vektor (typische Buchstaben  $\xi, \eta$ ) zusammenfassen. Integration über den Phasenraum schreiben wir als  $\int d\xi \dots$ , was schon gleich als richtig normiert zu lesen ist, also als  $(2\pi\hbar)^{-d} \int dq_1 \dots dq_d dp_1 \dots dp_d$ . Mit  $\alpha_{\xi}$  bezeichnen wir die Translationen, also  $\alpha_{\xi}(\rho) = W_{\xi} \rho W_{\xi}^*$  für Operatoren  $\rho$  und  $(\alpha_{\xi} f)(\eta) = f(\eta - \xi)$  für Funktionen  $f$ . Die Wirkung der linearen symplektischen Transformation  $\theta$  schreiben wir als  $\beta_{\theta}$ , was für Funktionen  $(\beta_{\theta} f)(\xi) = f(\theta^{-1}\xi)$  bedeutet und für Operatoren  $\beta_{\theta} \rho = U_{\theta} \rho U_{\theta}^*$ , mit  $U_{\theta}$  der Darsteller der metaplektischen Darstellung. Eventuelle willkürliche Phasenwahlen fallen dabei heraus. Speziell für die Parität  $\theta\xi = -\xi$  schreiben wir einfach  $\beta_{-}$ , wobei  $U_{-} = \Pi$  der bereits früher benutzte Paritätsoperator ist.

Die Faltung zweier Phasenraumfunktionen (vorerst als integrierbar vorausgesetzt) kann man nun auf verschiedene Weisen schreiben nämlich als

$$(f_1 * f_2)(\xi) = \int d\eta f_1(\eta) f_2(\xi - \eta) = \int d\eta f_1(\eta) (\alpha_{\xi} \beta_{-} f_2)(\eta) \quad (5.94)$$

$$f_1 * f_2 = \int d\eta f_1(\eta) \alpha_{\eta} f_2, \quad (5.95)$$

wobei die zweite Form als Gleichung zwischen Funktionen zu lesen ist, das Argument  $\xi$  also weggelassen wurde. Diese Formen sind der Ausgangspunkt für die Erweiterung des Faltungsbegriffes. In (5.94) ersetzen wir “Integral über ein Produkt von Funktionen” durch “Spur über ein Produkt von Operatoren” und bekommen die Funktion

$$(\rho_1 * \rho_2)(\xi) = \text{tr } \rho_1 (\alpha_{\xi} \beta_{-} \rho_2) \quad (5.96)$$

Diesen Ausdruck haben wir in Abschnitt 3.5 schon betrachtet und gezeigt, dass für  $\rho_1 = |\Phi\rangle\langle\Phi|$  und  $\rho_2 = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  die obige Faltung eine integrierbare Funktion ist. In (3.15) hatten wir dafür das Integral nur über die Impulskoordinate berechnet. Diese Aussage überträgt sich auch auf Konvexkombinationen, und da der Ausdruck (5.96) offenbar

positiv ist, erhalten wir die Griffige Aussage, dass die Faltung zweier Dichteoperatoren eine Wahrscheinlichkeitsdichte ist. Als Faltung zwischen einer Funktion und einem Operator gehen wir von (5.95) aus und setzen für jeden Spurklasse-Operator  $\rho$  und jede integrierbare Funktion  $f$

$$\rho * f = f * \rho = \int d\eta f(\eta) \alpha_\eta \rho . \quad (5.97)$$

Auch hier wird aus einer Wahrscheinlichkeitsdichte  $f$  und einem Dichteoperator  $\rho$  wieder ein Dichteoperator. Man kann nun nachrechnen, dass die so entstehende Faltungsoperation kommutativ und assoziativ ist.

Wir können das aber auch einfacher bekommen, indem wir diese kommutative Banachalgebra (wie auch im Allgemeinen möglich) als Funktionenalgebra darstellen, in unserem Fall durch Fourier-Transformation. Für Funktionen definieren wir sie in diesem Fall mit der symplektischen Form im Exponenten. Die allfälligen Faktoren  $2\pi$  sind bereits in der Notation “ $d\xi$ ” absorbiert. Das quantenmechanische Analogon macht aus “überintegrieren mit Exponentialfunktion” wieder “Spur mit einem Exponentialoperator” also hier einem Weyloperator. Also insgesamt

$$(\mathcal{F}f)(\xi) = \int d\eta e^{i\sigma(\xi,\eta)} f(\eta) \quad (5.98)$$

$$(\mathcal{F}\rho)(\xi) = \text{tr } \rho W_\xi . \quad (5.99)$$

Um Verwechslungen vorzubeugen nennen wir (5.98) die **symplektische Fouriertransformation** und (5.99) die **Fourier-Weyl Transformation**, sonst einfach die Fourier-Transformation. Es gilt  $\mathcal{F}(X_1 * X_2) = (\mathcal{F}X_1)(\mathcal{F}X_2)$  für beliebige Funktionen- oder Operatoren  $X_1, X_2$ . Das ist immer noch eine Übungsaufgabe, aber leichter, und hat den Vorteil das Nachrechnen von Kommutativität und Assoziativität zu erübrigen, die ja für das Funktionenprodukt auf der rechten Seite der Gleichung offensichtlich sind. Es gilt übrigens auch die Plancherel-Formel, die ja für Funktionen nichts neues ist, und für Operatoren die Form

$$\int d\xi \overline{(\mathcal{F}\rho_1)(\xi)} (\mathcal{F}\rho_2)(\xi) = \text{tr } \rho_1^* \rho_2 \quad (5.100)$$

annimmt.

Sowohl Operatoren als auch Funktionen haben wieder Funktionen als Fouriertransformierte. Zu jedem Dichteoperator  $\rho$  gehört also eine Funktion mit gleicher Fouriertransformierten. Man nennt dies die **Wigner-Funktion** zu  $\rho$ , und wir bezeichnen sie als  $\mathcal{W}\rho$ . Die Bedingung ist also  $\mathcal{F}\mathcal{W}\rho = \mathcal{F}\rho$ . Da alles, was wir in diesem Abschnitt getan haben, koordinatenfrei war, respektiert die Wignertransformation automatisch beliebige symplektische affine Transformationen, d.h.,  $\mathcal{W}\alpha_\xi = \alpha_\xi \mathcal{W}$  und  $\mathcal{W}\beta_\theta = \beta_\theta \mathcal{W}$ . Um die Funktion praktisch zu berechnen braucht man nur zu wissen, wie man den Wert an der Stelle 0 berechnet: Das weitere folgt dann durch Translation. Da  $\rho \mapsto (\mathcal{W}\rho)(0)$  ein lineares (und wie sich herausstellt beschränktes) Funktional ist, gibt es einen Operator  $W_0$ , sodass  $(\mathcal{W}\rho)(0) = \text{tr } \rho W_0$  und damit allgemeiner:  $(\mathcal{W}\rho)(\xi) = \text{tr } \rho \alpha_\xi(W_0)$ .

Viel Auswahl haben wir bei der Bestimmung von  $W_0$  nicht: Es muss  $\beta_\theta(W_0) = W_0$  für alle  $\theta$  gelten, das heißt,  $W_0$  vertauscht mit *jedem* rein quadratischen Hamiltonoperator. Da bleibt außer  $\mathbb{1}$  nur der Paritätsoperator  $\Pi$ . Die detaillierte Rechnung ergibt noch einen Faktor  $2^d$ . Damit wird die Wignerfunktion

$$(\mathcal{W}\rho)(\xi) = 2^d \operatorname{tr} \rho \alpha_\xi(\Pi) \quad (5.101)$$

Daraus ergeben sich sofort weitere Eigenschaften: Für jedes  $\rho$  ist  $\mathcal{W}\rho$  reell, beschränkt und stetig. Wegen der Plancherel-Formel ist außerdem  $\int d\xi |(\mathcal{W}\rho)(\xi)|^2 = \operatorname{tr}(\rho^* \rho) < \infty$ . Was aber *nicht* folgt, ist, dass  $\mathcal{W}\rho$  positiv ist. Der Paritätsoperator hat ja Eigenwerte  $\pm 1$ . Für jeden normierten Vektor mit  $\Psi(-x) = -\Psi(x)$  und  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  haben wir also  $(\mathcal{W}\rho)(0) = -2^{-d}$ . Wignerfunktionen können also genau so negativ werden, wie sie positiv werden können. Das geht aber nicht überall gleichzeitig, denn wenn wir mit den Integrationsgrenzen vorsichtig genug sind, zum Beispiel immer schön über ganze Kugeln integrieren und deren Radius gegen Unendlich gehen lassen, bekommen wir das Integral  $\operatorname{tr} \rho = +1$ .

Das veranlasst manche Leute, hier von einer **Quasiwahrscheinlichkeits-Dichte** zu sprechen. Was ist dran an dieser Intuition, dass Quantenzustände so etwas wie Wahrscheinlichkeitsdichten im Phasenraum seien, nur eben gelegentlich negativ? Richtig ist wenigstens, dass dies eine konsequent statistische Interpretation stützt, und die Fokussierung auf reine Zustände ein wenig auflöst. Bei Prozessen nahe dem klassischen Limes, bei denen die Observablen auf  $\hbar$ -bezogenen Skalen langsam veränderlich sind, mitteln sich die negativen Anteile heraus: Wenn  $f_i = \mathcal{W}\rho_i$  zwei Wignerfunktionen sind, dann ist  $f_1 * f_2 = \rho_1 * \rho_2 \geq 0$  nach dem oben aufgebauten Faltungskalkül. Wenn also eine beliebige Wignerfunktion mit einer Gaußfunktion gemittelt wird, die der Unschärferelation genügt, wird sie eine echte Wahrscheinlichkeitsdichte. So gesehen sind Negativstellen von  $\mathcal{W}\rho$  Hinweise auf quantiges Verhalten. Auch das sollte man aber nicht überstrapazieren. Die Positivitätsstruktur der Dichtematrizen wird eben doch sehr schlecht durch die Positivitätsstruktur der Quasidichten abgebildet. Der einzige Fall von reinen Zuständen mit positiver Wignerfunktion sind die Gaußfunktionen [Hud74]. Wignerfunktionen sind auch nicht immer integrierbar: Das heißt, eine insgesamt unendlich große negative Wahrscheinlichkeit wird durch insgesamt ebenfalls unendliche positive Wahrscheinlichkeit genau zu 1 kompensiert [Ü5.4].

Es ist also nicht unbedingt direkt definiert, was die Marginalverteilungen von  $\mathcal{W}\rho$  zu Ort- und Impuls sind, weil das Ausintegrieren der anderen Variable mit Vorsicht zu genießen ist. Für glatte und gut abfallende  $\rho$  gibt es da aber keine Frage: Man bekommt genau die quantenmechanischen Verteilungen. Dazu gehen wir direkt zurück auf (3.15).

### 5.9.2 $\circ$ Halbklassische Spektralregel

Durch Berezin-Lieb Ungleichungen nach [Wer84].

## 5.10 Spiegelungen

Häufig sind Symmetrien eines Problems von Interesse, deren Quadrat wieder die Identität ist. Geometrische Beispiele sind Spiegelungen an Punkten, Geraden oder Ebenen. In der Physik kann man an Raumspiegelungen, Zeitumkehr, Vertauschung von Teilchen und Antiteilchen und ähnliches mehr denken. Nach dem Satz von Wigner ist eine Spiegelung durch einen unitären oder antiunitären Operator  $S$  mit  $S^2 = \omega \mathbb{1}$  und  $|\omega| = 1$ . Wir werden sehen, dass es drei Typen von Spiegelungs-Symmetrien in der Quantenmechanik gibt, die allesamt schon beim Qubit, also als Transformationen der Bloch-Kugel auftreten.

Als ersten Typ betrachten wir den Fall  $S$  *unitär*. Wir können  $S$ , ohne die Symmetrietransformation zu ändern, noch durch  $\pm\sqrt{1/\omega} S$  ersetzen und haben dann  $S^2 = \mathbb{1} = S^* S$ . Das heißt, es gilt auch  $S = S^*$  und die Eigenwerte sind  $\pm 1$ .  $S$  ist vollständig durch den Eigenprojektor  $P$  auf den Eigenraum zu  $+1$ , also den Raum der spiegelungs-invarianten Vektoren gegeben nach der Formel  $S = 2P - \mathbb{1}$ . Zwei Spiegelungen  $S_1$  und  $S_2$  lassen sich unitär ineinander transformieren (d.h.,  $S_2 = U S_1 U^*$ ) genau dann, wenn die Eigenprojektoren  $P$  und  $(\mathbb{1} - P)$  die gleiche Dimension haben, wobei in endlicher Dimension natürlich nur eine dieser Bedingungen überprüft werden muss. In diesem Fall lassen sie sich auch ineinander deformieren, denn jeder unitäre Operator lässt sich normstetig mit  $\mathbb{1}$  verbinden. An der Blochkugel wirkt jede unitäre Transformation wie eine dreidimensionale Drehung. Die einzigen Drehungen mit Spiegelungscharakter (außer  $S = \mathbb{1}$ ) sind die Drehungen um  $\pi$ . Geometrisch wirken also unitäre Spiegelungen an der Blochkugel wie Spiegelungen an einer Achse.

Offenbar bleiben nun nur noch antiunitäre Operatoren  $S$ . In diesem Fall lässt sich die Phase von  $S^*$  nicht ändern, indem man eine Phase  $\zeta$  anbringt, denn  $(\zeta S)(\zeta S) = \zeta \bar{\zeta} S^2 = S^2$ . Außerdem ist die Phase  $\omega \mathbb{1} = S^2$  reell, denn  $(\omega \mathbb{1}) S = S^2 S = S^3 = S(\omega \mathbb{1})$ . Es gibt also zwei Möglichkeiten,  $S^2 = +\mathbb{1}$  und  $S^2 = -\mathbb{1}$ .

Als zweiten Typ betrachten wir also  $S$  *antiunitär* mit  $S^2 = +\mathbb{1}$ . Der Prototyp dafür ist die Komplexkonjugation bezüglich einer Basis, also  $S(\sum_\mu c_\mu |\mu\rangle) = \sum_\mu \bar{c}_\mu |\mu\rangle$ , was äquivalent ist zu der Aussage, dass die Basis reell bezüglich  $S$  ist:  $S|\mu\rangle = |\mu\rangle$ . Tatsächlich ist dies schon der allgemeinste Fall. Das heißt, es gibt zu jedem  $S$  eine reelle Basis. Zunächst kann man bezüglich  $S$  jeden Vektor  $\psi$  in Realteil  $\Re\psi = (\psi + S\psi)/2$  und Imaginärteil  $\Im\psi = \Re(-i\psi)$ , sodass  $\psi = \Re\psi + i\Im\psi$  und  $S\psi = \Re\psi - i\Im\psi$ . Wegen  $\langle\varphi, \psi\rangle = \langle S\varphi, S\psi\rangle = \overline{\langle\varphi, \psi\rangle}$  ist das Skalarprodukt reeller Vektoren reell. Wenn wir nun aus Vektoren in  $\Re\mathcal{H} = \{\Re\psi | \psi \in \mathcal{H}\}$  durch Orthogonalisierung eine Basis erzeugen, erhalten wir eine reelle Basis für  $S$ . Wenn  $S_1, S_2$  zwei solche Komplexkonjugationen sind, gilt  $S_2 = U S_1 U^*$  für den unitären Operator  $U$ , der eine  $S_2$ -reelle Basis in eine  $S_1$ -reelle Basis überführt. Angewendet auf die Blochkugel können wir die Komplexkonjugation in der Standard-Basis betrachten. Dann wird jede Dichtematrix  $\rho$  in die komplex konjugierte  $S\rho S^*$  überführt, die gleichzeitig wegen  $\rho = \rho^*$  die transponierte ist. Da die einzige nicht-reelle Pauli-Matrix  $\sigma_2$  ist, wirkt diese Transformation wie die Umkehrung der 2-Komponente jedes Bloch-Vektors, also als Ebenen-Spiegelung an der

(1, 3)-Ebene.

Schließlich betrachten wir den dritten Typ,  $S$  *antiunitär* mit  $S^2 = -\mathbb{1}$ . Solche Spiegelungen bilden jeden Vektor  $\psi$  in einen dazu orthogonalen ab.

*Beweis:* Für irgend einen Vektor  $\varphi$  betrachten wir  $z = \langle \varphi, S\varphi \rangle$ . Dann ist  $z = \langle \varphi, S\varphi \rangle = \overline{\langle S^2\varphi, S\varphi \rangle} = -\overline{\langle \varphi, S\varphi \rangle} = \bar{z}$ . Wenn wir nun  $\varphi$  durch  $\zeta\varphi$  mit einer Phase  $\zeta$  ersetzen, könne wir das Ergebnis auf beiden Seiten wieder durch  $z$  ausdrücken und erhalten  $\bar{\zeta}^2 z = -\zeta^2 \bar{z}$ , also  $z = 0$ , weil  $\zeta$  beliebig ist. ■

Wenn wir durch Orthogonalisierung eine Basis aufbauen bekommen wir zu jedem neuen Vektor  $\varphi$ , der zu den bereits konstruierten orthogonal ist gleich noch einen zweiten, nämlich  $S\varphi$  mit. Das heißt, die Dimension des betrachteten Hilbertraums muss, falls endlich, gerade sein. Direkt sieht man das auch. Dazu schreiben wir  $S = UK$  mit  $K$  der Komplexkonjugation in einer beliebigen Basis. Dann ist  $\det S^2 = \det U \det(KUK) = \det U \det \bar{U} = 1$ , und andererseits  $\det S^2 = \det(-\mathbb{1}) = (-1)^{\dim \mathcal{H}}$ .

Der dritte Typ hängt eng mit den Hamiltonschen **Quaternionen** zusammen, also einer assoziativen, aber nicht kommutativen Erweiterung  $\mathbb{H}$  des komplexen Zahlkörpers um weitere “imaginäre Einheiten”  $j$  und  $k$ , sodass  $i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1$ . Daraus erhält durch Multiplikation mit den Erzeugern  $k = ij = -ji$  und zyklisch in  $(i, j, k)$ , also eine komplette Multiplikationstabelle. Ein allgemeines Quaternion ist eine Linearkombination  $h = a + ib + jc + kd$  mit  $a, b, c, d \in \mathbb{R}$ , wobei reelle Zahlen mit allen Quaternionen vertauschen.

Betrachten wir einen Vektorraum  $\mathcal{H}$  vor, in dem die Multiplikation (von links) mit solchen “Skalaren” erlaubt ist. Für  $i$  nehmen wir die bekannte imaginäre Einheit, sodass  $\mathcal{H}$  schon einmal ein Vektorraum über  $\mathbb{C}$  ist. Das einzige, was wir dann noch definieren müssen, ist der  $\mathbb{R}$ -lineare Operator der Multiplikation mit der Einheit  $j$ , nennen wir ihn  $j\mathbb{1} = S$ . Dieser ist wegen  $ij = -ji$  offenbar antilinear und eine Spiegelung, also genau vom dritten Typ. Die Anti-Unitarität von  $S$  bedeutet dann gerade [Ü!] für beliebige Quaternionen  $h = a + ib + jc + kd$

$$\|h\varphi\|^2 = |h|^2 \|\varphi\|^2, \quad (5.102)$$

wobei

$$|h|^2 = h\bar{h} = \bar{h}h = a^2 + b^2 + c^2 + d^2 \quad \text{with } \bar{h} = a - ib - jc - kd. \quad (5.103)$$

Eine quaternionische Basis ist eine Menge von Vektoren  $e_\alpha$ , sodass sich jeder Vektor als  $\sum_\alpha h_\alpha e_\alpha$  mit  $h_\alpha \in \mathbb{H}$  schreiben lässt. Im komplexen Hilbertraum gedacht sind dann  $e_\alpha$  und  $Se_\alpha$  verschiedene Basiselemente. Wir bekommen also  $\dim_{\mathbb{C}} \mathcal{H} = 2 \dim_{\mathbb{H}} \mathcal{H}$  und damit  $\dim_{\mathbb{C}} \mathcal{H}$  gerade, ganz analog zu  $\dim_{\mathbb{R}} \mathcal{H} = 2 \dim_{\mathbb{C}} \mathcal{H}$ .

Wo kommen nun solche antiunitären Spiegelungen vor? Eine der wichtigen Anwendungen ist die **Zeitumkehr**. Zu einem gegebenen Hamiltonoperator  $H$  wäre das eine Symmetrie  $S$ , sodass  $S \exp(-iHt/\hbar) S^* = \exp(+iHt/\hbar)$  für alle  $t$ . Wäre nun  $S$

unitär, müsste nach Differentiation  $SHS^* = -H$  gelten. Dann aber müsste das Spektrum von  $H$  symmetrisch zur 0 liegen, was praktisch nie vorkommt, weil  $H$  meist eine Grundzustandsenergie besitzt ( $H \geq E_0 \mathbb{1}$ ), aber nach oben unbeschränkt ist. Für einen antiunitären Operator gilt auch  $S(-iH)S^* = +iH$ , aber deswegen eben  $SHS^* = H$ . Dies ist oft leicht zu realisieren. Die einfache Komplexkonjugation in der Ortsdarstellung leistet das Gewünschte, weil analog zur klassischen Bewegungsumkehr in einem Potential  $SQS^* = Q$ ,  $SPS^* = -P$ , und also  $SHS^* = H$  für  $H = P^2/(2m) + V(Q)$ . Interessant ist, dass die magnetischen Hamiltonoperatoren aus [5.8] diese Invarianz nicht erfüllen, wenn man nicht auch das Feld umkehrt.

## Anmerkungen zum Kapitel 5

### Zu Abschnitt 5.1 (Symmetrien)

Eine einigermaßen gründliche Beschreibung der Symmetrien mit der Strahldarstellungsproblematik auf Lehrbuchniveau bringt [Bal98]. Ein Beweis für den Satz von Wigner findet sich in [Gro70]. Allerdings ist die im Skript angegebene Form eher ungewöhnlich (siehe aber Satz 5.18 in [Lud85]). Allen Formen gemeinsam ist: “Eine Symmetrie der ‘wesentlichen Struktur’ der Theorie ist (anti-)unitär implementiert”. Was als wesentliche Struktur angesehen wird, variiert von Autor zu Autor. In der häufigsten Version sind es “Übergangswahrscheinlichkeiten”, also die Ausdrücke  $|\langle \Phi, \Psi \rangle|^2$ , manchmal auch der Verband der Projektionsoperatoren, bei mir: die konvexe Menge der Dichtematrizen.

### Zu Abschnitt 5.2 (Erzeuger)

Der Zusammenhang zwischen einparametrischen Gruppen von Operatoren und ihren Erzeugern ist gut untersucht, und findet sich in den meisten Büchern über Funktionalanalysis. Spezieller dazu fand ich [Dav80, Kat84] nützlich. Allgemeiner zur Darstellung von Lie-Gruppen, also den Gruppen, die sich durch ihre einparametrischen Untergruppen analysieren lassen siehe [12].

### Zu Abschnitt 5.3 (Bahndrehimpuls)

Einige der wichtigen hier abgeleiteten Fakten lassen sich schneller ableiten und besser merken, wenn man die allgemeine Darstellungstheorie der Drehgruppe benutzt, die in Abschnitt 4.7 steht (wenn auch stark gekürzt). Der hier betonte Umstand, dass Kugelflächenfunktionen Orthogonalpolynome sind, ist wohlbekannt, wenn auch in Lehrbüchern nicht so häufig vertreten (aber z.B. in [Gra69]). Er ist auch bei der Untersuchung anderer Gruppen nützlich.

### Zu Abschnitt 5.4 (Spin)

Die irreduziblen Darstellungen der Drehimpuls-Vertauschungsrelationen stehen wieder in fast jedem Buch. Manche Autoren schaffen es dabei allerdings, den Zusammenhang mit der Drehgruppe auszulassen. Für gruppentheoretische Methoden ist [Ham64] ein altmodisches, aber immer noch lesbares Buch für Physiker. Speziell zur Drehgruppe gilt [Edm64] als eine Standardreferenz. Noch tiefer geht [BL81].

### Zu Abschnitt 5.5 (Zentralpotentiale)

Die Theorie der regulären Singularitäten von gewöhnlichen Differentialgleichungen, speziell denen zweiter Ordnung (“Fuchssche Klasse”) tritt bei diversen Standardproblemen der Phy-



sik auf. Gute Referenzen sind [Tes12, Sect. 4.3,4.4] und [Rol03, Kap. 2.9]. Im Mittel der Lehrbuchliteratur ist die übliche Methode, einfach einen Potenzreihenansatz bei  $r = 0$  zu machen und mögliche logarithmische Korrekturen damit einfach zu vergessen. Die eigene Halbbildung als Argument also.

#### **Zu Abschnitt 5.7** (Periodische Potentiale)

Dies steht so ungefähr in jedem Festkörperphysik-Buch, zum Beispiel [AM76, ?]. Für die mathematische Seite gibt es zum Beispiel [RS80, Kap. XIII.16]

#### **Zu Abschnitt 5.8** (Bewegung im Magnetfeld)

Der Gesichtspunkt von Eichtheorien hat sich in der Elementarteilchentheorie als sehr wichtig herausgestellt (Salam/Weinberg-Modell, in dem elektromagnetische und schwache Wechselwirkung vereinigt werden). Der Bohm-Aharonov-Effekt ist relativ ausführlich in [Rol03] diskutiert.

#### **Zu Abschnitt 5.9** (Quadratische Hamiltonoperatoren)

Dieses Thema ist auch bekannt unter der Rubrik “Phasenraum-Quantenmechanik”. Als Einführung kommt [KN91] in Frage. Von Neumann’s Satz steht in der immer noch lesenswerten Arbeit [vN31]. Ein paar nützliche Dinge zur Phasenraum-Quantenmechanik habe ich in [Wer84] zusammengefasst. Das symplektische Normalformenproblem ist natürlich schon ein (altes) Problem der rein klassischen Hamiltonschen Mechanik. Das beste Buch zur klassischen Mechanik, das ich kenne, ist [Arn78]. Die Lösung des allgemeinen Normalformenproblems für quadratische Hamiltonfunktionen ist dort in Appendix 6 wiedergegeben.

#### **Zu Abschnitt 5.10** (Spiegelungen)

## Aufgaben zum Kapitel 5

**Aufgabe 5.1:** Überprüfen Sie die halbklassische Spektralregel für das diskrete Spektrum des Wasserstoffatoms. Das heißt, schätzen Sie für großes  $\lambda$  die Anzahl  $N(\lambda)$  der Eigenwerte  $\leq -R/\lambda$  (unter Berücksichtigung der Vielfachheiten) über das Phasenraumvolumen nach (4.18) ab und vergleichen Sie dies mit dem exakten Ergebnis aus Abschnitt 5.5. [H]

**Aufgabe 5.2:** Überprüfen Sie, dass die Komponenten der Lenz-Runge-Operatoren  $M_\alpha$  mit dem Hamiltonoperator vertauschen. Zeigen Sie, dass durch Anwendung geeigneter  $M_\alpha$  auf die Wellenfunktionen  $\Psi_{3,2,2}$  nach (5.58) ein Eigenvektor mit gleichem  $n$  und  $\ell' = \ell - 1$  entsteht. [H]

**Aufgabe 5.3:** \*Zeigen Sie Wigners [Wig32] ursprüngliche Formel

$$(\mathcal{W}\rho)(q, p) = \quad (5.104)$$

für reine Zustände  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ .

**Aufgabe 5.4:** \*Berechnen Sie die Wignerfunktion für  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ ,  $\Psi = \chi_{[-1,1]}$



# Kapitel 6

## Zusammengesetzte Systeme

### 6.1 Tensorprodukt

Oft müssen wir bei der Modellierung eines quantenmechanischen Systems das System aus mehreren Teilsystemen aufbauen: Aus Elektron&Proton wird dann ein Wasserstoff-Atom und so weiter. Oder wir verfeinern unsere Beschreibung durch Hinzunahme weiterer Freiheitsgrade: Aus einem “Elektron ohne Spin”, wird zusammen mit einer Beschreibung eines isolierten Spinfreiheitsgrads eine Theorie für Elektronen, die den Spin einschließt.

In all diesen Fällen verfahren wir nach der Regel, dass jeder Sorte quantenmechanischer Systeme ein Hilbertraum zugeordnet wird. Sei also  $\mathcal{H}_1 = \mathcal{L}^2(X_1, \mu_1)$  der Hilbertraum der Systemsorte “1”, gleich in einer konkreten Fassung als Raum von quadratintegrierbaren Funktionen und ebenso  $\mathcal{H}_2 = \mathcal{L}^2(X_2, \mu_2)$ . Die Frage lautet also: Wie und in welchem Hilbertraum “ $\mathcal{H}_{1\&2}$ ” sollen wir die Systemsorte “1&2” von Systemen beschreiben, die aus einem Paar von Teilchen/Freiheitsgraden der Sorten 1 und 2 besteht?

Eigentlich haben wir die Frage schon beantwortet, als wir den Raum  $X$ , auf dem die Wellenfunktionen leben, als “Konfigurationsraum” bezeichneten. Die Konfiguration eines Systems aus Elektron&Proton besteht eben aus der Angabe der Koordinaten *beider* Teilchen, also aus einem Paar von Konfigurationen der beiden Teilchensorten. Danach sollten wir also setzen:

$$\mathcal{H}_{1\&2} = \mathcal{L}^2(X_1 \times X_2, \mu_1 \times \mu_2) . \quad (6.1)$$

Das Maß  $\mu_1 \times \mu_2$  ist das sogenannte Produktmaß, und wir definieren es am besten, indem wir gleich angeben, wie das Skalarprodukt in  $\mathcal{H}_{1\&2}$  definiert ist. Das Argument der Wellenfunktionen in  $\mathcal{H}_{1\&2}$  ist ja nun ein Element des Kartesischen Produkts, das heißt ein Paar  $(x_1, x_2)$  mit  $x_1 \in X_1$  und  $x_2 \in X_2$ . Dann setzen wir

$$\langle \Psi, \Phi \rangle = \int \mu_1(dx_1) \mu_2(dx_2) \overline{\Psi(x_1, x_2)} \Phi(x_1, x_2) . \quad (6.2)$$

Die beiden Maße bedeuten hier: erst die Integration bezüglich  $x_2$  ausführen (mit einem  $x_1$ -abhängigen Ergebnis), dann die Integration bezüglich  $\mu_1$ . Nach dem Satz von Fubini ist die Integrationsreihenfolge aber gerade egal (sofern das Integral auch existiert, was in unserem Kontext gilt). Man kann das Maß also durchaus als Integration über die Variable “ $(x_1, x_2)$ ” auffassen.

Im Beispiel Elektron&Proton war  $X_1 = X_2 = \mathbb{R}^3$  mit Lebesgue-Maß “ $d^3x$ ”, und wir bekommen nun als  $\mathcal{H}_{1\&2}$  einfach den Raum  $\mathbb{R}^6$ , wiederum mit seinem Lebesgue-Maß. Dies entspricht genau dem, was wir bekommen, indem wir einfach die Sätze von kanonischen  $P, Q$  Operatoren miteinander vereinigen.

Das zweite Beispiel ist die Zusammensetzung von Orts- und Spinfreiheitsgrad. Der Ortsfreiheitsgrad wird wieder in  $X_1 = \mathbb{R}^3$  beschrieben. Dagegen hatten wir für den Spin den Darstellungsraum der irreduziblen Darstellung von  $SU(2)$  zu  $\ell = \frac{1}{2}$ , also  $\mathcal{H}_2 = \mathbb{C}^2 \cong \ell^2(\{+, -\})$ . Die Symbole  $\pm$  dienen hier nur der Unterscheidung der beiden Basisvektoren in  $\mathbb{C}^2$ . Eine geläufige Sprechweise dafür ist  $+$   $= \uparrow$  = “spin up” und  $-$   $= \downarrow$  = “spin down”. Unsere Wellenfunktionen hängen jetzt also von den beiden Variablen  $x \in \mathbb{R}^3$  und  $\sigma \in \{+, -\}$  ab. Weil es irgendwie schöner aussieht, ist es üblich, die Variable  $\sigma$  als Index an die Wellenfunktion zu schreiben, also  $\Psi_+(x)$  für  $\Psi(x, +)$ . Da das Maß  $\mu_2$  einfach die Summe bedeutet, bekommen wir als Skalarprodukt in  $\mathcal{H}_{1\&2}$ :

$$\langle \Psi, \Phi \rangle = \int dx \sum_{\sigma=\pm} \overline{\Psi_\sigma(x)} \Phi_\sigma(x) . \quad (6.3)$$

Um zum Beispiel aus Basen der Räume  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$  eine Basis von  $\mathcal{H}_{1\&2}$  zu machen brauchen wir eine Zusammensetzungsoperation für Vektoren. Wie schon beim Separationsansatz machen wir entscheidenden Gebrauch von **Produktfunktionen** der Form  $(x_1, x_2) \mapsto \varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2)$ , wobei  $\varphi_1 \in \mathcal{H}_1$  und  $\varphi_2 \in \mathcal{H}_2$ . Wir brauchen eine Notation für diese Produktfunktionen, bei der wir nicht die Argumente explizit benennen müssen. Dazu setzen wir

$$(\varphi_1 \otimes \varphi_2)(x_1, x_2) = \varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2) . \quad (6.4)$$

Führt diese Operation für beliebige  $\varphi_1, \varphi_2$  auf einen Vektor in  $\mathcal{H}_{1\&2}$ ? Dazu berechnen wir gleich das Skalarprodukt allgemeiner Produktvektoren:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_1 \otimes \varphi_2, \psi_1 \otimes \psi_2 \rangle &= \int \mu_1(dx_1) \mu_2(dx_2) \overline{\varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2)} \psi_1(x_1)\psi_2(x_2) \\ &= \left( \int \mu_1(dx_1) \overline{\varphi_1(x_1)} \psi_1(x_1) \right) \left( \int \mu_2(dx_2) \overline{\varphi_2(x_2)} \psi_2(x_2) \right) . \end{aligned} \quad (6.5)$$

In den Faktoren in der letzten Zeile erkennen wir die Skalarprodukte der Räume  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$ . Damit kommen wir zu der zentralen Rechenregel für Tensorprodukte von Vektoren

$$\boxed{\langle \varphi_1 \otimes \varphi_2, \psi_1 \otimes \psi_2 \rangle = \langle \varphi_1, \psi_1 \rangle \langle \varphi_2, \psi_2 \rangle} . \quad (6.6)$$

Insbesondere sind also die Produktfunktionen  $\varphi_1 \otimes \varphi_2$  quadratintegrierbar für beliebige  $\varphi_1, \varphi_2$ . Aus Gleichung (6.6) bekommen wir auch sofort eine Vorschrift zur Konstruktion

von Basen für den Raum  $\mathcal{H}_{1\&2}$ : Wenn  $\varphi_\mu^{(1)} \in \mathcal{H}_1$  und  $\varphi_\alpha^{(2)} \in \mathcal{H}_2$  jeweils Orthonormalbasen sind, so setzen wir

$$\varphi_{\mu,\alpha}^{(1\&2)} = \varphi_\mu^{(1)} \otimes \varphi_\alpha^{(2)} \equiv |\mu\alpha\rangle, \quad (6.7)$$

was nach der Formel (6.6) wieder ein Orthonormalsystem ist, nur eben indiziert durch Paare  $(\mu, \alpha)$ . Dabei haben wir gleich noch die Fortsetzung der Bra-Ket-Notation auf Tensorprodukte angegeben, für den Fall, dass die beiden Basen aus dem Kontext klar sind. Dass (6.7) wieder vollständig ist, sieht man daran, dass man in dieser Basis alle Produktvektoren entwickeln kann, deren lineare Hülle ja ihrerseits dicht in  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  sind. Man kann in (6.7) auch einfach den Spezialfall von (6.1) für diskrete Maßräume sehen.

Durch Abzählen der Basiselemente bekommen wir auch die Dimensionsformel

$$\dim(\mathcal{H}_{1\&2}) = \dim(\mathcal{H}_1) \dim(\mathcal{H}_2). \quad (6.8)$$

Wir haben im letzten Abschnitt schon benutzt, dass sich die Konstruktion von  $\mathcal{H}_{1\&2}$  mit unitärer Isomorphie von Hilberträumen verträgt, das heißt, dass aus Isomorphismen  $\mathcal{H}_1 \cong \mathcal{H}'_1$  und  $\mathcal{H}_2 \cong \mathcal{H}'_2$  auch  $\mathcal{H}_{1\&2} \cong \mathcal{H}'_{1\&2}$  folgt. Mit anderen Worten: die Definition der Zusammensetzungsoperation soll nicht von einer zufälligen Basiswahl abhängen. Am einfachsten zeigt man die Unabhängigkeit von der konkreten Realisierung der Räume  $\mathcal{H}_i$  durch eine “abstrakte” Definition, die diese Realisierungen gar nicht enthält:

Das **Tensorprodukt**  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  zweier Hilberträume  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$  ist “der” Hilbertraum, der Vektoren “ $\varphi_1 \otimes \varphi_2$ ” mit  $\varphi_1 \in \mathcal{H}_1$  und  $\varphi_2 \in \mathcal{H}_2$  enthält, und von ihnen erzeugt wird, und in dem die Rechenregel (6.6) für Skalarprodukte gilt.

Die Anführungszeichen bei  $\varphi_1 \otimes \varphi_2$  bedeuten, dass dies im abstrakten Kontext zunächst nur eine Schreibweise für irgendwelche Vektoren ist, die aus  $\varphi_1$  und  $\varphi_2$  gebildet werden. Das “der” bedeutet, dass man mit der angegebenen Beschreibung zunächst einmal “einen” Hilbertraum konstruieren kann. Das ist bei beliebig gewählten Realisierungen  $\mathcal{H}_i = \mathcal{L}^2(X_i, \mu_i)$  der oben angegebene Raum  $\mathcal{H}_{1\&2}$ . Die Verwendung des bestimmten Artikels behauptet zusätzlich, dass diese Konstruktion eindeutig ist, also dass verschiedene Räume mit dieser Beschreibung unitär äquivalent sind, unter Erhaltung der speziellen Produktvektoren. Diese Behauptung muss natürlich bewiesen werden. Seien also  $\mathcal{H}_{1\&2}$  und  $\widetilde{\mathcal{H}}_{1\&2}$  zwei Räume, die Vektoren  $\varphi_1 \otimes \varphi_2$  und  $\varphi_1 \widetilde{\otimes} \varphi_2$  mit den angegebenen Eigenschaften enthalten. Dann können wir den unitären Operator  $U : \mathcal{H}_{1\&2} \rightarrow \widetilde{\mathcal{H}}_{1\&2}$  durch die Gleichung

$$U(\varphi_1 \otimes \varphi_2) = \varphi_1 \widetilde{\otimes} \varphi_2 \quad (6.9)$$

definieren. Offensichtlich respektiert er Skalarprodukte der Produktvektoren und daher auch Skalarprodukte beliebiger Linearkombinationen solcher Vektoren. (Insbesondere ist er damit auch wohldefiniert, das heißt Linearkombinationen die in  $\mathcal{H}_{1\&2}$  Null sind, also Norm Null haben, werden auf den Nullvektor in  $\widetilde{\mathcal{H}}_{1\&2}$  abgebildet). Da die

Linearkombinationen der Produktvektoren dicht in  $\mathcal{H}_{1\&2}$  liegen sollen und ein Normerhaltender Operator aus konvergenten Folgen wieder konvergente macht, ist  $U$  so auf ganz  $\mathcal{H}_{1\&2}$  definiert. Gleiches gilt für die Abbildung  $\tilde{U}$ , bei der  $\mathcal{H}_{1\&2}$  und  $\tilde{\mathcal{H}}_{1\&2}$  die Rollen tauschen. Und da  $U$  und  $\tilde{U}$  offenbar invers zueinander sind, haben wir die gesuchte unitäre Isomorphie der beiden Räume gefunden. Als  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  können wir also irgendeinen von ihnen nehmen.

Ein Abfallprodukt der abstrakten Definition ist der Nachweis, dass das Produkt-Orthogonalsystem (6.7) auch vollständig, und damit eine Basis ist: Wir müssen beliebige Vektoren durch Linearkombinationen der Basiselemente approximieren. Nach der Definition reicht dafür aber das Entwickeln der Produktvektoren  $\psi_1 \otimes \psi_2$  nach der Basis, was sofort durch Einsetzen der Entwicklungen für  $\psi_1$  und  $\psi_2$  folgt.

Das abstrakte Vorgehen hat auch — wie meistens — den Vorteil, dass weitere Definitionen nicht mit Zufälligkeiten belastet werden müssen. Betrachten wir also als nächstes das Tensorprodukt von Operatoren. Für  $A_1 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1)$  und  $A_2 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$  definieren wir den Operator  $A_1 \otimes A_2 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2)$  durch die Gleichung

$$(A_1 \otimes A_2)(\varphi_1 \otimes \varphi_2) = (A_1\varphi_1) \otimes (A_2\varphi_2) . \quad (6.10)$$

Da  $(A_1 \otimes A_2)$  ja ein linearer Operator sein soll, ist er damit auch auf allen Linearkombinationen von Produktvektoren definiert. Dies ist ein dichter Teilraum von  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ , und durch Limiten wird  $(A_1 \otimes A_2)$  auf dem gesamten Raum  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  bestimmt.

Als Beispiel für ein solches Tensorprodukt nehmen wir den Operator  $P \otimes \mathbb{1}$  auf  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx) = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^2, dx_1 dx_2)$ , wobei  $P = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$  der Impulsoperator für ein eindimensionales Teilchen ist. Wie man leicht durch Anwenden auf Produktfunktionen nachrechnet, ist dann  $P \otimes \mathbb{1} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_1}$ , also der Impulsoperator, der “auf die erste Koordinate wirkt”.

Ein Tensorprodukt von Operatoren lässt sich natürlich auch durch seine Matrixelemente angeben. Direkt aus der Definition folgt unter Berücksichtigung der erweiterten bra-ket-Notation

$$\begin{aligned} (A_1 \otimes A_2)_{\mu\alpha, \mu'\alpha'} &= \langle \mu\alpha | A_1 \otimes A_2 | \mu'\alpha' \rangle \\ &= \langle \mu | A_1 | \mu' \rangle \langle \alpha | A_2 | \alpha' \rangle \\ &= (A_1)_{\mu, \mu'} (A_2)_{\alpha, \alpha'} . \end{aligned} \quad (6.11)$$

Die Indizes an der Produktmatrix, sind also Paare von Indizes. Das Tensorprodukt einer  $3 \times 3$ -Matrix mit einer  $7 \times 7$ -Matrix ergibt also eine  $21 \times 21$ -Matrix. Zur numerischen Verarbeitung solcher Produkte ist es nötig, aus den Paaren von Indizes wieder einfache Indizes zu machen, also alle möglichen Paare irgendwie durchzunummerieren. Einem Programmpaket das ein solches Produkt, gelegentlich auch “Kronecker-Produkt” genannt, anbietet, muss man also sorgfältig auf die Finger schauen.

Rechenregeln für das Tensorprodukt von Operatoren folgen meist leichter aus der basisfreien Definition (6.10). Wir bekommen neben der Linearität in jedem Faktor, die

für alle Tensorprodukte (auch von Vektoren) gilt:

$$(A_1 \otimes A_2)(B_1 \otimes B_2) = (A_1 B_1 \otimes A_2 B_2) \quad (6.12)$$

$$(A_1 \otimes A_2)^* = A_1^* \otimes A_2^* \quad (6.13)$$

$$A_1 \geq 0 \text{ und } A_2 \geq 0 \implies (A_1 \otimes A_2) \geq 0 \quad (6.14)$$

$$\|A_1 \otimes A_2\| = \|A_1\| \|A_2\| \quad (6.15)$$

$$\text{tr}(A_1 \otimes A_2) = (\text{tr } A_1)(\text{tr } A_2) . \quad (6.16)$$

Dabei geht mit der letzten Gleichung der Satz einher, dass das Tensorprodukt von Spurklasse-Operatoren wieder zur Spurklasse gehört.

Schließlich sollte noch erwähnt werden, dass alles, was hier über das Tensorprodukt aus zwei Faktoren gesagt wurde, sofort auf endlich viele Faktoren übertragbar ist. Dabei kommt es auf die Reihenfolge der Faktoren nicht wirklich an:  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  und  $\mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_1$  sind isomorph vermöge des unitären Operators, der  $\varphi_1 \otimes \varphi_2$  in  $\varphi_2 \otimes \varphi_1$  überführt. So gesehen ist das Tensorprodukt  $\bigotimes_{i \in I} \mathcal{H}_i$  einer irgendwie indizierten endlichen Sammlung von Hilberträumen  $\mathcal{H}_i$  eine *ungeordnete* Operation. Dieser Raum wird erzeugt von Vektoren  $\bigotimes_{i \in I} \varphi_i$  mit  $\varphi_i \in \mathcal{H}_i$ , die die Skalarprodukte

$$\langle \bigotimes_{i \in I} \varphi_i, \bigotimes_{i \in I} \psi_i \rangle = \prod_{i \in I} \langle \varphi_i, \psi_i \rangle \quad (6.17)$$

miteinander haben. Auch wenn das für die Definition nicht nötig ist, ist es in manchen Problemen zweckmäßig, eine bestimmte lineare Anordnung der Faktoren (der Indizes  $i \in I$  auszuzeichnen). Das kann auch helfen, die Buchhaltung (welcher Faktor lebt in welchen Raum?) sicherer zu machen.

## 6.2 Interpretation durch statistische Experimente

Operatoren bekommen in der Quantenmechanik ihre Bedeutung immer durch ihre Rolle in der Beschreibung von Observablen und Zuständen. Das Tensorprodukt von Operatoren entspricht dadurch gewissen Operationen auf Observablen und Zuständen. Beginnen wir mit den Ansprechoperatoren  $F$  (mit  $0 \leq F \leq \mathbb{1}$ ), deren Erwartungswerte ja die Ansprechwahrscheinlichkeit von ja/nein-Messungen darstellen. Die Vorschrift für die durch  $F_1 \otimes \mathbb{1}$  beschriebene Messung ist einfach: “Führe die Messung  $F_1$  am System 1 aus, und ignoriere dabei das System 2”. Interessanter sind natürlich Korrelationsmessungen, in denen an beiden Systemen gemessen wird. Der Ansprechoperator  $F_1 \otimes F_2$  entspricht der Vorschrift “Führe die beiden Messungen  $F_1$  an System 1 und  $F_2$  an System 2 aus, und interpretiere als Ansprechen (“ja”-Ereignis) die Fälle, in denen beide Apparate angesprochen haben.” Hier müssen uns wir natürlich vergewissern, dass  $F_1 \otimes F_2$  tatsächlich wieder ein Ansprechoperator ist. Das folgt aus der Zerlegung

$$\mathbb{1} = \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} = F_1 \otimes F_2 + F_1 \otimes (\mathbb{1} - F_2) + (\mathbb{1} - F_1) \otimes F_2 + (\mathbb{1} - F_1) \otimes (\mathbb{1} - F_2) . \quad (6.18)$$

Nach der Positivitätseigenschaft in (6.16) ist jeder der Summanden positiv, und da die letzten drei zusammen positiv sind, folgt auch  $F_1 \otimes F_2 \leq \mathbb{1}$ . Jeder der vier Summanden hat eine direkte statistische Interpretation als Ansprechoperator für ein kombiniertes Ereignis der beiden Apparate. So, wie der erste Summand die Wahrscheinlichkeit für “(ja,ja)” liefert, bestimmt der dritte die Wahrscheinlichkeit für die Ergebniskombination “(nein,ja)”.

Analoge Vorschriften folgen nun (durch Rückführung komplexer Messungen auf ja/nein-Messungen) für die Erwartungswerte von Observablen. Wenn der Operator  $A_i$  den Erwartungswert von Messungen mit einem gewissen Apparat am  $i$ -ten System beschreibt, dann ist  $\text{tr} \rho(A_1 \otimes A_2)$  der Erwartungswert in einem Experiment nach der Vorschrift “Führe die Messungen zu  $A_1$  und  $A_2$  an den Teilsystemen aus, und nimm das *Produkt* der Messwerte als Ergebnis des kombinierten Experiments”. Auch für die entsprechende Vorschrift mit der *Summe* der Messwerte gibt es einen einfachen Operator, nämlich  $(A_1 \otimes \mathbb{1}) + (\mathbb{1} \otimes A_2)$ .

Auch aus Präparationsverfahren für die Teilsysteme lassen sich Verfahren für das zusammengesetzte System aufbauen: Wenn  $\rho_1$  und  $\rho_2$  Präparationen der Teilsysteme beschreiben, dann beschreibt der Operator  $\rho_1 \otimes \rho_2$  das Präparierverfahren: “Wende die beiden Verfahren unabhängig voneinander an, und interpretiere das so erzeugte Paar von Systemen als zusammengesetztes System”. Auch in der klassischen Wahrscheinlichkeitstheorie ist diese Beschreibung sinnvoll und führt auf das Produktmaß, das wir schon in der Definition des Tensorproduktes von  $\mathcal{L}^2$ -Räumen angetroffen haben. Wenn die gemeinsame Wahrscheinlichkeitsverteilung zweier Systeme ein solches Produktmaß ist, sagt man auch die Teilsysteme seien **statistisch unabhängig**. Ganz analog stellt also eine Dichtematrix der Form  $\rho_1 \otimes \rho_2$  die Präparation zweier statistisch unabhängiger Teilsysteme dar. Dass dies für beliebige Dichtematrizen  $\rho_1, \rho_2$  wieder eine Dichtematrix ist, folgt aus den Rechenregeln (6.16) .

Wir können nun aus einem wie beschrieben zusammengesetzten Präparierapparat ( $\rho_1 \otimes \rho_2$ ) und einem zusammengesetzten Messapparat ( $F_1 \otimes F_2$ ) ein ganzes Experiment zusammensetzen. [►Bild!] Nach den gegebenen Beschreibungen ist klar, dass wir dann einfach zwei völlig getrennte Experimente auszuführen haben. Lediglich bei der Auswertung werden die Ergebnisse zusammengebracht und nur die (ja,ja)-Ereignisse als Treffer gezählt. Da die Ergebnisse der Teilexperimente statistisch unabhängig sind, muss also für die Ansprechwahrscheinlichkeit des kombinierten Experiments gelten:

$$\text{tr}((\rho_1 \otimes \rho_2)(F_1 \otimes F_2)) = \text{tr}(\rho_1 F_1) \text{tr}(\rho_2 F_2) . \quad (6.19)$$

Dies folgt auch tatsächlich leicht aus den Rechenregeln (6.16), was die angegebenen Interpretationen bestätigt.

Eine Dichtematrix des Gesamtsystems beschreibt die Statistik aller Messungen am System, also auch die Statistik der Messungen  $F_1 \otimes \mathbb{1}$ , die sich nur auf das erste Teilsystem beziehen. Wenn man sich also nur für solche interessiert, ist es möglich, aus  $\rho$  eine **reduzierte Dichtematrix**  $\rho_1$  für das erste System zu gewinnen, die gerade diese



Information enthält, also

$$\mathrm{tr}(\rho_1 F_1) = \mathrm{tr}(\rho F_1 \otimes \mathbb{1}) \quad (6.20)$$

für alle  $F_1 \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1)$ . Bei klassischen Wahrscheinlichkeitsverteilungen gibt es eine analoge Operation: die Bildung einer **Marginalverteilung** durch Integration über die nicht betrachteten Variablen. Aus dem Integral wird in der Quantenmechanik eine Spur, so dass  $\rho_1$  auch **partielle Spur** von  $\rho$  bezüglich des Hilbertraums  $\mathcal{H}_2$  genannt wird. (Notation:  $\rho_1 = \mathrm{tr}_{\mathcal{H}_2} \rho$ .) Schreibt man diese Operation in Matrixelemente bezüglich zweier Basen aus, so erhält man tatsächlich aus  $\rho_{\mu\alpha, \nu\beta} = \langle \mu\alpha | \rho | \nu\beta \rangle$

$$\begin{aligned} (\rho_1)_{\mu, \nu} &= \langle \mu | \rho_1 | \nu \rangle = \mathrm{tr}(\rho_1 |\nu\rangle\langle\mu|) = \mathrm{tr}(\rho(|\nu\rangle\langle\mu| \otimes \mathbb{1})) \\ &= \sum_{\alpha} \mathrm{tr} \rho(|\nu\rangle\langle\mu| \otimes |\alpha\rangle\langle\alpha|) = \sum_{\alpha} \mathrm{tr} \rho |\nu\alpha\rangle\langle\mu\alpha| = \sum_{\alpha} \rho_{\mu\alpha, \nu\alpha} . \end{aligned} \quad (6.21)$$

Die Spurbildung (Gleichsetzen der Indizes und Summieren) passiert hier also nur bezüglich der Indizes des zweiten Systems. Für Linearkombinationen von Tensorprodukten mit  $A_i \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1)$  und  $B_i \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$  erhalten wir

$$\mathrm{tr}_{\mathcal{H}_2} \left( \sum_i A_i \otimes B_i \right) = \sum_i \mathrm{tr}(B_i) A_i . \quad (6.22)$$

Die reduzierte Dichtematrix  $\rho_1$  ist nicht zu verwechseln mit einem Tensorfaktor von  $\rho$ . Wenn allerdings  $\rho = \rho_1 \otimes \rho_2$ , dann ist dieses  $\rho_1$  auch gleich der reduzierten Dichtematrix. Interessanter sind aber die Fälle, in denen  $\rho$  nicht von Produktform ist, also echte **Korrelationen** enthält. Ein wichtiger Extremfall liegt vor, wenn  $\rho$  sogar ein reiner Zustand ist, also eine schärfstmögliche (nicht weiter konvex entmischbare) Präparation beschreibt, und also von der Form  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  mit  $\Psi \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Dabei ist nun  $\Psi$  im Allgemeinen kein Produktvektor  $\psi_1 \otimes \psi_2$  mehr, sondern eine allgemeine Linearkombination  $\Psi = \sum_i c_{ij} \psi_i^{(1)} \otimes \varphi_j^{(2)}$ . Wir wählen für eine spezielle "Diagonalform", bei der die  $\psi_i^{(1)}$  und  $\varphi_j^{(2)}$  orthonormal, also Teil einer Basis sind, und die Koeffizientenmatrix  $c$  diagonal, also unter Verwendung der ket-Notation

$$\Psi = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |k\alpha\rangle , \quad (6.23)$$

Die reduzierte Dichtematrix  $\rho_1$  ist nun definiert durch  $\mathrm{tr}(\rho_1 F_1) = \langle \Psi, (F_1 \otimes \mathbb{1}) \Psi \rangle$ , was mit der obigen Zerlegung zu

$$\rho_1 = \sum_k |c_k|^2 |k\rangle\langle k| \quad (6.24)$$

wird. Da die  $|k\rangle$  ein Orthonormalsystem bilden, ist dies bereits die *Spektralzerlegung* von  $\rho_1$  und mit den Eigenwerten  $|c_k|^2$ . Wenn also  $\Psi$  kein Produktzustand ist, und damit wenigstens zwei  $c_k$  von Null verschieden sind, dann ist  $\rho_1$  ein *gemischter* Zustand. Daher gilt:

Die Reduktion eines reinen quantenmechanischen Zustands auf ein Teilsystem ist im Allgemeinen nicht mehr rein.

Dies steht im Gegensatz zur klassischen Wahrscheinlichkeitstheorie, in der reine Zustände ja Punktmaße sind: Und ein Punktmaß auf einem kartesischen Produkt ist eben das Produkt der Punktmaße zu den Komponenten des Punktes. In der Quantenmechanik impliziert maximale Kontrolle über das Gesamtsystem also nicht mehr die maximale Kontrolle über die Teile. Wieder anders gesagt: Das Auftreten gemischter Zustände in der Quantenmechanik hat nichts mit schlampiger Präparation zu tun, wie etwa bei den Anfangsbedingungen eines Roulette-Rads.

### 6.3 <sup>o</sup>Verschränkte Zustände

Wir hatten die Diagonalform (6.23) angesetzt um zu zeigen, wie aus reinen Zuständen durch Reduktion Gemische werden. Bei gegebenen Basen ist dies natürlich nicht die allgemeinste Form, denn die Koeffizienten eines Vektors bezüglich der Produktbasis  $\psi_i^{(1)} \otimes \varphi_j^{(2)}$  sind eindeutig bestimmt und bis auf die Normierbarkeitsbedingung beliebig. Wenn aber der Vektor  $\Psi$  gegeben ist, kann man angepasste Basen für die Teilsysteme finden, sodass die Koeffizienten Diagonalform annehmen. Wenn die Koeffizienten sortiert gewählt werden, also  $c_1 \geq c_2 \geq \dots \geq 0$ , dann sind sie auch eindeutig durch  $\Psi$  bestimmt.

*Beweis:* Einen Hinweis auf die Wahl der geeigneten Basen gibt die Berechnung (6.24) der reduzierten Dichtematrix. Wählen wir also die  $c_k$  als die positiven Quadratwurzeln der sortierten Eigenwerte von  $\rho_1$  und  $|k\rangle = \varphi_k^{(1)}$  als die Eigenvektoren. Wir können nun  $\Psi$  in dieser Basis entwickeln, ohne schon eine Basis im zweiten Faktor zu wählen. Dabei wird in einer allgemeinen Form als Linearkombination von Produktvektoren jeweils der erste in der Basis entwickelt, und die Terme im zweiten Faktor neu zusammengefasst. Wir erhalten dann  $\Psi = \sum_k \varphi_k^{(1)} \otimes \tilde{\varphi}_k^{(2)}$  mit eindeutig bestimmten Vektoren  $\tilde{\varphi}_k^{(2)} \in \mathcal{H}_2$  für jedes  $k$ . Wenn wir nun die partielle Spur von  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  bezüglich des zweiten Faktors nehmen bekommen wir

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \text{tr}_{\mathcal{H}_2} |\Psi\rangle\langle\Psi| = \text{tr}_{\mathcal{H}_2} \sum_{k\ell} |\varphi_k^{(1)} \otimes \tilde{\varphi}_k^{(2)}\rangle\langle\varphi_\ell^{(1)} \otimes \tilde{\varphi}_\ell^{(2)}| \\ &= \text{tr}_{\mathcal{H}_2} \sum_{k\ell} |\varphi_k^{(1)}\rangle\langle\varphi_\ell^{(1)}| \otimes |\tilde{\varphi}_k^{(2)}\rangle\langle\tilde{\varphi}_\ell^{(2)}| = \sum_{k\ell} |\varphi_k^{(1)}\rangle\langle\varphi_\ell^{(1)}| \langle\tilde{\varphi}_k^{(2)}|\tilde{\varphi}_\ell^{(2)}\rangle. \end{aligned}$$

Durch Vergleich mit der Spektralzerlegung  $\rho_1 = \sum_k c_k^2 |\varphi_k^{(1)}\rangle\langle\varphi_k^{(1)}|$  bekommen wir also

$$\langle\tilde{\varphi}_k^{(2)}|\tilde{\varphi}_\ell^{(2)}\rangle = \delta_{k\ell} c_k^2. \quad (6.25)$$

Für  $c_k = 0$  ist also auch  $\tilde{\varphi}_k^{(2)} = 0$ . Andernfalls setzen wir  $\varphi_k^{(2)} = c_k^{-1} \tilde{\varphi}_k^{(2)}$  und diese Vektoren bilden ein Orthonormalsystem, das wir zu einer Basis von  $\mathcal{H}_2$  vervollständigen können. Daher ist  $\Psi = \sum_k c_k \varphi_k^{(1)} \otimes \varphi_k^{(2)} = \sum_k c_k |kk\rangle$ . ■

Die Zerlegung (6.23) nennt sich auch **Schmidt-Zerlegung** des Vektors  $\Psi$ , die  $c_k$  sind die Schmidt-Koeffizienten, und die Anzahl der von Null verschiedenen  $c_k$  ist der Schmidt-Rang. Die Ähnlichkeit dieser Terminologie zu der für die Spektralzerlegung einer Dichtematrix, mit dem Rang als der Zahl der von Null verschiedenen Eigenwerte ist kein Zufall, denn schließlich geht es ja praktisch um die Spektralzerlegung der reduzierten Dichtematrix. Etwas abstrakter kann man das auch so sagen: Das Spektrum ist eine *vollständige Invariante* für normale Operatoren bis auf unitäre Äquivalenz, was bedeutet, dass zwei Operatoren  $A, A'$  genau dann durch einen unitären Operator ineinander transformierbar sind ( $A' = U^*AU$ ) sind, wenn ihre Spektren mit Vielfachheit bis auf eine Permutation gleich sind. Entsprechend gilt hier: Zwei Vektoren  $\Psi, \Psi'$  sind gleich bis auf eine Basiswahl in den Faktoren  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$ , d.h. es gibt unitäre Operatoren  $U^{(i)} \in \mathcal{H}_i$  mit  $\Psi' = (U^{(1)} \otimes U^{(2)})\Psi$ , wenn ihre geordneten Schmidt-Spektren gleich sind. Man sieht, dass die beiden Tensorfaktoren in der Definition die gleiche Rolle spielen. Daraus ergibt sich die ansonsten nicht so offensichtliche Tatsache, dass für einen reinen Zustand die von Null verschiedenen Eigenwerte der beiden reduzierten Dichtematrizen gleich sind. Die Summe in der Schmidt-Zerlegung läuft bis zum Schmidt-Rang, der offenbar  $\leq \min\{\dim \mathcal{H}_1, \dim \mathcal{H}_2\}$  sein muss.

Einen reinen Zustand nennt man **verschränkt**, wenn er kein Produktvektor ist, also das Schmidt-Spektrum *nicht* von der Form  $C = (1, 0, \dots)$  ist. Das Schmidt-Spektrum misst also den Unterschied von den Produktvektoren, wie das Spektrum den Unterschied von den reinen Zuständen misst. Es gilt der Merksatz

Ein reiner Zustand ist umso *verschränkter* desto *gemischter* seine reduzierte Dichtematrix ist.

Dies ist erst einmal die heuristische Beschreibung, die die Beobachtung am Ende von Abschnitt 6.2 erweitert. Es ist aber auch ein Theorem [NC00, Thm. 12.15], wenn man mit “ $\rho$  ist gemischter als  $\sigma$ ” meint, dass  $\rho = \sum_i p_i U_i^* \sigma U_i$  mit geeigneten unitären  $U_i$  und  $p_i \geq 0$ , und wenn man mit “ $\Psi$  ist verschränkter als  $\Phi$ ” meint, dass  $\Phi$  aus  $\Psi$  erzeugt werden kann, wenn in den Laboren, die zu  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$  gehören, jeweils beliebige Quantenoperationen erlaubt sind, sowie klassische Kommunikation zwischen den Laboren. Auf dem Hilbertraum  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^d$  ist der *gemischteste* Zustand nach der angegebenen Ordnungsrelation derjenige mit der Dichtematrix  $(1/d)\mathbb{1}$ . Dazu gehören also die *verschränktesten* Vektoren  $\Psi$ . Wir definieren daher: Ein **maximal verschränkter Zustand** ist ein reiner Zustand  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  auf  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  mit  $\dim \mathcal{H}_1 = \dim \mathcal{H}_2 = d$  sodass

$$\langle\Psi|A \otimes \mathbb{1}|\Psi\rangle = \frac{1}{d} \operatorname{tr}(A) . \quad (6.26)$$

Die Schmidt-Zerlegung dazu lautet  $\Psi = d^{-1/2} \sum_k |kk\rangle$ . Dabei ist die Wahl der Basis auf einer Seite völlig willkürlich, den jede Basis ist Eigenbasis von  $\mathbb{1}$ . Wie der Beweis der Schmidt-Zerlegung zeigt, ist aber nach Fixierung der Basis auf einer Seite die zweite Basis eindeutig bestimmt. Bezüglich jedes solchen Basenpaares gilt die Relation

$$(A \otimes \mathbb{1})\Psi = (\mathbb{1} \otimes A^T)\Psi \quad (6.27)$$

wobei  $T$  die (ebenfalls basisabhängige) Transpositionsoperation ist. Wir finden damit:

In einem maximal verschränkten Zustand gibt es zu jeder projektionswertigen Observablen für System 1 eine entsprechende für System 2, sodass die Messwerte vollständig korreliert sind.

Tatsächlich brauchen wir für eine Observable mit Projektoren  $P_x$ ,  $\sum_x P_x = \mathbb{1}$  als Entsprechung nur  $P_x^T$  zu wählen. Dann ist

$$\langle \Psi | P_x \otimes P_y^T | \Psi \rangle = \langle \Psi | P_x P_y \otimes \mathbb{1} | \Psi \rangle = \delta_{xy} \frac{\text{tr } P_x}{d} . \quad (6.28)$$

[►Teleportation] [►Classically correlated states]

## 6.4 \*<sup>o</sup>Komplemente und Kommutanten

Sei ein zusammengesetztes System mit Hilbertraum  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  gegeben. Dann kommutieren per Definition alle Observablen  $A \otimes \mathbb{1}$  des ersten Systems mit allen Observablen  $\mathbb{1} \otimes B$  des zweiten: Dies drückt aus, dass die Teilsysteme in weit getrennten Laboren lokalisiert sein können, und sich daher die Messungen, die die Experimentatoren in den beiden Laboren auswählen, nicht stören und grundsätzlich gemeinsam messbar sind. Interessanterweise gilt hier auch eine Umkehrung: Nehmen wir an, dass irgend eine Observable  $X$  mit allen Messungen des ersten Systems verträglich ist. Dann muss sie schon eine Observable des zweiten Systems sein. Da dabei auch die projektionswertigen Messungen des ersten Systems erlaubt sind, können wir für diesen Zweck Vertauschbarkeit als Kriterium für gemeinsame Messbarkeit benutzen. In Operatoren ausgedrückt:

$$\forall_{A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1)} [X, (A \otimes \mathbb{1})] = 0 \Rightarrow \exists_{B \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)} X = \mathbb{1} \otimes B . \quad (6.29)$$

*Beweis:* Zum Beweis werten wir einfach Matricelemente des Kommutators aus und setzen  $A = |\ell\rangle\langle m|$ :

$$0 = \langle k\mu | [X, |\ell\rangle\langle m| \otimes \mathbb{1}] | n\nu \rangle = \delta_{mn} \langle k\mu | X | \ell\nu \rangle - \delta_{k\ell} \langle m\mu | X | n\nu \rangle . \quad (6.30)$$

Hier setzen wir nun  $m = n = 1$  und bekommen

$$\langle k\mu | X | \ell\nu \rangle = \delta_{k\ell} \langle 1\mu | X | 1\nu \rangle = \langle k\mu | \mathbb{1} \otimes B | \ell\nu \rangle \quad (6.31)$$

mit  $\langle \mu | B | \nu \rangle = \langle 1\mu | X | 1\nu \rangle$ . ■

Manchmal gibt es in der Quantenmechanik— im Gegensatz zur klassischen Wahrscheinlichkeit — eine Umkehrung der Zusammensetzung. Dazu nehmen wir an, dass ein System mit Hilbertraum  $\mathcal{H}$  als “Teilsystem” eines größeren mit Hilbertraum  $\widehat{\mathcal{H}}$  auftritt.

## 6.5 ° Addition von Drehimpulsen

Ähnlich wie hier die Zeittranslationssymmetrie parallel auf beide Teilsysteme angewendet wird, kann man auch mit allgemeineren Symmetrioperationen verfahren. Wenn  $U_g^{(1)}$  und  $U_g^{(2)}$  ( $g \in G$ ) unitäre Darstellungen einer Gruppe sind, dann definieren wir die **Tensorprodukt-Darstellung**  $U = U^{(1)} \otimes U^{(2)}$  der gleichen Gruppe durch  $U_g = U_g^{(1)} \otimes U_g^{(2)}$ . Wieder sind die Erzeuger dieser Darstellungen die Summen der entsprechenden Erzeuger der Teildarstellungen. Für die Drehgruppe bekommen wir beispielsweise die Darstellung, die eine Drehung beider Teilsysteme um die gleiche Achse und den gleichen Winkel beschreibt. Erzeuger ist der Gesamtdrehimpuls, also die Summe der Drehimpulse der Teilsysteme.

Wenn die Darstellungen  $U_g^{(i)}$  irreduzibel sind folgt dies noch nicht für die Produktdarstellung. Speziell für die Drehgruppe ist dies das Thema “Addition von Drehimpulsen”, zu dem wir in diesem Semester nicht mehr kommen werden. Danach wird der Hilbertraum der Darstellung  $U^{(\ell_1)} \otimes U^{(\ell_2)}$  von  $SU(2)$  in eine Summe von invarianten Unterräumen  $\mathcal{H}_\ell$  zerlegt, in denen die Tensorprodukt-Darstellung jeweils wie die irreduzible Darstellung  $U^{(\ell)}$  mit

$$\ell = |\ell_1 - \ell_2|, |\ell_1 - \ell_2| + 1, \dots, (\ell_1 + \ell_2) \quad (6.32)$$

wirkt. Die Eigenwerte von  $\vec{L}^2 = (\vec{L}^{(1)} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \vec{L}^{(2)})^2$  sind also  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ , wobei  $\ell$  die angegebenen Werte durchläuft. Die Matrixelemente der Transformationen, die die Isomorphie zwischen  $U^{(\ell)}$  und der Unterdarstellung von  $U^{(\ell_1)} \otimes U^{(\ell_2)}$  herstellen, heißen **Clebsch-Gordan-Koeffizienten**. Aus den analogen Zusammensetzungsregeln für Tensorprodukte von Darstellungen lässt sich übrigens eine beliebige (kompakte) Gruppe auch wieder rekonstruieren.

## 6.6 Wechselwirkung zusammengesetzter Systeme

Nachdem wir nun den Hilbertraum für zusammengesetzte System kennengelernt haben, wollen wir die Zeitentwicklung solcher Systeme ansehen. Insbesondere sollten wir sagen können, was es bedeutet, dass zwei Teilsysteme miteinander “wechselwirken”.

Der einfachste Fall ist der Fall ohne Wechselwirkung. Dann sollte sich aus den Zeitentwicklungsoperatoren  $U_t^{(1)}$  und  $U_t^{(2)}$  der Teilsysteme ohne weitere Information die Zeitentwicklung des Gesamtsystems ergeben. Die einzig in Frage kommende Bildung eines unitären Operators auf  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  aus diesen beiden ist

$$U_t = U_t^{(1)} \otimes U_t^{(2)} . \quad (6.33)$$

Aus einem unkorrelierten Zustand  $\rho_1 \otimes \rho_2$  wird dann

$$U_t(\rho_1 \otimes \rho_2)U_t^* = (U_t^{(1)} \rho_1 U_t^{(1)*}) \otimes (U_t^{(2)} \rho_2 U_t^{(2)*}) , \quad (6.34)$$

also wieder ein unkorrelierter Zustand, was genau unserer Vorstellung von Zeitentwicklung ohne Wechselwirkung entspricht. Der Hamiltonoperator dazu, also der Erzeuger von  $U_t$ , ergibt sich durch Differentiation als

$$H = (H_1 \otimes \mathbb{1}) + (\mathbb{1} \otimes H_2) . \quad (6.35)$$

Wenn wir den Hamiltonoperator wie üblich als Energieoperator deuten, dann liest sich diese Formel als “Die Energie des Gesamtsystems ist die Summe der Energien der Teilsysteme”. Dies stimmt natürlich mit den Ausdrücken überein, die wir immer schon für Systeme mit mehreren Freiheitsgraden angesetzt hatten.

Führen wir nun in unser System eine **Wechselwirkung** ein! Allgemein geschieht das durch Hinzufügen eines entsprechenden Terms  $H_{12}$  im Hamiltonoperator, also

$$H = (H_1 \otimes \mathbb{1}) + (\mathbb{1} \otimes H_2) + H_{12} . \quad (6.36)$$

Dabei ist  $H_{12}$  nun ein hermitescher Operator auf  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ , der nicht mehr nur auf einem der Tensorfaktoren wirkt. Entsprechend sind die Zeitentwicklungsoperatoren keine Tensorprodukt-Operatoren mehr, und anfänglich unkorrelierte Zustände verlieren unter einer solchen Zeitentwicklung (typischerweise) ihre Produktform sofort und für alle Zeit.

Betrachten wir zunächst wieder ein Wasserstoff-Atom, diesmal aber als wechselwirkendes System aus einem Proton (oder Deuterium-Kern) und einem Elektron. Der Hamiltonoperator ist dann

$$H = \frac{1}{2m_e} \vec{P}_e^2 + \frac{1}{2m_p} \vec{P}_p^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{Q}_e - \vec{Q}_p|} . \quad (6.37)$$

Das Coulomb-Potential ist also hier der Wechselwirkungsterm. Wie in der klassischen Mechanik (und wie in der Vorlesung ausführlicher diskutiert) kann man dieses Zweiteilchenproblem auf ein Einteilchenproblem reduzieren, indem man die Relativkoordinate  $\vec{Q}_r = \vec{Q}_e - \vec{Q}_p$  einführt. Als zweite Koordinate braucht eine geeignete Linearkombination  $\vec{Q}_s = a\vec{Q}_e + b\vec{Q}_p$ . Im Allgemeinen führt das zu einer Form der kinetischen Energie, die noch einen Wechselwirkungsterm  $P_r P_s$  enthält. Nur für die “einzig wahre” Kombination, die Schwerpunktskoordinate  $\vec{Q}_s = (m_e \vec{Q}_e + m_p \vec{Q}_p)/(m_e + m_p)$ , verschwindet dieser Term, und wir bekommen die äquivalente Form

$$H = \frac{1}{2(m_e + m_p)} \vec{P}_s^2 + \frac{1}{2\mu} \vec{P}_r^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{Q}_r|} \quad \text{mit} \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_p} . \quad (6.38)$$

Dies entspricht nun einem nicht wechselwirkenden System aus einem freien Teilchen der Masse  $(m_e + m_p)$  und einem Teilchen der “reduzierten Masse”  $\mu$  im Coulomb-Potential, wie wir es in Abschnitt 4.4 behandelt haben. Wegen des ersten Terms hat dieser Operator übrigens rein kontinuierliches Spektrum, also gar keine diskreten Eigenwerte mehr.

Diese Abspaltung der Schwerpunktsbewegung bringt für mehr als zwei Teilchen keinen durchschlagenden Erfolg mehr. Das Dreikörperproblem (Helium oder  $\text{H}_2^+$ ) ist quantenmechanisch wie klassisch nicht mehr geschlossen lösbar.

Als zweites Beispiel einer Wechselwirkung betrachten wir in einem äußeren elektromagnetischen Feld ein **Teilchen mit Spin**, sagen wir Spin  $1/2$ , und Ladung  $\kappa = -e$ . Den Hilbertraum hatten wir schon als  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3, dx) \otimes \mathbb{C}^2$  angegeben. Als Hamiltonoperator setzt man an

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{P} + \frac{e}{c}\vec{A}(Q))^2 - eV(Q) + \frac{ge}{2mc}\vec{S} \cdot \vec{B}(Q) , \quad (6.39)$$

wobei der erste Term mit einem (nicht ausgeschriebenen) Tensorfaktor “ $\otimes \mathbb{1}$ ” für den Spinraum zu lesen ist und der letzte Term ausführlicher lautet:

$$\vec{S} \cdot \vec{B}(Q) = \sum_{k=1}^3 B_k(Q) \otimes \left(\frac{\hbar}{2}\sigma_k\right) . \quad (6.40)$$

Wenn das Magnetfeld  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$  nicht konstant ist, ist dieser Term nicht von der Form  $A_1 \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes A_2$ , stellt also eine Wechselwirkung zwischen dem Translationsfreiheitsgrad und dem Spinfreiheitsgrad des Teilchens dar. Die Konstante  $g$  ist der sogenannte **gyromagnetische Faktor** oder Landé-Faktor, und stellt eine Teilcheneigenschaft wie Ladung oder Masse dar. Die Konstanten  $e/(2mc)$  werden herausgezogen, um diesen Faktor dimensionslos zu machen. Sie sind so gewählt, weil sich die kinetische Energie für kleines konstantes Magnetfeld als  $1/(2m)P^2 + e/(2mc)\vec{L} \cdot \vec{B}$  schreiben läßt, wobei  $\vec{L}$  der Bahndrehimpuls ist.

Die Schrödingergleichung mit dem Hamiltonoperator (6.39) heißt auch **Pauli-Gleichung**. Man kann sie als phänomenologischen Ansatz für Teilchen mit Spin ansehen, und sich vielleicht auch noch darüber wundern, dass die experimentell zu bestimmende Konstante  $g$  ungefähr 2 ist. Besser ist es, sie als nicht-relativistische Näherung an die Dirac-Gleichung für Elektronen anzusehen. In diesem Fall bekommt man  $g = 2$ . Dies ist aber noch nicht das Ende der Geschichte: Strahlungskorrekturen, d.h. Korrekturen aufgrund der Quantenelektrodynamik schlagen sich auch noch in einer kleinen Modifikation von  $g$  nieder. Man bekommt dann in einer Störungsreihe nach Potenzen von  $1/c$ , bzw. der Feinstrukturkonstante  $\alpha$ :

$$g = 2\left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} - \dots\right) \approx 2.002319304718 . \quad (6.41)$$

Der experimentelle Wert stimmt damit bis zur siebten Stelle überein. Dies ist vielleicht eine der genauesten Vorhersagen der gesamten theoretischen Physik. Das ist erstaunlich, wenn man bedenkt, dass die Quantenelektrodynamik eigentlich nur durch ihre Störungstheorie bei einfachen Problemen bekannt ist, und bis dato keine befriedigende formale (geschweige denn mathematische) Struktur besitzt.

Theorien, in denen **viele Teilchen** miteinander wechselwirken, können aus den gleichen Bausteinen hingeschrieben werden. Zum Beispiel bekommen wir für ein System

aus vielen geladenen Teilchen mit Massen  $m_i$  und Ladungen  $\kappa_i$  (der Einfachheit halber ohne Vernachlässigung von Spins und äußere Felder)

$$H = \sum_i \frac{1}{2m_i} P_i^2 + \sum_{i,j: i < j} \frac{\kappa_i \kappa_j}{4\pi\epsilon_0 |Q_i - Q_j|} . \quad (6.42)$$

Zum Beispiel könnte man alle Kerne und Elektronen in diesem Raum einsetzen. Mit geringen Kenntnissen in Chemie bekommt man das sicher ganz gut hin. Entsprechend kann man für alle Systeme die für die Chemie, die Biologie, die Festkörperphysik, die Gaskinetik oder die allgemeine Kontinuumsmechanik interessant sein könnten Hamiltonoperatoren hinschreiben. Haben wir also hier einen “TOE” (Theory of everything)? Antwort von Radio Eriwan: “im Prinzip ja”. Zumindest ist klar, dass die Elementarteilchenphysik (in der das Akronym TOE geprägt wurde) kaum noch Verbesserungen an dieser Beschreibung anzubringen hätte. Da aber schon das Dreiteilchen-Problem nicht mehr mit analytischen Mitteln lösbar ist, und auch mit der numerischen Behandlungen der Schrödingergleichung bei relativ wenigen Teilchen Schluss ist (Man denke nur an den Speicheraufwand für eine Wellenfunktion in erträglich feiner Diskretisierung auf einem 3000-dimensionalen Konfigurationsraum, also für ein System aus makroskopisch gesehen sehr wenigen Teilchen).

Was kann man also tun? In der Regel wird man die Quantentheorie so lange verstümmeln, bis etwas gerade noch auswertbares herauskommt. Dann betet man, dass man doch noch ein paar Grundzüge des komplexen Systems erfasst hat, und schielt nach dem Experiment, ob von daher vielleicht ein eindeutiger Widerspruch kommt. Wenn der bei einer Verstümmelungsmethode lange genug ausbleibt, wird sie für erlaubt erklärt, und bietet vielen Physikern Brot und Arbeit. Nach einer Weile gehen die speziellen Ausdrücke der verstümmelten Theorie in den allgemeinen physikalischen Sprachgebrauch ein, und werden zu Bestandteilen der allgemeinen physikalischen Intuition. Ein paar Beispiele: In der Chemie macht man in der Regel als erstes die **Born-Oppenheimer**-Näherung, die darauf basiert, dass die Masse aller Kerne groß gegenüber der Masse der Elektronen ist. In nullter Ordnung bedeutet dies, dass die Kerne als klassische Teilchen behandelt werden. Die Grundzustandsenergie der Elektronen bei gegebenen Kernorten liefert dann das Potential, in dem sich die Kerne bewegen. Ohne diese Näherung wäre es ziemlich unklar, was man unter der Struktur eines Moleküls verstehen soll. Haben wir nicht alle in der Schule aus kleinen Kalotten solche Moleküle zusammengesteckt? Wenn man hier darauf hinweist, dass zum Beispiel Ammoniak im Grundzustand eine kohärente Überlagerung (Vektorsumme im Hilbertraum) aus zwei spiegelbildlichen Konfigurationen ist, also in diesem Sinne gar keine Struktur “hat”, wird allen, die sich zu sehr an diese Näherung gewöhnt haben, etwas mulmig. Ein weiteres Beispiel dieser Art ist die **Hartree-Fock**-Methode. Alle Redeweisen, nach denen ein Atom durch Elektronen aufgebaut wird, die verschiedene “Niveaus besetzen”, basieren letzten Endes auf dieser Näherung, die (abgesehen von den Verfeinerungen aus dem nächsten Abschnitt) einen Produkt-Ansatz für die Vielteilchen-Wellenfunktion macht. Natürlich ist das falsch, aber dafür kommt man wenigstens in endlicher Zeit zu Ergebnissen.



## Anmerkungen zum Kapitel 6

### Zu Abschnitt 6.1 (Tensorprodukt)

Tensorprodukte werden auch schon in der linearen Algebra zwischen beliebigen Vektorräumen definiert. Dort ist ein Vektor im Tensorprodukt stets eine *endliche* Linearkombination von Produktvektoren. Für Hilberträume modifiziert man die Definition so, dass auch Limiten dazukommen können. Das heißt, man vervollständigt das Tensorprodukt der linearen Algebra bezüglich der Norm. Ich habe mich um eine direktere Definition bemüht. Eine Blitzumfrage in der Lehrbuchsammlung ergab, dass das Tensorprodukt von einigen Autoren nicht explizit eingeführt wird, sondern nur indirekt über das Postulat mehrerer Sätze vertauschbarer kanonischer Operatoren. (Über den Trennfehler in der Kiste mit der Definition des Produktraums haben wir schon gelacht, bevor man das Trennen einem Algorithmus überließ).

### Zu Abschnitt 6.2 (Interpretation der Zusammensetzung)

Die gravierendsten Unterschiede zwischen klassischer Wahrscheinlichkeitstheorie und Quantenmechanik finden sich gerade bei der Struktur zusammengesetzter Systeme. In der axiomatischen Quantenmechanik bekommt man die Zusammensetzungsregeln aus der Forderung, dass das zusammengesetzte System durch Produktzustände und Produktobservable austestbar sein soll, aber auch die Axiome des jeweiligen axiomatischen Zugangs erfüllen soll. Als Folgerung bekommt man dann die Lösung eines der kniffligsten Probleme der axiomatischen Theorie: nämlich der Begründung für das Auftreten der komplexen Zahlen. Nach den üblichen Axiomen kämen nämlich zunächst auch Hilberträume über  $\mathbb{R}$  oder den Quaternionen in Frage. Nur für Hilberträume über  $\mathbb{C}$  gilt aber die Identität  $\mathcal{B}_h(\mathcal{H}_1) \otimes \mathcal{B}_h(\mathcal{H}_2) \cong \mathcal{B}_h(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2)$ , wobei  $\mathcal{B}_h(\mathcal{H})$  den reellen Vektorraum der *hermiteschen* Operatoren auf  $\mathcal{H}$ , also der Observablen bezeichnet. Für  $\mathbb{R}$  oder die Quaternionen stimmen hier die Dimensionen nicht.

## Aufgaben zum Kapitel 6

**Aufgabe 6.1:** Zeigen Sie die Umkehrung der Aussage nach (6.27): Wenn ein (a priori gemischter) Zustand  $\rho$  zu jeder projektionswertigen Observablen des ersten Systems eine damit vollständig korrelierte Observable des zweiten besitzt, dann ist er maximal verschränkt.  $\vdash H$

**Aufgabe 6.2:** Zeigen Sie, dass folgende Aussagen für einen unitären Operator  $U$  auf  $\mathbb{C}^d \otimes \mathbb{C}^d$  äquivalent sind: (1)  $U$  bildet Produktzustände in eben solche ab. (2)  $U$  bildet klassisch korrelierte Zustände in eben solche ab. (3)  $U$  bildet maximal verschränkte Zustände in eben solche ab. (4)  $U = (U_1 \otimes U_2)$  oder  $U = \Theta(U_1 \otimes U_2)$ .

**Aufgabe 6.3:** *Magische Basis für zwei Qubits.* Betrachten Sie auf  $\mathbb{C}^2$  die unitären Operatoren  $\sigma'_1 = \mathbb{1}$ ,  $\sigma'_1 = \sigma_1$ ,  $\sigma'_2 = i\sigma_2$  und  $\sigma'_3 = i\sigma_3$  und den maximal verschränkten Zustand  $\Omega = (|11\rangle + |22\rangle)/\sqrt{2}$ . Dann sind die Vektoren  $e_{\alpha\beta} = (\sigma'_\alpha \otimes \sigma'_\beta)\Omega$  eine Orthonormalbasis von  $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ . Zeigen Sie: (1) ein unitärer Operator  $U$  hat genau dann die in Aufgabe 6.2 beschriebenen Eigenschaften, wenn er (bis auf eine gemeinsame Phase) in dieser Basis reelle Matricelemente hat. (2) Ein normierter Vektor  $\Psi$  ist maximal

verschränkt genau dann, wenn bis auf eine gemeinsame Phase alle  $\langle e_{\alpha\beta}, \Psi \rangle$  reell sind.  
(3) Eine solche Basis kann es für höhere Dimensionen nicht geben.

# Kapitel 7

## Identische Teilchen

### 7.1 Symmetrisierungs-Postulat

Ein wesentliches Postulat der nichtrelativistischen Quantenmechanik haben wir noch ausgelassen. Es bezieht sich auf die Behandlung von Systemen gleichartiger Teilchen, also etwa vieler Elektronen oder vieler Photonen. Sei also  $\mathcal{H}$  der Hilbertraum, in dem eines dieser Teilchen beschrieben wird. Dann ist nach unseren bisherigen Regeln

$$\mathcal{H}^{\otimes N} = \underbrace{\mathcal{H} \otimes \cdots \mathcal{H}}_{N \text{ Faktoren}} \quad (7.1)$$

der Hilbertraum für  $N$  solche Teilchen. Da die Hilberträume alle gleich sind, können wir eine Symmetrieoperation einführen, die die Faktoren vertauscht. Sei also  $\pi$  eine Permutation der  $N$  Symbole  $\{1, \dots, N\}$ , d.h. eine bijektive Abbildung dieser Menge in sich. Zu jeder solchen “Umordnungsabbildung” definieren wir einen unitären Operator  $U_\pi$  auf  $\mathcal{H}^{\otimes N}$  durch

$$U_\pi \varphi_1 \otimes \cdots \varphi_N = \varphi_{\pi^{-1}(1)} \otimes \cdots \varphi_{\pi^{-1}(N)} . \quad (7.2)$$

Wie üblich ist dieser Operator durch Linearität und Limiten von den Produktvektoren auf ganz  $\mathcal{H}^{\otimes N}$  fortzusetzen. In den Indizes taucht die inverse Permutation zu  $\pi$  auf, damit die Darstellungsrelation  $U_{\pi_1} U_{\pi_2} = U_{\pi_1 \pi_2}$  gilt. Speziell für  $N = 2$  gibt es außer der Identität nur die Permutation, die 1 und 2 vertauscht und dazu den **Flip-Operator** oder den “Transpositionsoperator”  $\Theta : \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$  mit  $\Theta \varphi \otimes \psi = \psi \otimes \varphi$ .

Nun liegt es ja fast schon im Sinn des Wortes Elementarteilchen, dass sich Elementarteilchen gleicher Sorte durch keine Messung voneinander unterscheiden lassen. Sie gleichen sich also noch mehr als ein Ei dem anderen, fast so sehr wie klassische Punktteilchen. Für eine Observable  $A$ , die in der Lage wäre, das Elektron namens Moritz vom Elektron namens Max zu unterscheiden, müssten  $A$  und  $U_\pi^* A U_\pi$  verschieden sein, falls  $\pi$  eine Permutation ist, die Max und Moritz vertauscht. Wir fordern also, dass es eine solche Observable nicht gibt.

**Postulat 6 (erstes Viertel)**

Gleiche Elementarteilchen sind **ununterscheidbar**, d.h. für alle physikalisch realisierbaren Observablen  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}^{\otimes N})$  und alle Permutationen  $\pi$  gilt  $AU_\pi = U_\pi A$ .

Damit haben wir nun erst einmal die mathematische Aufgabe zu lösen, alle Operatoren  $A$  mit dieser Eigenschaft zu bestimmen. Dies ist ein Spezialfall der Aufgabe, alle Operatoren zu bestimmen, die mit allen Darstellern  $U_g$  einer unitären Gruppendarstellung vertauschen. Dabei spielt ganz allgemein die Zerlegung der Darstellung in irreduzible Darstellungen eine entscheidende Rolle.

Betrachten wir den einfachsten Fall  $N = 2$ . Unsere Bedingung lautet dann einfach  $A\Theta = \Theta A$ , wobei  $\Theta$  der Flip-Operator ist. Wegen  $\Theta^2 = \Theta\Theta^* = \mathbb{1}$  ist  $\Theta$  hermitesch und als Eigenwerte kommen nur  $\pm 1$  in Frage. Die zugehörigen Eigenprojektionen lassen sich kompakt als  $P_\pm = \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \Theta)$  schreiben. Offenbar ist  $[A, \Theta] = 0$  äquivalent zu  $[P_\pm, \Theta] = 0$ . Das heißt, wegen  $P_+P_- = 0$  sind in der Zerlegung  $A = P_+AP_+ + P_+AP_- + P_-AP_+ + P_-AP_-$  die mittleren beiden Terme gleich Null. In einer Basis, in der die erste Gruppe von Basisvektoren zu  $P_+(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H})$  gehört, und die zweite Gruppe zu  $P_-(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H})$ , hat  $A$  also die Blockmatrix-Form

$$A = \begin{pmatrix} P_+AP_+ & 0 \\ 0 & P_-AP_- \end{pmatrix}. \quad (7.3)$$

Man sieht leicht, dass diese Form umgekehrt auch die Vertauschbarkeit  $[A, \Theta] = 0$  impliziert.

Um den Zusammenhang mit der Darstellungstheorie der Permutationsgruppe zu sehen, betrachten wir speziell *eindimensionale Darstellungen* einer Gruppe  $G$ . Weil auf dem eindimensionalen Hilbertraum  $\mathbb{C}$  jeder lineare Operator die Multiplikation mit einer Zahl ist, sind eindimensionale Darstellungen einer Gruppe nichts anderes als Zuordnungen  $g \mapsto u(g) \in \mathbb{C}$ , sodass  $u(g_1g_2) = u(g_1)u(g_2)$ . Dies ist genau die Bedingung an die Eigenwerte, die sich daraus ergibt, dass ein Vektor  $\Psi$  gemeinsamer Eigenvektor aller Darsteller  $U_g$  einer Gruppendarstellung ist, also dass  $U_g\Psi = u(g)\Psi$ . Wir sagen dann auch, dass  $\Psi$  sich “nach der Darstellung  $u$  transformiert”. Vektoren, die sich nach verschiedenen Darstellungen transformieren, sind orthogonal, denn sie sind ja Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten eines der unitären (also normalen) Operatoren  $U_g$ .

Im Beispiel  $N = 2$  reicht die Betrachtung eindimensionaler Darstellungen schon aus, denn als abelsche Gruppe hat die Permutationsgruppe von zwei Elementen ohnehin nur eindimensionale irreduzible Darstellungen. (Die Darsteller  $U_g$  vertauschen dann selbst mit allen anderen Darstellern, sind also wegen der Irreduzibilität Vielfache von  $\mathbb{1}$ ). Es gibt hier genau zwei davon, nämlich die **triviale Darstellung**, die für beliebige Gruppen durch  $u(g) = 1$  für alle  $g$  definiert ist, und die **alternierende Darstellung**, für die die Transposition durch die Zahl  $-1$  dargestellt ist. Die Vektoren  $\Phi \in P_+(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H})$  sind gerade die, die sich nach der trivialen Darstellung transformieren, also  $\mathbb{1}\Phi = \Phi$

und  $\Theta\Phi = \Phi$  und damit  $U_\pi\Phi = \Phi$  für alle  $\pi$ . Entsprechend transformieren sich die Vektoren in  $P_-(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H})$  gerade nach der alternierenden Darstellung, also  $\mathbb{1}\Phi = \Phi$  und  $\Theta\Phi = -\Phi$ .

Auch für beliebiges  $N$  hat die Permutationsgruppe genau zwei eindimensionale Darstellungen (und, da sie nicht kommutativ ist, dazu noch mehrdimensionale irreduzible Darstellungen). Zum Beweis betrachten wir die Liste der möglichen Zahlen  $u(\theta_{ij})$ , wobei  $\theta_{ij}$  die Vertauschung von  $i$  und  $j \neq i$  bezeichnet. Da jede Permutation sich als Produkt von Paarvertauschungen schreiben lässt, bestimmt diese Liste jedenfalls jedes  $u(\pi)$ . Allerdings ist nicht jede Liste erlaubt. Eine Konsistenzbedingung erhalten wir aus

$$u(\theta_{12}) = u(\pi)u(\theta_{12})u(\pi^{-1}) = u(\pi\theta_{12}\pi^{-1}) = u(\theta_{\pi(1)\pi(2)}) . \quad (7.4)$$

Da wir zu jedem Paar  $(i, j)$  eine Permutation wählen können, sodass  $i = \pi(1)$  und  $j = \pi(2)$ , ist also  $u(\theta_{ij})$  unabhängig von  $i$  und  $j$ . Für  $u(\theta_{12}) = +1$  bekommen wir wieder die triviale Darstellung und für  $u(\theta_{12}) = -1$  die (nun auf beliebiges  $N$  erweiterte) alternierende Darstellung, für die man auch  $u(\pi) = \text{sign}(\pi)$  schreibt.  $\text{sign}(\pi)$ , das “Vorzeichen” einer Permutation ist also genau dann  $-1$ , wenn  $\pi$  das Produkt einer ungeraden Anzahl von Transpositionen ist und  $+1$ , wenn diese Anzahl gerade ist. Man kann nun leicht überprüfen, dass für eine beliebige Darstellung  $U_\pi$  die Operatoren

$$P_+ = \frac{1}{N!} \sum_{\pi} U_\pi \quad (7.5)$$

$$P_- = \frac{1}{N!} \sum_{\pi} \text{sign}(\pi) U_\pi \quad (7.6)$$

die Projektoren auf die Teilräume von Vektoren sind, die sich nach der trivialen bzw. alternierenden Darstellung transformieren oder, kurz gesagt auf den Raum  $P_+\mathcal{H}^{\otimes N} \equiv \mathcal{H}_+^{\otimes N}$  von **symmetrischen Vektoren** und auf den Raum  $P_-\mathcal{H}^{\otimes N} \equiv \mathcal{H}_-^{\otimes N}$  von **anti-symmetrischen Vektoren**.

Da die  $P_\pm$  Linearkombinationen der  $U_\pi$  sind, vertauscht auch jeder Operator  $A$ , der mit allen  $U_\pi$  vertauscht, auch mit diesen beiden. Allgemeiner gibt es zu jeder irreduziblen Darstellung  $D$  der Permutationsgruppe einen solchen Projektor  $P_D$ , bei dem nur die Funktion  $\text{sign}$  durch eine andere Funktion ersetzt wird (die Spur des Darstellers  $U_\pi^{(D)}$  in der entsprechenden Darstellung, auch **Charakter** der Darstellung genannt). Die Teilräume  $P_D\mathcal{H}^{\otimes N}$ , deren Vektoren sich also “nach der Darstellung  $D$  transformieren”, bestehen möglicherweise noch aus mehreren Kopien des Darstellungsraums  $\mathcal{K}_D$  von  $D$ , das heißt, die irreduzible Darstellung kommt mit einer **Multiplizität**  $m \in \mathbb{N}$  vor. Die beste Art, dies auszudrücken, ist eine unitäre Isomorphie  $P_D\mathcal{H}^{\otimes N} \cong \mathcal{K}_D \otimes \mathcal{M}_D$ , wobei  $\mathcal{M}_D$  ein  $m$ -dimensionaler Hilbertraum ist. Insgesamt erhalten wir damit die Zerlegung

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{\otimes N} &\cong \bigoplus_D \mathcal{K}_D \otimes \mathcal{M}_D \\ U_\pi &\cong \bigoplus_D U^{(D)} \otimes \mathbb{1} \\ V^{\otimes N} &\cong \bigoplus_D \mathbb{1} \otimes V^{(D)} . \end{aligned} \quad (7.7)$$

Dies ist so gemeint, dass die im Symbol “ $\cong$ ” enthaltene unitäre Isomorphie jeweils die gleiche ist. Die dritte Zeile ist ein Bonus für endlich dimensionales  $\mathcal{H}$ , der diese Zerlegung zu einem starken Hilfsmittel für viele Probleme macht, und als **Weyl-Dualität** bekannt ist. Darin ist  $V \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  ein beliebiger unitärer Operator mit Determinante 1 (kurz  $V \in SU(\mathcal{H})$ ). Einerseits vertauschen offenbar unitäre Operatoren der Form  $V^{\otimes N}$  mit allen Permutationen  $U_\pi$ . Die Dualitätsaussage von Weyl ist die Umkehrung: Zu jeder irreduziblen Darstellung der  $D$  der Permutationsgruppe gibt es eine irreduzible Darstellung  $V \mapsto V^{(D)}$  von  $SU(\mathcal{H})$  mit zueinander passenden Zerlegungen in irreduzible Teilräume. Wenn also ein Operator mit allen Permutationen vertauscht, und an diesen sind wir ja gerade interessiert, dann hat er eine Blockmatrix-Zerlegung  $A = \bigoplus_D P_D A P_D$  und der Block  $P_D A P_D$  muss noch mit den Permutationen  $U_\pi^{(D)} \otimes \mathbb{1}$  vertauschen, ist also von der Form  $\mathbb{1} \otimes A_D$ . Insgesamt ist also

$$A = \bigoplus_D \mathbb{1}_{\mathcal{K}_D} \otimes A_D . \quad (7.8)$$

Nach Weyl-Dualität ist das äquivalent dazu, dass  $A$  sich durch Linearkombinationen von Operatoren  $V^{\otimes N}$  approximieren lässt (wobei diese letzte Aussage  $\dim \mathcal{H} < \infty$  voraussetzt).

Damit ist das Postulat der Ununterscheidbarkeit vollständig ausgewertet. Es gibt dabei aber eine kleine Merkwürdigkeit: Wir hatten ja in Postulat 1 aus Abschnitt 1.7 allgemein gefordert, dass es zu jeder Systemsorte einen Hilbertraum geben soll, sodass die Dichtematrizen und hermiteschen Operatoren in diesem Raum genau alle Zustände und Observable des Systems darstellen. Hier sind wir nun von diesem Prinzip abgegangen, indem wir wenn auch aus gutem Grund einige Observable für verboten erklärt haben. Solche Verbote, also Abweichungen von Postulat 1, kommen in der Physik durchaus vor; man nennt sie **Superauswahlregeln**. Für Systeme gleicher Elementarteilchen wird eine solche Ausnahme aber nicht gemacht:

**Postulat 6 (zweites Viertel)**

*Auch für Systeme aus  $N$  gleichen Elementarteilchen gibt es einen Hilbertraum, dessen Dichtematrizen genau den möglichen Zuständen des Systems entsprechen.*

Zusammen mit unserer Auswertung des ersten Viertel-Postulats bedeutet dies, dass wir uns für einen der Blöcke  $P_D A P_D$  entscheiden müssen. Die gesuchten Observablen wären also dann gerade die Operatoren  $A_D \in \mathcal{B}(\mathcal{M}_D)$ . Einfach ist dies dann, wenn  $\dim \mathcal{K}_D = 1$ , also für die beiden oben beschriebenen eindimensionalen Darstellungen. Dann ist der gesuchte  $N$ -Teilchenraum einer der beiden Räume  $\mathcal{H}_\pm^{\otimes N}$ , lässt sich also insbesondere selbst also Teilraum von  $\mathcal{H}^{\otimes N}$  auffassen. Hier haben wir ein bisschen Glück, denn nur diese Möglichkeit kommt vor:

**Postulat 6 (drittes Viertel)**

*Der Hilbertraum für  $N$  gleiche Elementarteilchen ist entweder  $\mathcal{H}_+^{\otimes N}$  für sogenannte **Bosonen** oder  $\mathcal{H}_-^{\otimes N}$  für sogenannte **Fermionen**.*

Auch die nach den ersten zwei Viertel-Postulaten noch erlaubten Möglichkeiten, die also mit mehrdimensionalen Darstellungen der Permutationsgruppe zusammenhängen, sind durchaus diskutiert worden und zwar unter dem Stichwort **Parastatistik**. Eine gute Behandlung der Parastatistik verlangt natürlich auch eine Festlegung der jeweils für verschiedene  $N$  zu wählenden irreduziblen Darstellungen. Es stellt sich dann heraus, dass Parastatistik gar nicht so exotisch ist. Para-Teilchen sind danach nichts anderes als Teilchen mit normaler, also Bose/Fermi-Statistik mit unbeobachtbaren inneren Freiheitsgraden, die aber bei den (Anti-)Symmetrisierungsprojektionen mit zu berücksichtigen sind. Auch für die Teilchen, die allen bisherigen Postulaten gehorchen noch zu klären, welche der beiden Möglichkeiten für welche Sorte Elementarteilchen realisiert ist. Hier gibt es eine einfache Regel die zuerst Pauli aufgefallen ist:

**Postulat 6 (viertes Viertel)**

*Teilchen mit ganzzahligem Spin sind Bosonen. Teilchen mit halbzahligem Spin sind Fermionen.*

Der Unterschied zwischen ganz- und halbzahligem Spin war genau durch den Operator der Drehung um  $2\pi$  bestimmt: Bei halbzahligem Spin ist dies der Operator  $-\mathbb{1}$  und bei ganzzahligem Spin der Operator  $+\mathbb{1}$ . Wir können also unsere Charakterisierung der Hilberträume für  $N$  gleiche Elementarteilchen, in Ergänzung zu Abschnitt 1.7 folgendermaßen zusammenfassen:

**Postulat 6**

*Als Wellenfunktionen eines Vielteilchensystems kommen nur solche Funktionen in Frage, die gemeinsame Eigenfunktionen aller Vertauschungen von je zwei gleichen Elementarteilchen sind. Der Eigenwert zu einer solchen Vertauschung ist der gleiche Faktor, mit dem die Wellenfunktion eines Teilchens dieser Sorte bei der Drehung um  $2\pi$  multipliziert wird, also  $+1$  für Teilchen mit ganzzahligem Spin und  $-1$  für Teilchen mit halbzahligem Spin.*

Es stellt sich natürlich die Frage nach der *Begründung* all dieser teilweise recht willkürlich erscheinenden Postulate. Man kann sich natürlich einfach auf die Erfahrung berufen, denn viele experimentelle Konsequenzen sind hervorragend bestätigt. Aber gerade derart grundlegende Postulate kann man nicht aus der Erfahrung ableiten und eine theoretische Begründung, möglichst aus grundlegenden Prinzipien, bleibt wünschenswert. Der Hinweis, solche Teilchen seien nicht nur “gleich” sondern “identisch” hilft jedenfalls nicht weiter und wirkt eher wie eine etwas hilflose Beschwörungsformel. Insbesondere das letzte Viertel wirkt im Rahmen der nichtrelativistischen Quantenmechanik wie ein Wunder. Die einzig akzeptable Begründung für all die Postulate kommt aus der relativistischen Quantenfeldtheorie, wobei das letzte Viertel unter dem Namen **Spin-Statistik-Theorem** bekannt ist und zuerst von Pauli gezeigt wurde.

In der Feldtheorie treten die Permutationen als Operation auf den Lokalisierungsgebieten von Observablen auf. Es spielt dann eine wichtige Rolle, dass diese Operation

auch durch räumliches Verschieben der Gebiete erreicht werden kann. Diese Eigenschaften sind so allgemein, dass sie auch in Situationen relevant sind, wo von “Vertauschen der Teilchenkoordinaten” gar nicht mehr gesprochen werden kann. In der zweidimensionalen Feldtheorie (eine Raumdimension, eine Zeitdimension) ist es nicht mehr möglich, zwei zueinander raumartige Gebiete ohne Durchdringung aneinander vorbeizuschieben. Als Konsequenz übernimmt die Zopfgruppe die Rolle der Permutationsgruppe. Die Transpositionen spielen hier eine ähnlich fundamentale Rolle, aber ist wird dabei unterschieden, ob der rechte über den linken oder linke über den rechten Faden geführt wird.

Eine Frage, die sich bei Postulat 6 aufdrängt ist: Wenn ich nur in meinem Labor Physik treiben möchte, muss ich dann die Wellenfunktionen meiner Elektronen mit allen anderen im Universum antisymmetrisieren? [► Wird noch ausgeführt]

## 7.2 Fockraum

Im Folgenden behandeln wir den Bose- und den Fermifall so weit wie möglich parallel und unterscheiden diese Fälle durch einen Parameter  $s = +$  für “Bose” oder  $s = -$  für “Fermi”.  $s^\pi$  ist 1 für  $s = +$  und  $s^\pi = \text{sign}(\pi)$  für  $s = -$ . Damit lassen sich die Projektoren (7.5), (7.6) als  $P_s = 1/(N!) \sum_\pi s^\pi U_\pi$  zusammenfassen. Der Raum für  $N$  Teilchen ist  $\mathcal{H}_s^{\otimes N} = P_s \mathcal{H}^{\otimes N}$ . Wir gehen noch einen Schritt weiter und lassen zu, dass die Teilchenzahl selbst zur quantenmechanischen Variable wird. Der  $N$ -Teilchenraum wird also zum Eigenraum des **Teilchenzahl-Operators**  $\mathbf{N}$  zum Eigenwert  $N$  gemacht und der Hilbertraum ist insgesamt der sogenannte **Fockraum**

$$\Gamma_s(\mathcal{H}) = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_s^{\otimes N} \equiv \bigoplus_{N=0}^{\infty} \Gamma_{s,N}(\mathcal{H}) , \quad (7.9)$$

wobei die zweite Gleichung nur noch eine alternative Notation für die  $N$ -Teilchenräume einführt. Der nullte Summand ist dadurch erklärt, dass  $\mathcal{H}^{\otimes 0} = \mathcal{H}_s^{\otimes 0} = \mathbb{C}$ . Man zeichnet oft auch einen speziellen Vektor  $\Omega \in \mathcal{H}_s^{\otimes 0}$  aus, den **Vakuum-Vektor**. Ein Vektor  $\Psi \in \Gamma_s(\mathcal{H})$  hat also eine Komponente  $\Psi_N \in \Gamma_{s,N}(\mathcal{H})$  für jedes  $N$  und die Skalarprodukte werden aufaddiert:  $\langle \Phi, \Psi \rangle = \sum_N \langle \Phi_N, \Psi_N \rangle$ . Der Teilchenzahloperator wirkt dann wie  $(\mathbf{N}\Psi)_N = N\Psi_N$ .

Die Fockraum-Konstruktion macht also aus dem Hilbertraum für ein Teilchen den Hilbertraum für eine unbestimmte Zahl von Bosonen oder Fermionen dieser Sorte. Natürlich wollen wir auch andere Strukturen aus der Einteilchenbeschreibung sinngemäß auf das Vielteilchensystem übertragen. So wird aus dem Hamiltonoperator und der Dynamik in  $\mathcal{H}$  der Hamiltonoperator und die Dynamik eines nicht-wechselwirkenden Vielteilchensystems von Teilchen dieser Sorte. Diesen Übersetzungsprozess nennt man grob irreführend **zweite Quantisierung**. Woher der Begriff historisch kommt, können wir erst später erläutern. Für den Augenblick folgen wir dem berühmten Diktum von Edward Nelson “First quantization is a mystery, second quantization is a functor” [Nel].



Der Begriff Funktor ist in der Kategorientheorie der Ausdruck für eine Transformation von Objekten (hier Hilberträume) zusammen mit einer Vorschrift, die auch die Abbildungen zwischen den Objekten transformiert. In diesem Sinne betrachten wir also jetzt Abbildungen zwischen Hilberträumen und ihre zweite Quantisierung.

Sei also  $A : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$  ein linearer Operator. Dann können wir daraus auf dem unsymmetrisierten  $N$ -Teilchenraum den Operator  $A^{\otimes N} : \mathcal{H}_1^{\otimes N} \rightarrow \mathcal{H}_2^{\otimes N}$  bilden. Offenbar vertauscht dieser Operator mit den jeweiligen Permutationen  $U_\pi^{(i)}$ , also  $U_\pi^{(2)} A^{\otimes N} = A^{\otimes N} U_\pi^{(1)}$ . Deshalb werden auch die (anti-)symmetrisierten Teilräume von  $A^{\otimes N}$  ineinander abgebildet. Wir definieren also den Operator  $\Gamma_s(A) : \Gamma_2(\mathcal{H}_1) \rightarrow \Gamma_2(\mathcal{H}_2)$  durch

$$(\Gamma_s(A)\Psi)_N = A^{\otimes N} \Psi_N . \quad (7.10)$$

Da  $\|A^{\otimes N}\| = \|A\|^N$  kann dieser Operator unbeschränkt werden. Wir fordern also  $\|A\| \leq 1$ , woraus dann auch  $\|\Gamma_s(A)\| \leq 1$  folgt. Als einfache Rechenregeln überprüft man sofort  $\Gamma_s(\mathbb{1}) = \mathbb{1}$ ,  $\Gamma_s(A)^* = \Gamma_s(A^*)$  und  $\Gamma_s(A)\Gamma_s(B) = \Gamma_s(AB)$ .

Da unitäre in unitäre Operatoren übergehen, können wir Symmetrieoperationen sofort vom Einteilchen- auf das Vielteilchen-Niveau übertragen. Dies betrifft alle möglichen Basiswechsel, aber auch z.B. die Zeitentwicklung. Sei also  $U_t = \exp(-itH/\hbar)$ . Dann ist  $t \mapsto \Gamma_s(U_t)$  wieder eine mögliche Zeitentwicklung, eben gerade die eines nicht-wechselwirkenden Vielteilchen-Systems. Den zugehörigen Hamiltonoperator bestimmen wir durch Differentiation:

$$(\mathrm{d}\Gamma_s(H)\Psi)_N = \left( H \otimes \mathbb{1}^{\otimes(N-1)} + \mathbb{1} \otimes H \otimes \mathbb{1}^{\otimes(N-1)} + \dots + \mathbb{1}^{\otimes(N-1)} \otimes H \right) \Psi_N . \quad (7.11)$$

Dies ist im Einklang mit der Beschreibung nicht-wechselwirkender Systeme: Die Energie des Gesamtsystems ist einfach die Summe der Energien aller Teilchen. Nur wird hier alles zusätzlich auf den Raum mit geeigneter Symmetrie eingeschränkt. Natürlich ist (7.11) im Allgemeinen ein unbeschränkter Operator. Speziell bekommen wir  $\mathrm{d}\Gamma_s(\mathbb{1}) = \mathbf{N}$ . Zu dem multiplikativen Funktor  $\Gamma_s$  tritt also hier seine "Ableitung"  $\mathrm{d}\Gamma_s$ , die additiv, also linear in  $H$  ist. Aus dem Zusammenhang mit Gruppendarstellungen klar, aber auch einfach direkt zu verifizieren ist die Kommutatorrelation  $\mathrm{d}\Gamma_s([H, K]) = [\mathrm{d}\Gamma_s(H), \mathrm{d}\Gamma_s(K)]$ .

Wir weichen nun für einen Moment von dem Prinzip ab, den Bose- und den Fermi-Fall parallel zu behandeln. Für den Bose-Fall gibt es eine sehr elegante Konstruktion des Fockraums, die darauf basiert, dass man auch aus einem einzelnen Vektor  $\varphi \in \mathcal{H}$  einen interessanten Vektor in  $\Gamma_+(\mathcal{H})$  machen kann, nämlich den **kohärenten Vektor**

$$e^\varphi = \bigoplus_N \frac{1}{\sqrt{N!}} \varphi^{\otimes N} . \quad (7.12)$$

Dieser Vektor liegt in  $\Gamma_+(\mathcal{H})$ , weil  $U_\pi \varphi^{\otimes N} = \varphi^{\otimes N}$  für alle Permutationen. Die Normierung ist so gewählt, dass

$$\langle e^\varphi, e^\psi \rangle = e^{\langle \varphi, \psi \rangle} . \quad (7.13)$$

Man kann nun zeigen, dass diese exponentiellen Vektoren den ganzen Fockraum aufspannen [Ü!]. Wir können also umgekehrt den Bose-Fockraum definieren als denjenigen Hilbertraum, der von speziellen Vektoren  $e^\varphi$  erzeugt wird, die (7.13) erfüllen. (Vgl. die “abstrakte Definition” des Tensorprodukts in Abschnitt 6.1). Offenbar gilt dann auch

$$\Gamma_+(A)e^\varphi = e^{A\varphi} , \quad (7.14)$$

das heißt, auch die Operatoren  $\Gamma_+(A)$  lassen sich in diesem Kontext definieren.

### 7.3 Basen, Erzeuger, Vernichter

Bevor wir konkret Zustände und Observable betrachten, ist es hilfreich, aus einer Einteilchen-Basis eine zugehörige Basis im Fockraum zu machen.

Wir gehen von einer Basis  $\{e_\mu\} \subset \mathcal{H}$  im Einteilchenraum aus. In  $\mathcal{H}^{\otimes N}$  erhalten wir dann eine Basis aus den Vektoren  $e_{\mu_1} \otimes \cdots \otimes e_{\mu_N} = |\mu_1, \dots, \mu_N\rangle$ . Wenden wir auf diese Vektoren den Projektor  $P_s$  an, erhalten wir auf jeden Fall schon mal eine Menge von Vektoren, die den Unterraum  $\mathcal{H}_s^{\otimes N} \subset \mathcal{H}^{\otimes N}$  aufspannen. Wenn die Tupel  $(\mu_1, \dots, \mu_N)$  und  $(\nu_1, \dots, \nu_N)$  bis auf eine Permutation übereinstimmen, sind auch die Vektoren  $P_s|\mu_1, \dots, \mu_N\rangle$  und  $P_s|\nu_1, \dots, \nu_N\rangle$  bis auf evtl. ein Vorzeichen gleich. Die möglichen Basisvektoren sind also durch die **Besetzungszahlen**

$$n_\nu(\mu_1, \dots, \mu_N) = \#\{i \mid \mu_i = \nu\} \quad (7.15)$$

charakterisiert, die wir im Folgenden zu einem Tupel  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, \dots)$  zusammenfassen. Es gilt natürlich die Nebenbedingung  $\sum_\mu n_\mu = N$ . Im Fermi-Fall kommt eine weitere Bedingung hinzu: Wenn eine der Besetzungszahlen  $\geq 2$  ist, können wir eine Transposition  $\pi_0$  angeben, sodass  $U_{\pi_0}$  den Vektor  $\varphi = |\mu_1, \dots, \mu_N\rangle$  nicht ändert. Damit ist aber  $P_- \varphi = P_- U_{\pi_0} \varphi = -P_- \varphi$ , also  $P_- \varphi = 0$ . Im Fermi-Fall kommen also nur Vektoren mit  $n_\mu \in \{0, 1\}$  in Frage. Dies ist das **Pauli-Prinzip**, das manchmal etwas kryptisch formuliert wird als “Zwei Fermionen können sich nicht im gleichen Zustand befinden”. Zwischen Tupeln mit verschiedenen Besetzungszahlen sind alle Matrixelemente  $\langle \mu_1, \dots, \mu_N | U_\pi | \nu_1, \dots, \nu_N \rangle = 0$ , sodass die symmetrisierten Vektoren orthogonal sind. Wir erhalten also eine Basis in der Form

$$|\mathbf{n}\rangle = c_s(\mathbf{n}) P_s |\mu_1, \dots, \mu_N\rangle , \quad (7.16)$$

wobei  $n_\nu(\mu_1, \dots, \mu_N) = n_\nu$  ist,  $c_s(\mathbf{n})$  ein positiver Normierungsfaktor, und zur Vermeidung von Vorzeichen-Vieldeutigkeiten eine Anordnung  $\mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_N$  gewählt wird. Die Normierungsfaktoren ergeben sich aus

$$1 = \frac{c_s(\mathbf{n})^2}{N!} \sum_\pi s^\pi \langle \mu_1, \dots, \mu_N | U_\pi | \mu_1, \dots, \mu_N \rangle = \frac{c_s(\mathbf{n})^2}{N!} \prod_\nu n_\nu! , \quad (7.17)$$

wobei wir hier die Anzahl der Permutationen zu bestimmen hatten, sodass  $\pi(\mu_1, \dots, \mu_N) = (\mu_1, \dots, \mu_N)$ . Für  $s = -$  ist diese Zahl 1. Wir können dies mit den sogenannten Multiomialkoeffizienten vereinfachen:

$$c_s(\mathbf{n}) = \binom{N}{\mathbf{n}}^{\frac{1}{2}} ; \quad \binom{N}{\mathbf{n}} = \frac{N!}{n_1! n_2! \dots} . \quad (7.18)$$

Falls der Einteilchenraum  $\mathcal{H}$  endlich dimensional ist, ist es auch  $\mathcal{H}_s^{\otimes N}$ . Wir bestimmen die Dimension aus der Anzahl der erlaubten Besetzungszahl-Tupel. Im Fermi-Fall müssen wir einfach die  $N$ -elementige Teilmenge derjenigen  $\nu$  angeben, die in  $(\mu_1, \dots, \mu_N)$  vorkommen. Die Teilmenge ist aus der  $\dim \mathcal{H} = d$ -elementigen Menge der Basis-Label zu wählen, also  $\dim \mathcal{H}_-^{\otimes N} = \binom{d}{N}$ . Insbesondere ist  $\mathcal{H}_-^{\otimes N}$  der Nullraum, falls  $N > d$ . Im Bose-Fall wandeln wir für diese Berechnung die Tupel  $(\nu_1, \dots, \nu_N)$  etwas ab, indem wir zwischen unterschiedlichen Werten zusätzliche Marker  $*$  einführen, also z.B.  $(1, 1, 1, *, 2, 2, *, *, 4, *, \dots, *, d, d)$ . In einem solchen  $N + d - 1$ -Tupel erhalten wir damit  $d - 1$  Marker, und die Position dieser Marker legt die Besetzungszahlen genau fest. Es ergibt sich  $\dim \mathcal{H}_+^{\otimes N} = \binom{N+d-1}{d-1} = \binom{N+d-1}{N} = (-1)^N \binom{-d}{N} = (-1)^N \frac{(-d)(-d-1)\dots(-d-(N-1))}{N!}$  und zusammenfassend bekommen wir

$$\dim \mathcal{H}_{\pm}^{\otimes N} = (\mp 1)^N \binom{\mp d}{N} . \quad (7.19)$$

Man kann den Fockraum auch sukzessive vom Vakuum her aufbauen, indem man jeweils einen Tensorfaktor zu einem  $N$ -Teilchen-Vektor hinzufügt. Wir setzen also für  $\varphi \in \mathcal{H}$  und  $\Psi \in \Gamma_s(\mathcal{H})$ :

$$(a^*(\varphi)\Psi)_N = \sqrt{N} P_s (\varphi \otimes \Psi_{N-1}) \quad (7.20)$$

und  $a^*(\varphi)_0 = 0$ ,  $a^*(\varphi)_1 = \varphi$ . Dieser **Erzeugungsoperator**<sup>1</sup> (auch Erzeuger) erhöht also jeweils die Teilchenzahl um 1. Der Faktor  $\sqrt{N}$  dient der Verbesserung der Kombinatorik und wird für einfache algebraische Eigenschaften dieser Operatoren sorgen. Zunächst gilt

$$(a_s^*(\varphi_1)a_s^*(\varphi_2)\Psi)_N = \sqrt{N(N-1)} P_s (\varphi_1 \otimes \varphi_2 \otimes \Psi_{N-2}) .$$

wobei wir verwendet haben, dass in einem (anti-)symmetrisierten Vektor weitere Symmetrisierungen und Permutationen weggelassen werden können. Daraus ergibt sich die erste grundlegende Vertauschungsrelation

$$\boxed{a_s^*(\varphi_1)a_s^*(\varphi_2) = s a_s^*(\varphi_2)a_s^*(\varphi_1)} . \quad (7.21)$$

Mehrfache Anwendung auf das Vakuum ergibt

$$a_s^*(\varphi_1) \cdots a_s^*(\varphi_N)\Omega = (N!)^{-1/2} P_s(\varphi_1 \otimes \cdots \otimes \varphi_N) , \quad (7.22)$$

---

<sup>1</sup>Engl.: creation operator

also mit Linearkombinationen alle Zustände des  $N$ -Teilchenraums. Der Adjungierte zu einem Erzeugungsoperator, also  $(a^*(\varphi))^* = a(\varphi)$  nennt sich **Vernichtungsoperator**<sup>2</sup> oder Vernichter. Eine explizite Form lässt sich leichter angeben, wenn man auf einen symmetrisierten Produktvektor operiert. Man erhält dann

$$\begin{aligned} a_s(\varphi)P_s(\psi_1 \otimes \cdots \otimes \psi_N) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N s^{k-1} P_s(\psi_1 \otimes \cdots \otimes \psi_{k-1} \otimes \langle \varphi, \psi_k \rangle \psi_{k+1} \otimes \cdots \otimes \psi_N). \end{aligned} \quad (7.23)$$

Dabei haben wir berücksichtigt, dass die Normierungsfaktoren für  $P_s$  auf der rechten Seite derjenige über  $(N-1)$  Faktoren ist, und auf der linken derjenige über  $N$  Faktoren.

Das Produkt aus einem Erzeuger und einem Vernichter erhält die Teilchenzahl. Sowohl  $a_s(\varphi_1)a_s^*(\varphi_2)$  als auch  $a_s^*(\varphi_2)a_s(\varphi_1)$  enthalten bis auf ein Vorzeichen die gleichen Summanden, nämlich Vektoren  $P_s(\varphi \otimes \psi_1 \otimes \cdots \otimes \psi_N)$ , wobei aus diesem Tensorprodukt ein Vektor  $\psi_k$  weggelassen ist und durch den skalaren Faktor  $\langle \varphi_1, \psi_k \rangle$  ersetzt wird. Der einzige Summand, der darüber hinaus in  $a_s(\varphi_1)a_s^*(\varphi_2)$  vorkommt ist der, in dem das Skalarprodukt  $\langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle$  gebildet wird. Die Faktoren  $\sqrt{N}$ , bzw.  $\sqrt{N+1}$  heben sich weg. Damit erhalten wir

$$\boxed{a_s(\varphi_1)a_s^*(\varphi_2) = \langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle \mathbb{1} + s a_s^*(\varphi_2)a_s(\varphi_1)} \quad (7.24)$$

Die Relationen (7.21) und (7.24) zusammen nennt man für  $s = +$  die **kanonischen Vertauschungsrelationen (CCR)** und für  $s = -$  und die **kanonischen Antivertauschungsrelationen (CAR)**.

Oft werden Erzeuger und Vernichter nur für die Elemente einer Einteilchenbasis  $\{\varphi_\mu\} \subset \mathcal{H}$  hingeschrieben, also  $a_\mu = a_s(\varphi_\mu)$  und  $a_\mu^* = a_s^*(\varphi_\mu)$ . Dabei lassen wir jetzt das Vorzeichen  $s$  aus der Notation verschwinden, weil es eigentlich immer aus dem Kontext klar ist. Aus diesen Basis-Erzeugern und Basis-Vernichtern bekommt man alle anderen, weil ja  $\varphi \mapsto a_s^*(\varphi)$  linear und  $\varphi \mapsto a_s(\varphi)$  konjugiert linear ist. Üblich ist es auch, die Bose-Relationen mit Kommutatoren und die Fermi-Relationen mit Antikommutatoren  $\{A, B\} = AB + BA$  zu schreiben. Damit haben wir

$$[a_\mu, a_\nu] = [a_\mu^*, a_\nu^*] = 0 \quad [a_\mu, a_\nu^*] = \delta_{\mu\nu} \quad (\text{CCR})$$

$$\{a_\mu, a_\nu\} = \{a_\mu^*, a_\nu^*\} = 0 \quad \{a_\mu, a_\nu^*\} = \delta_{\mu\nu} \quad (\text{CAR})$$

Eine explizite Form der Erzeuger und Vernichter in der Besetzungszahlbasis ist

$$\begin{aligned} a_\mu^* |\mathbf{n}\rangle &= s^\pi \sqrt{n_\mu + 1} |\mathbf{n} + \delta_\mu\rangle \\ a_\mu |\mathbf{n}\rangle &= s^\pi \sqrt{n_\mu} |\mathbf{n} - \delta_\mu\rangle. \end{aligned} \quad (7.25)$$

Dabei ist  $\delta_\mu$  der Besetzungszahlvektor, der nur eine Eins für das Basiselement  $\mu$  und sonst Nullen hat. Wenn  $n_\mu = 0$ , ist  $a_\mu |\mathbf{n}\rangle = 0$ . Die Permutation  $\pi$ , die hier das Vorzeichen bestimmt, sortiert das Tupel  $(\mu, \nu_1, \dots, \nu_N)$  in aufsteigender Folge, wobei

---

<sup>2</sup>Engl.: annihilation operator

$(\nu_1, \dots, \nu_N)$  ein sortiertes Tupel mit Besetzungszahl  $\mathbf{n}$  ist. Für  $s = +$  ist dieser Faktor natürlich irrelevant. Insbesondere ist also

$$a_\mu^* a_\mu |\mathbf{n}\rangle = n_\mu |\mathbf{n}\rangle , \quad (7.26)$$

der Besetzungszahloperator für das Basiselement  $|\mu\rangle$ . Andererseits können wir die unitäre Gruppe  $U_t$  betrachten, die nur das Basiselement  $|\mu\rangle$  mit einer Phase  $e^{it}$  versieht. Offenbar ist dann  $\Gamma_s(U_t)|\mathbf{n}\rangle = e^{itn_\mu}|\mathbf{n}\rangle$ . Durch Differenzieren bekommen wir daraus  $d\Gamma_s(|\mu\rangle\langle\mu|) = a_\mu^* a_\mu$ . Da die Wahl der Basis beliebig war, gilt allgemein  $d\Gamma_s(|\varphi\rangle\langle\varphi|) = a_s^*(\varphi)a_s(\varphi)$ . Durch Polarisieren (d.h., Einsetzen von Linearkombinationen) können wir weiter folgern, dass  $d\Gamma_s(|\varphi\rangle\langle\psi|) = a_s^*(\varphi)a_s(\psi)$ . Da  $d\Gamma_s$  linear ist, bekommen wir schließlich

$$\boxed{d\Gamma_s(H) = \sum_{\mu\nu} \langle\mu|H|\nu\rangle a_\mu^* a_\nu} . \quad (7.27)$$

Dieser Ausdruck wird fast immer benutzt um den nicht-wechselwirkenden Anteil eines Vielteilchen-Hamiltonoperators zu schreiben, besonders, weil der wechselwirkende Teil in der gleichen Sprache formulierbar ist. Betrachten wir also einen Wechselwirkungsoperator  $V \in \mathcal{B}(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H})$ , der also die Wechselwirkung von je zwei Teilchen beschreiben soll. Natürlich muss dieser mit der Permutation der beiden Teilchen vertauschen. Der gesamte Wechselwirkungsterm auf dem  $N$ -Teilchenraum ist dann

$$V_N = \sum_{i < j} V^{(ij)} , \quad (7.28)$$

wobei  $V^{(ij)}$  die Kopie des Operators ist, die auf den Faktoren  $i$  und  $j$  wirkt, also  $V^{(ij)} = U_\pi(V \otimes \mathbb{1}^{\otimes(N-2)})U_\pi$  mit einer Permutation  $\pi$ , die  $\{1, 2\}$  und  $\{i, j\}$  vertauscht. Der Operator  $V_N$  ist wieder als eingeschränkt auf Vektoren mit der richtigen Symmetrie zu verstehen. Wir möchten nun den Fockraum-Operator  $V_\infty = \bigoplus_N V_N$  in Erzeugern und Vernichtern schreiben. Ähnlich wie  $d\Gamma$  aus einem Einteilchen-Operator den entsprechenden Term für Vielteilchen-Hamiltonoperatoren macht, suchen wir also eine Operation  $V \mapsto d^2\Gamma_s(V) = V_\infty$ , die aus einem Zweiteilchenoperator  $V$  den entsprechenden Wechselwirkungsterm macht. Auch  $d^2\Gamma_s$  ist offenbar linear. Da die Menge der permutationsinvarianten  $V \in \mathcal{B}(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H})$  von den speziellen Operatoren  $A \otimes A$  aufgespannt wird [Ü!], bestimmen wir zunächst  $d^2\Gamma_s(A \otimes A)$ . Nun enthält (7.28) in diesem Fall gerade fast genau die Terme, die wir von  $d\Gamma(A)^2$  erwarten würden. Abgesehen von einem Faktor 2, den wir für die gemischten Termen dieses Quadrats bekommen, fehlen genau die quadratischen Terme. Wir können also schreiben:

$$d^2\Gamma_s(A \otimes A) = \frac{1}{2} \left( d\Gamma(A)^2 - d\Gamma(A^2) \right) . \quad (7.29)$$

Wir setzen nun (7.27) ein und bekommen

$$\begin{aligned} d^2\Gamma_s(A \otimes A) &= \frac{1}{2} \sum \langle \mu_1 \mu_2 | A \otimes A | \nu_1 \nu_2 \rangle \left( a_{\mu_1}^* a_{\nu_1} a_{\mu_2}^* a_{\nu_2} - \delta_{\mu_2 \nu_1} a_{\mu_1}^* a_{\nu_2} \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum \langle \mu_1 \mu_2 | A \otimes A | \nu_1 \nu_2 \rangle s a_{\mu_1}^* a_{\mu_2}^* a_{\nu_1} a_{\nu_2} , \end{aligned}$$

also mit einer weiteren Verwendung der Vertauschungsregeln

$$\boxed{d^2\Gamma_s(V) = \frac{1}{2} \sum \langle \mu_1 \mu_2 | V | \nu_1 \nu_2 \rangle a_{\mu_2}^* a_{\mu_1}^* a_{\nu_1} a_{\nu_2}.} \quad (7.30)$$

Die Erwartungswerte  $\text{tr } \rho d\Gamma(H)$  und  $\text{tr } \rho d^2\Gamma(V)$  in einem beliebigen Zustand  $\rho$  auf dem Fockraum sind lineare Funktionale in  $A$  bzw.  $V$ . Wir können sie durch entsprechende Spurklasse-Operatoren  $R_i(\rho)$  ausdrücken:

$$\text{tr } \rho d\Gamma(H) = \text{tr}_{\mathcal{H}}(R_1(\rho)A) \quad (7.31)$$

$$\text{tr } \rho d^2\Gamma(V) = \text{tr}_{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}}(R_2(\rho)V) \quad (7.32)$$

Dies ist völlig analog der reduzierten Dichtematrix  $\rho \mapsto \rho_1$  aus Abschnitt 6.2. Allerdings ist  $R_1(\rho)$  *nicht* wie eine Dichtematrix normiert, denn  $\text{tr } R_1(\rho) = \text{tr } \rho \mathbf{N}$  ist nicht 1, sondern der Erwartungswert der Teilchenzahl. Wenn  $\rho$  allerdings ein Zustand mit bekannter Teilchenzahl  $N$  ist, kann man die übliche reduzierte Dichtematrix als  $\rho_1 = \frac{1}{N} R_1(\rho)$  schreiben. Normalerweise kann man durch partielle Spur aus einer auf zwei Teilchen reduzierten Dichtematrix die Einteilchen-Dichtematrix gewinnen. Auch das ist hier nicht direkt möglich, da wiederum  $N$ -abhängige Gewichte auftreten.

## 7.4 Zähl-Observable

Wenn man den Observablenbegriff einfach mit selbstadjungierten Operatoren identifiziert und gleich noch mit den Erzeugern von Symmetriegruppen, dann ist der Übergang von  $H$  zu  $d\Gamma_s(H)$  alles, was man über die zweite Quantisierung von Observablen sagen kann. In einem wichtigen Spezialfall haben wir aber schon gesehen, dass das nicht ausreicht. Jede Basis definiert ja eine Observable mit  $F_\nu = |\nu\rangle\langle\nu|$ , wobei das Basislabel  $\nu$  hier die Rolle des Messergebnisses spielt. Daraus wird im Fockraum eine Besetzungszahlbasis, die wir wieder analog als Observable interpretieren können. Deren Messergebnisse sind aber nun nicht die Labels  $\nu$  sondern die Besetzungszahl-tupel  $\mathbf{n}$ . Hier wollen wir diese Überlegung auf beliebige Observable (auch solche mit kontinuierlichem Spektrum oder nicht projektionswertige Observable) verallgemeinern. Aus der Energieobservable wird dann eine Observable, deren Messergebnisse “Besetzungen” der Energieachse sind.

Betrachten wir also eine Observable  $F$  mit Ergebnisraum  $X$ . Wir möchten daraus eine Observable “ $\Gamma_s(F)$ ” für das Vielteilchen-System konstruieren. Sie soll einfach einer Messung von  $F$  an jedem der Teilchen entsprechen. Wir erhalten also jeweils ein Tupel  $(x_1, \dots, x_N) \in X^N$  als Messwert, wobei auch die Gesamtzahl  $N$  der Werte eine zufällige Größe ist. Da die Teilchen ununterscheidbar sind, gelten aber hier alle Permutationen eines Tupels als äquivalent. Wir haben drei Möglichkeiten, dies in den Formalismus einzubringen. (a) Wir ersetzen  $X^N$  durch den Raum  $X^N / \sim$  der Äquivalenzklassen bezüglich Gleichheit bis auf eine Permutation. (b) Wir schränken uns bei

Funktionen, deren Erwartungswert wir bilden, und entsprechend bei Mengen, auf solche ein, die gegenüber Permutation ihrer Argumente invariant sind. Offenbar ist diese Funktionenmenge isomorph zu den Funktionen auf  $X^N / \sim$ . (c) Wir nehmen nicht das Tupel  $(x_1, \dots, x_N)$  als Messergebnis, sondern das **Zählmaß**

$$\begin{aligned}\xi &= \sum_i \delta_{x_i} \\ \xi(A) &= \#\{i | x_i \in A\} \\ \xi[f] &= \sum_{i=1}^N f(x_i) .\end{aligned}\tag{7.33}$$

Anschaulich ist  $\xi$  das Histogramm, das die Häufigkeit erfasst, mit der die Werte  $x \in X$  auftreten. Bei kontinuierlichen Messungen ist diese Häufigkeit meist 0 oder 1, aber wenn man etwas größere Zellen bildet, kommen schnell auch höhere Werte vor. Die Menge der Zählmaße auf  $X$  mit endlicher aber beliebiger Anzahl von Punkten bezeichnen wir mit  $\Gamma X$ . Abstrakt ist dies auch die Menge der Maße  $\xi$ , sodass  $\xi(A) \in \mathbb{N}$  für alle messbaren Teilmengen  $A \subset X$  gilt.

Um die Observable  $\Gamma_s F$  aufzubauen, betrachten wir erst einmal im  $N$ -Teilchen-Fall die Erwartungswerte permutationsinvarianter Funktionen, also Möglichkeit (b) im vorigen Absatz. Diese werden aufgespannt durch die Funktionen der Form  $h^{\otimes N}(x_1, \dots, x_N) = \prod_i h(x_i)$  mit  $h : X \rightarrow \mathbb{C}$ . Für solche Funktionen ist der Erwartungswertoperator der  $N$ -fachen  $F$ -Messung

$$F^{\otimes N}[h^{\otimes N}] = (F[h])^{\otimes N} .\tag{7.34}$$

Durch diese Gleichung ist die  $N$ -Teilchen-Komponente der Observablen  $\Gamma_s(F)$  festgelegt und daher  $\Gamma_s(F)$  durch die direkte Summe dieser Operatoren. Auf der rechten Seite bekommen wir dann  $\Gamma_s(F[h])$ . Auf der linken wird die Observable  $\Gamma_s(F)$  auf eine Funktion  $\tilde{h}$  angewendet, die aus den gemessenen Ergebnissen  $x_1, \dots, x_N$  als  $\prod_i h(x_i)$  zu berechnen ist. Um die Zählmaße ins Spiel zu bringen, ersetzen wir also  $h(x)$  durch  $e^{if(x)}$  und erhalten

$$(\Gamma_s F)(e^{i\xi[f]}) = \Gamma_s(F[e^{if}]) .\tag{7.35}$$

Diese Gleichung bestimmt  $\Gamma_s(F)$  vollständig. Die Auswertung wird erleichtert, wenn wir sie als Analogon zu einer charakteristischen Funktion in der Wahrscheinlichkeitstheorie auffassen. In Abschnitt 2.4.5 haben wir charakteristische Funktionen für Wahrscheinlichkeitsmaße auf endlich dimensional Räumen betrachtet. Der Raum der Zählmaße, in den  $\Gamma(X)$  eingebettet ist, ist aber unendlich dimensional. Deswegen können wir nicht einfach ein Skalarprodukt einführen. Es müssen auch  $x$  und  $p$  nicht im gleichen Raum leben, sondern wir können  $p$  auch als Element des Dualraums auffassen, sodass  $x \cdot p$  als Auswertung eines linearen Funktionals  $p$  auf dem Vektor  $x$  zu lesen wäre. Eigentlich braucht man also zwischen dem Vektorraum auf dem das Maß  $\mu$  lebt und dem Raum aus dem die Argumente  $p$  stammen nur eine passende Bilinearform mit der Eigenschaft, dass  $x$  durch die Gesamtheit der "Skalarprodukte"  $x \cdot p$  eindeutig bestimmt ist. Wir benutzen also die Funktionen  $f : X \rightarrow \mathbb{R}$  als Argumente (wie  $p$ ) für eine charakteristische Funktion und als "Skalarprodukt" das Integral  $\mu[f]$ . In diesem Sinne ist die linke Seite von (7.35) der charakteristische Operator des operatorwertigen

Maßes  $\Gamma_s(F)$ . Durch Spurbildung mit irgendeiner Dichtematrix in  $\Gamma_s(\mathcal{H})$  wird daraus die charakteristische Funktion eines Wahrscheinlichkeitsmaßes auf den Zählmaßen  $\Gamma X$ , das die sogenannte **volle Zählstatistik** darstellt.

Beispiel: Messung in einer Basis.

Sei also  $F$  eine Observable mit einer diskreten Menge von Ergebnissen  $X$ , die durch die Werte  $F_x = F(\{x\})$  auf einzelnen Punkten gegeben ist. Dann ist ein Zählmaß auf  $X$  gerade durch die ganzen Zahlen  $n_x = \xi(\{x\})$  bestimmt und wir bekommen den charakteristischen Operator der gemeinsamen Verteilung dieser Besetzungszahlen

$$(\Gamma_s F)\left(e^{i \sum_x f(x) n_x}\right) = \Gamma_s\left(\sum_x e^{i f(x)} F_x\right). \quad (7.36)$$

Die Ereignismenge  $\Gamma X$  ist dann wieder diskret und wir können den Operator für die Wahrscheinlichkeit für das Besetzungszahlmaß  $\xi = \sum_x n_x \delta_x$  durch inverse Fourier-Transformation hieraus gewinnen, sodass

$$(7.36) = \sum_{\mathbf{n}} (\Gamma_s F)(\{\mathbf{n}\}) e^{i \sum_x f(x) n_x}. \quad (7.37)$$

Wenn jetzt speziell  $X$  eine Basis  $|x\rangle$  von  $\mathcal{H}$  indiziert und  $F_x = |x\rangle\langle x|$ , dann rechnet man mit (7.16) nach, dass  $|\mathbf{n}\rangle$  ein Eigenvektor von (7.36) ist, mit Eigenwert  $e^{i \sum_x f(x) n_x}$ . Damit sind die Besetzungszahlvektoren genau die Zustände mit scharfer Besetzungszahl, und

$$(\Gamma_s F)(\{\mathbf{n}\}) = |\mathbf{n}\rangle\langle \mathbf{n}|. \quad (7.38)$$

◇

Beispiel: Kohärente Zustände.

Betrachten wir einen reinen kohärenten Zustand  $\rho \propto |e^\varphi\rangle\langle e^\varphi|$  mit einem exponentiellen Vektor nach (7.12) und die Messung einer beliebigen zweitquantisierten Observable  $\Gamma_+(F)$ . Wir bekommen dann die charakteristische Funktion

$$\begin{aligned} C(f) &= \frac{\langle e^\varphi, (\Gamma_+ F)(e^{i\xi[f]}) e^\varphi \rangle}{\langle e^\varphi, e^\varphi \rangle} = \frac{\langle e^\varphi, \Gamma_+(F[e^{if}]) e^\varphi \rangle}{\langle e^\varphi, e^\varphi \rangle} \\ &= \exp\left(\langle \varphi, F[e^{if}] \varphi \rangle - \langle \varphi, \varphi \rangle\right) \\ &= \exp \mu[e^{if} - 1] \end{aligned} \quad (7.39)$$

mit dem Maß

$$\mu(A) = \langle \varphi, F(A) \varphi \rangle. \quad (7.40)$$

Sei nun  $X$  in disjunkte Mengen  $X_\alpha$  zerlegt. Dann wird auch jede Funktion  $f = \sum_\alpha f \chi_{X_\alpha} = \sum_\alpha f_\alpha$  in Summanden zerlegt, von denen immer höchstens einer  $\neq 0$  ist. Daher gilt auch  $e^{if} - 1 = \sum_\alpha (e^{if_\alpha} - 1)$  und  $C(f) = \prod_\alpha C(f_\alpha)$ . Mit anderen Worten: die Zählstatistiken in den Teilmengen  $X_\alpha$  sind statistisch unabhängig. Die Besetzungszahl jeder Teilmenge ist nach der Poissonschen Wahrscheinlichkeitsverteilung  $p(n)$  mit Mittel  $m = \mu(X_\alpha)$  verteilt, denn für  $f \in \mathbb{R}$ :

$$\sum_n p(n) e^{inf} = \sum_n \frac{e^{-m} m^n}{n!} e^{inf} = \exp(m(e^{if} - 1)). \quad (7.41)$$



Die Wahrscheinlichkeitsverteilung mit charakteristischer Funktion (7.39) nennt man den **Poissonschen Punktprozess** mit **Intensitätsmaß**  $\mu$ .  $\diamond$

Wie bei Wahrscheinlichkeitsverteilungen über einem endlich dimensionalen Vektorraum kann man Momente einer Zählstatistik durch Differentiation der charakteristischen Funktion gewinnen. Sei also  $\mathbb{P}$  ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf  $\Gamma X$  mit charakteristischer Funktion  $C(f) = \mathbb{P}[e^{i\xi[f]}]$ . Das erste Moment von  $\mathbb{P}$  ist einfach ein Maß  $\mathbf{m}_1$  auf  $X$  mit

$$\mathbf{m}_1[f] = \frac{d}{dt} C(tf)|_{t=0} = \mu[\xi[f]] . \quad (7.42)$$

Die Interpretation ist einfach: In jedem Einzelexperiment erhalten wir einen Schwarm von Punkten in der Menge  $X$ . Dann ist  $\mathbf{m}_1(S)$  für jede Teilmenge  $S \subset X$  die mittlere Zahl von solchen Punkten in  $S$ . Bei einer zweitquantisierten Zählobservable  $\Gamma_s F$ , gemessen im Zustand  $\rho$  ist dies

$$\mathbf{m}_1[f] = \text{tr } \rho d\Gamma_s(F[f]) = \text{tr } R_1(\rho)F[f] \quad (7.43)$$

Höhere Momente, die man entsprechend durch höhere Ableitungen aus der charakteristischen Funktion erhält, beschreiben dann die Korrelationen zwischen zwei und mehr Punkten im Schwarm. Wir betrachten sie genauer in Abschnitt 7.7.

## 7.5 Spurformel und Quasifreie Zustände

Kann man auch Zustände der zweiten Quantisierung unterwerfen? Das heißt: Gibt es zu einem gegebenen Einteilchenzustand  $\rho$  einen natürlichen Zustand auch für das nicht wechselwirkende Vielteilchensystem? Bei  $N$  unterscheidbaren Teilchen kann man dies bejahen: Der Dichteoperator  $\rho^{\otimes N}$  beschreibt die unabhängige Präparation von  $N$ -Teilchen auf die gleiche Weise. Nun ist aber dies keine Präparation von Bosonen oder Fermionen, wenn  $\rho$  nicht gerade rein ist und also  $\rho^{\otimes N}$  ein Bose-Zustand. Natürlich können wir den Operator auf  $\mathcal{H}_{\pm}^{\otimes N}$  einschränken, dann ist er aber nicht mehr normiert. Abgesehen von der Normierungsfrage und der Teilchenzahlabhängigkeit heben wir dann gerade einen Operator der Art  $\Gamma(\rho)$ . Wir definieren also zu einem positiven Spurklasse-Operator  $\rho$  den **quasifreien Zustand** durch den Dichteoperator

$$\mathcal{Q}_s(\rho) = \frac{\Gamma_s(\rho)}{\text{tr } \Gamma_s(\rho)} . \quad (7.44)$$

Intuitiv ist dies also ein Zustand mit der richtigen Bose/Fermi-Symmetrie, der der unabhängigen Präparation von Teilchen im Zustand  $\rho$  am nächsten kommt. Gleichzeitig haben wir hier den Normierungsfaktor von  $\rho$  freigegeben: Dieser wird über die Teilchenzahlverteilung entscheiden. Nehmen wir zum Beispiel den Gibbs-Zustand<sup>3</sup>  $\rho = \exp(-\beta(H - \mu\mathbb{1}))$ , wobei  $H$  der Einteilchen-Hamiltonoperator ist,  $\beta$  die inverse

<sup>3</sup>Hier wird zur Motivation die Terminologie der Statistischen Mechanik verwendet, was für manche Leser einen Vorgriff darstellt, also erst im zweiten Durchgang klarer werden wird.

Temperatur und  $\mu$  ein Parameter, der über die Normierung von  $\rho$  Einfluss auf die Teilchenzahlverteilung hat. Für imaginäres  $\beta$  haben wir  $\Gamma_s$  auf einen solchen Operator schon angewendet, um die Vielteilchen-Zeitentwicklung zu bekommen. Man vergewissert sich leicht (zum Beispiel durch Aufstellen einer Differentialgleichung nach  $\beta$ ), dass wir die entsprechende Formel direkt übertragen können, also

$$\Gamma_s(\rho) = e^{-\beta(d\Gamma(H) - \mu\mathbf{N})} \quad (7.45)$$

Damit ist  $\mathcal{Q}_s(\rho)$  die sogenannte **großkanonische Gesamtheit** aus der Statistischen Mechanik mit dem **chemischen Potential**  $\mu$ . Der Normierungsfaktor, die sogenannte Zustandssumme, spielt dort eine entscheidende Rolle. Wir werden sehen, dass die entsprechende Formel auch die Berechnung aller Erwartungswerte der Observablen des letzten Abschnitts erlaubt. Der relevante Ausdruck ist

$$\boxed{\text{tr } \Gamma_s(A) = \det(\mathbb{1} - sA)^{-s}}. \quad (7.46)$$

Dabei wird vorausgesetzt, dass  $A$  ein Operator der Spurklasse ist und im Bose-Fall ( $s = +1$ ) zusätzlich, dass  $\|A\| < 1$ . Die Spurklassebedingung ist allein schon deshalb nötig, damit die Spur über den Einteilchenraum sinnvoll ist. Andererseits ist sie nötig, damit die Determinante auf der rechten Seite definiert werden kann. In einem unendlich dimensional Hilbertraum kann man die ja schlecht direkt durch eine Summe über Permutationen oder als alternierende Multilinearform definieren. Was eher geht, ist die Determinante als (hier unendliches) Produkt der Eigenwerte zu verstehen. Damit ein unendliches Produkt  $\prod_{i=1}^{\infty} x_i$  aber existiert, muss  $\sum_i |x_i - 1| < \infty$  sein. Dies wird gerade durch die Spurklassenbedingung garantiert. Tatsächlich wird die Determinante in meiner besten Quelle zu dem Thema [Sim05] genau durch die obige Formel (für  $s = -1$ ) *definiert*. Dass im Bose-Fall eine weitere Bedingung nötig wird, damit  $\Gamma_s(A)$  selbst ein Spurklasse-Operator wird, sieht man an dem Beispiel  $A = |\varphi\rangle\langle\varphi|$  mit einem nicht normierten Vektor  $\varphi$ . Dann ist die  $N$ -Teilchen-Komponente von  $\Gamma_+(A)$  der Operator  $|\varphi^{\otimes N}\rangle\langle\varphi^{\otimes N}|$ , mit Norm  $\|\varphi\|^{2N}$ . Wenn  $\|\varphi\| > 1$  ist dieser Operator sogar unbeschränkt, weshalb wir den  $\Gamma_s$ -Funktorkomplex allgemein auf  $\|A\| \leq 1$  eingeschränkt hatten. Aber auch für  $\|\varphi\| = 1$  divergiert die Spur, was auf der rechten Seite wegen  $\det(1 - |\varphi\rangle\langle\varphi|) = 0$  zum undefinierten Ausdruck  $0^{-1}$  führt.

Zur Begründung der Spurformel (7.46) betrachten wir erst einmal den Fall eines normalen Operators in seiner Eigenbasis-Zerlegung  $A = \sum_k a_k |k\rangle\langle k|$ . Wir werten dann die Spur in der entsprechenden Besetzungszahlbasis aus und benutzen, dass  $\Gamma_s(A)|\mathbf{n}\rangle = \prod_k a_k^{n_k}$  ist. Damit wird

$$\text{tr } \Gamma_s(A) = \sum_{\mathbf{n}} \prod_k a_k^{n_k} = \prod_k \sum_{n_k} a_k^{n_k} \quad (7.47)$$

Nun sind diese Summen im Fermifall auf  $n_k = 0, 1$  beschränkt. Wir erhalten also

$$\text{tr } \Gamma_-(A) = \prod_k (1 + a_k) = \det(\mathbb{1} + A). \quad (7.48)$$

Im Bose-Fall summieren wir über  $n_k = 0, 1, 2, \dots$ , also eine geometrische Reihe

$$\text{tr } \Gamma_+(A) = \prod_k \frac{1}{1 - a_k} = \det(\mathbb{1} - A)^{-1}, \quad (7.49)$$

also jeweils Gleichung (7.46). Der allgemeine (nicht diagonalisierbare) Fall folgt aus der Beobachtung, dass beide Seiten analytische Funktionen jedes der Matrixelemente sind. Für die nähere Theorie sei wieder auf [Sim05] verwiesen, wo auch gezeigt wird, dass sich diese Determinanten bei Operatorprodukten verhalten wie gewohnt.

Wir verwenden nun die Spurformel, um für jeden quasifreien Zustand  $\mathcal{Q}(\rho)$  und jede zweitquantisierte Observable  $\Gamma_s(F)$  die volle Zählstatistik zu bestimmen. Die charakteristische Funktion ist

$$\begin{aligned} C(f) &= \frac{\text{tr } \Gamma_s(\rho) \Gamma_s(F[e^{if}])}{\text{tr } \Gamma_s(\rho)} = \frac{\text{tr } \Gamma_s(\rho F[e^{if}])}{\text{tr } \Gamma_s(\rho)} \\ &= \left( \det(\mathbb{1} - s\rho)^{-1} \det(\mathbb{1} - s\rho F[e^{if}]) \right)^{-s} \\ &= \det\left((\mathbb{1} - s\rho)^{-1}(\mathbb{1} - s\rho F[e^{if}])\right)^{-s} \\ &= \det\left(\mathbb{1} - s(\mathbb{1} - s\rho)^{-1}\rho(F[e^{if}] - \mathbb{1})\right)^{-s}, \end{aligned}$$

also

$$\boxed{\begin{aligned} C(f) &= \det\left(\mathbb{1} - s\hat{\rho}F[e^{if} - \mathbb{1}]\right)^{-s}, \\ \text{mit } \hat{\rho} &= \frac{\rho}{\mathbb{1} - s\rho}. \end{aligned}} \quad (7.50)$$

Hier haben wir uns erlaubt, den Operator  $(\mathbb{1} - s\rho)^{-1}\rho$  als Quotienten zu schreiben, da er ja im Funktionalkalkül von  $\rho$  ausgewertet werden kann.

Momente bekommen wir wieder durch Potenzreihenentwicklung in  $f$ , die wir als Reihe in einem Skalierungsfaktor  $t$  organisieren. Interessanterweise ist das am einfachsten wieder durch Anwendung der Spurformel. Weil  $e^{itf} - 1 = \mathbf{O}(t)$  haben wir bis zur zweiten Ordnung nur die Teilchenzahlen  $N = 0, 1, 2$  zu berücksichtigen:

$$\begin{aligned} C(tf) &= \text{tr } \Gamma_s(\hat{\rho}F[e^{itf} - \mathbb{1}]) = \text{tr } \Gamma_s\left(\hat{\rho}F[itf - \frac{t^2}{2}f^2]\right) + \mathbf{O}(t^3) \\ &= 1 + it \text{tr } \hat{\rho}F[f] - \frac{t^2}{2} \left( \text{tr } \hat{\rho}F[f^2] + 2 \text{tr } P_s(\hat{\rho}F[f])^{\otimes 2} \right) + \mathbf{O}(t^3) \end{aligned} \quad (7.51)$$

Durch Vergleich mit (7.43) identifizieren wir hieraus zunächst  $\hat{\rho}$  als die reduzierte Einteilchen-Dichtematrix. Auch die Zweiteilchen-Dichtematrix lässt sich einfach durch  $\hat{\rho}$  ausdrücken:

$$\boxed{\begin{aligned} R_1(\mathcal{Q}_s(\rho)) &= \hat{\rho}, \\ R_2(\mathcal{Q}_s(\rho)) &= P_s(\hat{\rho} \otimes \hat{\rho}). \end{aligned}} \quad (7.52)$$

Dazu berechnen wir zunächst die Varianz von  $d\Gamma(A)$ , indem wir in (7.51)  $F$  als projektionswertig mit  $A = F[f]$  nehmen (also zum Beispiel das Spektralmaß). Es ist dann ja  $C(tf) = \text{tr } \mathcal{Q}_s(\rho)e^{itd\Gamma(A)}$  und durch Vergleich der zweiten Ordnungen

$$\text{tr } \mathcal{Q}_s(\rho)d\Gamma(A)^2 = \text{tr } \hat{\rho}A^2 + 2 \text{tr } P_s(\hat{\rho} \otimes \hat{\rho})(A \otimes A). \quad (7.53)$$

Daraus folgt der zweite Teil von (7.52) aus (7.29) und der Definition (7.32). Aus (7.53) bekommen wir die Varianz

$$\begin{aligned} & \text{tr}(\mathcal{Q}_s(\rho)d\Gamma(A)^2) - \left(\text{tr} \mathcal{Q}_s(\rho)d\Gamma(A)\right)^2 \\ &= \text{tr}(\hat{\rho}A^2) + 2 \text{tr} P_s(\hat{\rho}A) \otimes (\hat{\rho}A) - (\text{tr} \hat{\rho}A)^2 \\ &= \text{tr}(\hat{\rho}A^2) + s \text{tr}(\hat{\rho}A\hat{\rho}A) . \end{aligned} \quad (7.54)$$

Hier haben wir benutzt, dass auf dem Zweiteilchenraum gilt  $2P_s = \mathbb{1} + s\Theta$ , wobei  $\Theta$  die beiden Tensorfaktoren vertauscht und  $\text{tr} \Theta(A \otimes B) = \text{tr}(AB)$ . Speziell ( $A = \mathbb{1}$ ) die Varianz der Teilchenzahl ist  $\text{tr}(\hat{\rho} + s\hat{\rho}^2)$ . Die Auswertung der höheren Momente und weitere Eigenschaften der Zählstatistik verschieben wir wiederum auf Abschnitt 7.7.

Um den Faden der Statistischen Mechanik vom Anfang dieses Abschnitts wieder aufzunehmen: Die reduzierte Einteilchen-Dichtematrix  $\hat{\rho}$  aus (7.50) ist bekannt als (operatorwertige) Bose- bzw. Fermi-Dirac Verteilung. Man findet sie oft rein kombinatorisch begründet, d.h. nur in der Energiebasis. Das ist schade, weil man sich natürlich in der Theorie der freien Quantengase nicht nur für die Energie interessiert, sondern auch für andere, damit nicht vertauschbare Größen wie den Ort. Aus der Abzählstatistik ist es unmöglich, zum Beispiel auf räumliche Korrelationen im Fermigas zu kommen. Die in diesem Abschnitt gelegte Basis gibt all solche Dinge her, wobei die weitere Auswertung aus Platzgründen unterbleiben muss.

## 7.6 Hartree-Fock Zustände

Im Fermi-Fall gilt  $\hat{\rho} \leq 1$  und die Varianz der Teilchenzahl ist  $\text{tr} \hat{\rho}(\mathbb{1} - \hat{\rho})$ . Dies könnte Null werden, wenn  $\hat{\rho} = P$  ein  $N$ -dimensionaler Projektor wäre. Das ist unter den bisher gemachten Voraussetzungen nicht möglich, weil  $x/(1+x) < 1$  für alle  $x \geq 0$ . Wir können aber einen Limes mit  $\rho = tP$ ,  $t \rightarrow \infty$  betrachten. Dann erhalten wir

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \mathcal{Q}_-(tP) &= |\Psi\rangle\langle\Psi| \quad \text{mit} \\ \Psi &= a^*(\varphi_1) \cdots a^*(\varphi_N)\Omega = P_-(\varphi_1 \otimes \cdots \otimes \varphi_N) , \end{aligned} \quad (7.55)$$

wobei  $\varphi_1, \dots, \varphi_N$  eine Basis des Unterraums  $P\mathcal{H}$  ist [Ü!]. Wenn man die Antisymmetrisierung in Ortsraum-Wellenfunktionen ausschreibt, ist auch  $\Psi(x_1, \dots, x_N) = \det M$ , wobei  $M_{ij} = \varphi_i(x_j)$ . Deshalb nennt man  $\Psi$  auch eine **Slater-Determinante**. Ganz im Sinn der quasifreien Zustände enthalten solche Wellenfunktionen so wenig Korrelationen wie eben mit dem Pauli-Prinzip verträglich. Wir können alle Formeln aus dem letzten Abschnitt mit  $\hat{\rho} = P$  verwenden. Damit haben wir einen Zustand, in dem der Energie-Erwartungswert auch eines wechselwirkenden Vielteilchen-Systems leicht auswertbar ist. Wir können also im Sinne eines Variationsansatzes [4.5] hoffen, eine ungefähre Idee von der Grundzustandsenergie zu bekommen. Dies ist der Inhalt der Hartree-Fock-Methode.

Betrachten wir konkreter ein System mit Einteilchenenergie  $H_1$ , die die kinetische Energie der Teilchen und äußere Potentiale enthält. Dazu kommt ein Zweiteilchen-Wechselwirkungsoperator  $V$  auf  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ , der in fast allen Anwendungen die Coulomb-Abstoßung zwischen Elektronen ist. Für den Hartree-Fock-Zustand mit dem  $N$ -dimensionalen Projektor  $P$  erhalten nach (7.52) den Erwartungswert

$$E(P) = \langle \Psi | d\Gamma(H_1) + d^2\Gamma(V) | \Psi \rangle = \text{tr } PH_1 + \text{tr } P_-(P \otimes P)V \quad (7.56)$$

Den antisymmetrisierenden Projektor  $P_- = (\mathbb{1} - \Theta)/2$  können wir auch zur Wechselwirkung  $V$  schlagen: Da  $V$  selbst als Wechselwirkung zwischen identischen Teilchen mit  $\Theta$  vertauscht, können wir einfach setzen  $V_- = 2P_-V = (V - \Theta V)$  und den letzten Term als  $\frac{1}{2} \text{tr}(P \otimes P)V_-$  schreiben. Dabei nennt man  $V$  die “direkte” Wechselwirkung und  $\Theta V = V\Theta$  die **Austauschwechselwirkung**. Es ist nun der Projektor  $P$  zu bestimmen, der diesen Ausdruck minimiert, was meist als Suche nach den minimierenden “Orbitalen”  $\varphi_1, \dots, \varphi_N$  formuliert wird. Dazu betrachten wir zunächst die Ableitung von (7.56) nach  $P$ , indem wir eine differenzierbare Kurve  $t \mapsto P_t$  in der Menge der  $N$ -dimensionalen Projektoren betrachten, sodass  $P_0 = P$  der zu untersuchende Projektor ist. Offenbar haben wir dann in erster Ordnung in  $t$

$$\left. \frac{d}{dt} E(P_t) \right|_{t=0} = \text{tr } \dot{P} H_1 + \text{tr}(\dot{P} \otimes P) V_- = \text{tr } \dot{P} F$$

mit  $F = H_1 + \text{tr}_2(\mathbb{1} \otimes P) V_-$  ,

(7.57)

wobei  $\dot{P} = d/(dt)P_t|_{t=0}$  und  $\text{tr}_2$  die partielle Spur über den zweiten Tensorfaktor ist. Der Operator  $F$  ist also so etwas wie der Gradient des Energiefunktional. Wir haben einen stationären Punkt (Maximum, Minimum oder meist Sattel), wenn  $\text{tr } \dot{P} F = 0$  für alle möglichen Ableitungen  $\dot{P}$ . Speziell können wir  $P_t = \exp(iYt)P \exp(-iYt)$ , wählen mit beliebigem hermiteschen  $Y$  in der Spurklasse. Dann ist  $\dot{P} = i[Y, P]$  und also  $\text{tr } \dot{P} F = i \text{tr}[Y, P]F = \text{tr } Y[P, F] = 0$  für alle  $Y$ . Da  $Y$  beliebig ist, lautet die Stationaritätsbedingung für das Energiefunktional

$$[P, F] = 0 . \quad (7.58)$$

Das heißt,  $P\mathcal{H}$  ist ein invarianter Unterraum von  $F$ , wird also von Eigenvektoren von  $F$  aufgespannt. Das ist der Ausgangspunkt für das iterative **Hartree-Fock Verfahren** zur Bestimmung des Energie-minimierenden Projektors  $P$ . Man startet mit irgendeinem  $P$ , bildet  $F$  nach (7.57) und diagonalisiert. Dann bildet man den nächsten Projektor aus den Eigenvektoren der  $N$  niedrigsten Eigenwerte. Offenbar sind Fixpunkte dieser Iteration (“selbstkonsistente  $P$ ”) stationär im Sinne von (7.58). Durch Auswahl der jeweils kleinsten Eigenwerte hofft man, in der Energie tiefer zu kommen und im Limes den minimierenden Projektor zu finden. Das wäre auch genau im Sinne der Analyse der Minimumsbedingung aus den zweiten Ableitungen, wenn  $E(P) = \text{tr } PF$ , wäre. Aber wegen des Faktors 2 bei der Differentiation des Wechselwirkungsterms ist das gerade falsch um einmal die Wechselwirkungsenergie.  $F$  hat also nicht direkt die

Interpretation einer Energie. Die Iteration verbessert daher im Allgemeinen nicht in jedem Schritt die Energie, braucht nicht zu konvergieren und kann z.B. in Zyklen laufen. Für einfache atomare Systeme funktioniert es aber gar nicht so schlecht. Vor allem ist es einfach und schnell, weil man nur den Einteilchen-Operator  $F$  diagonalisieren muss. Es wird daher gelegentlich als Ausgangspunkt für komplexere numerische Verfahren verwendet. Aber selbst dann ist Vorsicht geboten. Insbesondere weiß man, dass für Systeme mit ungepaarten Spins, die für magnetische Systeme relevant sind, nicht nur der Zustands-Ansatz schlecht ist, sondern auch die Standard-Iteration Schwierigkeiten hat, das beste  $P$  zu finden.

Verblüffend ist, wie viel von der Sprache der Atomphysik implizit auf Hartree-Fock Zuständen basiert. Jedesmal wenn von der Besetzung von Schalen und anderen Zuständen die Rede ist, sind Einteilchen-Zustände gemeint, wobei diese Zustände durch die Wechselwirkung mit den übrigen Elektronen modifiziert sind, eben gerade im Sinne des obigen Verfahrens. Oft werden sogar Anregungen in dieser Sprache diskutiert: Man betrachtet dann Slater-Determinanten, bei denen nicht die  $N$  niedrigsten Eigenwerte “besetzt” werden, also ein “Loch” gelassen wird. Auch wenn die Eigenwerte  $\varepsilon_i$  von  $F$  keine direkte physikalische Interpretation haben, kann man sie in Zusammenhang bringen mit der Energiedifferenz zu einem “angeregten”  $(N-1)$ -Elektronensystem bei dem nur der Faktor  $\varphi_i$  aus der Slater-Determinante weggelassen wird.  $\varepsilon_i$  wäre danach die Ionisierungsenergie des  $i$ -ten Elektrons. In diesem Satz hat die Einteilchensprache dann vollends gewonnen.

## 7.7 \*Höhere Momente

Die höheren Momente einer Zählstatistik nach Abschnitt 7.4 werden etwas knifflig, weil es zwei verschiedene Arten gibt, Häufigkeiten in einem Punktschwarm zu betrachten, analog den verschiedenen Statistiken, die man bei Ziehungen aus einer Urne mit bzw. ohne Zurücklegen erhält. Man erhält daher zwei Familien von Momenten (“normale” und “faktorielle” Momente). Dies ist analog dem Unterschied von  $d\Gamma(A)^k$  und einem  $k$ -Teilchen Wechselwirkungsterm  $A^{\otimes k}$ , den wir in Fortsetzung der Notation aus (7.29)  $d^k\Gamma(A^{\otimes k})$  schreiben werden. Die Zusammenhänge der Zählmomente mit der nicht-kommutativen Version, den  $d^k\Gamma$ , wird später deutlich.

Wir betrachten also zunächst die Momente einer Zählstatistik, d.h., eines Wahrscheinlichkeitsmaßes auf  $\Gamma X$ , gegeben durch die charakteristische Funktion. Das zweite Moment ist:

$$\mathbf{m}_2[f \otimes f] = -\frac{d^2 C(tf)}{dt^2} \Big|_{t=0} = \mathbb{P}[\xi[f]^2] = \int \mathbf{m}_2(dx dy) f(x)f(y) . \quad (7.59)$$

Beispielsweise für einen Poissonschen Punktprozess (7.39) mit Intensitätsmaß  $\mu$  haben wir für bis zur zweiten Ordnung in  $f$ :  $\mu[e^{if} - 1] = i\mu[f] - \mu[f^2]/2 + \mathbf{o}(f^2)$ , also

$$C(f) = 1 + (i\mu[f] - \frac{1}{2}\mu[f^2]) + \frac{1}{2}(i\mu[f])^2 + \mathbf{o}(f^2)$$

$$\begin{aligned}
&= 1 + i\mu[f] - \frac{1}{2}(\mu[f^2] + \mu[f]^2) + \mathbf{o}(f^2) \\
\mathbf{m}_1(dx) &= \mu(dx) \\
\mathbf{m}_2(dx dy) &= \mu(dx)\delta(x-y)dy + \mu(dx)\mu(dy) .
\end{aligned}$$

Das zweite Moment hat also eine Singularität auf der Diagonalen von  $X \times X$ . Um zu verstehen, wo die herkommt, betrachten wir einmal den Fall einer Zufallsquelle, die stets nur zwei Punkte  $x, y \in X$  ausgibt. Zum Beispiel wäre das bei einer Messung von  $\Gamma_s(F)$  an einem Zustand im  $N = 2$  Teilraum des Fockraums so. Das zweite Moment ist dann der Erwartungswert von  $\xi[f]^2 = (f(x) + f(y))^2$ . Hierin sind aber die Erwartungswerte der quadratischen Terme schon vom ersten Moment (mit Testfunktion  $f^2$ ) bekannt. Über Korrelationen der Punkte lernen wir eigentlich nur aus dem Erwartungswert von  $f(x)f(y)$  etwas. Der Erwartungswert dieses Produktes ist eine alternative Definition eines “zweiten Moments”.

Für die höheren Ordnungen betrachten wir noch einmal ein allgemeines Zufallsexperiment, dessen Ausgang aus Punkten  $x_1, \dots, x_N$  besteht. Sowohl  $N$  als auch die Punkte selbst sind nun von Experiment zu Experiment verschieden. Wir stellen ein solches Ergebnis durch das Zählmaß  $\xi$  nach (7.33) dar. Das  $k$ -te Moment ist dann das Maß  $\mathbf{m}_k$  auf  $X^k$  mit

$$\int \mathbf{m}_k(dy_1 \cdots, dy_k) f(y_1) \cdots f(y_k) = \mathbb{P} \left[ \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_k=1}^N f(x_{\alpha_1}) \cdots f(x_{\alpha_k}) \right] . \quad (7.60)$$

Da wir aus den  $k$ -fachen Produkten  $f^{\otimes k}$  mit  $f^{\otimes k}(y_1, \dots, y_k) = f(y_1) \cdots f(y_k)$  durch Linearkombination und Limiten alle permutationsinvarianten Funktionen auf  $X^k$  erzeugen können, ist (7.60) gleichwertig mit der folgenden Gleichung, die eindeutig ein permutationsinvariantes Maß auf  $X^k$  charakterisiert:

$$\int \mathbf{m}_k(dy_1 \cdots, dy_k) f(y_1, \dots, y_k) = \mathbb{P} \left[ \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_k=1}^N f(x_{\alpha_1}, \dots, x_{\alpha_k}) \right] . \quad (7.61)$$

Aus der Ergebnismenge  $x_1, \dots, x_N$  wählen wir also  $k$  Elemente aus und summieren über alle Möglichkeiten, wobei bereits gewählte Elemente noch einmal genommen werden können (“Urnenziehung mit Zurücklegen”). Als Alternative betrachten wir auch das **faktorielle  $k$ -te Moment**  $\widehat{\mathbf{m}}_k$ , bei dem nicht zurückgelegt wird:

$$\begin{aligned}
\int \widehat{\mathbf{m}}_k(dy_1 \cdots, dy_k) f(y_1, \dots, y_k) &= \mathbb{P} \left[ \sum_{\substack{\alpha_1, \dots, \alpha_k=1 \\ \text{alle verschieden}}}^N f(x_{\alpha_1}, \dots, x_{\alpha_k}) \right] \\
&= k! \mathbb{P} \left[ \sum_{1 \leq \alpha_1 < \dots < \alpha_k \leq N} f(x_{\alpha_1}, \dots, x_{\alpha_k}) \right] .
\end{aligned} \quad (7.62)$$

Betrachten wir den einfachsten Fall, in dem  $X$  aus nur einem Punkt besteht oder die Testfunktion  $f$  konstant ist. Die Zählobservable ist also eine einzige  $\mathbb{N}$ -wertige Zufallsvariable  $N$ . Nun besteht die Summe in (7.61) aus  $N^k$  Termen, und  $\mathbf{m}_k[f] = f^k \mathbb{P}[N^k]$ . Dagegen haben wir in (7.62) aus  $N(N-1)(N-2) \cdots (N-k+1) = N!/(N-k)!$

Terme und  $\widehat{\mathbf{m}}_k[f] = f^k \mathbb{P}[N!/(N-k)!]$ . Dies ist der Hintergrund der Bezeichnung “faktorielles Moment”.

In diesem Beispiel ist klar, wie sich diese Momentenfamilien ineinander umrechnen lassen. Am einfachsten lässt sich das in den entsprechenden Erzeugendenfunktionen ausdrücken. Wir führen allgemein die faktorielle momentenerzeugende Funktion  $\widehat{C}$  ein, mit

$$\widehat{C}(f) = \sum_{k=1} \frac{1}{k!} \int \int \widehat{\mathbf{m}}_k(dy_1 \cdots, dy_k) f(y_1) \cdots f(y_k) = \sum_{k=1} \frac{1}{k!} \widehat{\mathbf{m}}_k[f^{\otimes k}] . \quad (7.63)$$

Dann ist  $C(f)$  der Erwartungswert von

$$\begin{aligned} \exp(i \sum_{\alpha} f(x_{\alpha})) &= \sum_{n_{\alpha}} \frac{i^{n_{\alpha}}}{n_{\alpha}!} \prod_{\alpha} f(x_{\alpha})^{n_{\alpha}} \\ &= \sum_k \sum_{1 \leq \alpha_1 < \cdots < \alpha_k \leq N} \sum_{n_{\alpha} \geq 1} \frac{i^{n_{\alpha}}}{n_{\alpha}!} \prod_{\alpha} f(x_{\alpha})^{n_{\alpha}} \\ &= \sum_k \sum_{1 \leq \alpha_1 < \cdots < \alpha_k \leq N} \prod_{\alpha} (e^{if(x_{\alpha})} - 1) \\ &= \sum_k \sum_{1 \leq \alpha_1 < \cdots < \alpha_k \leq N} \prod_{\alpha} h(x_{\alpha}) \end{aligned}$$

Dabei haben wir am zweiten Gleichheitszeichen nur die vorherige Summe danach sortiert, wie viele verschiedene  $x_{\alpha}$  auftauchen und welche. Zur Abkürzung wurde  $h(x) = e^{if(x)} - 1$  eingeführt. Bilden wir nun den Erwartungswert erhalten wir

$$\boxed{C(f) = \widehat{C}(e^{if} - 1) .} \quad (7.64)$$

Speziell für den Poisson-Prozess (7.39) mit Intensitätsmaß  $\mu$  erhalten wir  $\widehat{C}(h) = e^{\mu[h]}$ , also  $\widehat{\mathbf{m}}_k[h^{\otimes k}] = \mu[h]^k$ , und somit das Produktmaß  $\widehat{\mathbf{m}}_k = \mu^{\otimes k}$ . Man führt deswegen oft auch die **Korrelationsfunktionen**  $g^{(k)} : X^k \rightarrow \mathbb{R}$  als Radon-Nikodym-Ableitungen ein, also

$$\widehat{\mathbf{m}}_k(dx_1 \cdots dx_k) = g^{(k)}(x_1 \cdots x_k) \mathbf{m}_1(dx_1) \cdots \mathbf{m}_1(dx_k) . \quad (7.65)$$

Für einen Poissonprozess ist also gerade  $g^{(k)} = 1$  für alle  $k$ .

## 7.8 °Stabilität der Materie

[►Irgend eine Kurzversion, die erklärt, dass Fermi-Statistik dafür wesentlich ist. ]

## Anmerkungen zum Kapitel 7

### Zu Abschnitt 7.1 (Postulat)

Die Vierteilung des Symmetrisierungs-Postulat ist vielleicht übertrieben fein. Sie sollte vor allem zeigen, dass nicht alles schon im Begriff der “Ununterscheidbarkeit” steckt.



**Zu Abschnitt 7.4** (Observable)

Punktprozesse gehören kaum zum Ausbildungskanon für Physiker, treten aber hier zwingend auf, wenn man die volle Zählstatistik einer zweitquantisierten Observable betrachten möchte.

Natürlich habe ich bei der Definition von  $\Gamma_s(F)$  durch den charakteristischen Operator (7.35) über eine Menge Funktionalanalysis hinweg gehudelt. Zumindest den Raum der Funktionen  $f : X \rightarrow \mathbb{R}$  sollte man exakt angeben. Eine Wahl, für die alles durchgeht, wäre ein lokalkompakter metrisierbarer Hausdorff-Raum  $X$ . Die Funktionen  $f$  werden als die stetigen, bei Unendlich verschwindenden vorausgesetzt. Der Dualraum dazu besteht dann nach einem Satz von Riesz gerade aus den regulären Borelmaßen. Die Art, Maße auf einem unendlichen Vektorraum durch ihre charakteristischen Funktionen zu definieren, folgt dem Ansatz [?, Kap. IV]. Letzten Endes kommt es dabei darauf an, die messbaren Mengen auf dem unendlichen Raum gerade durch die Messbarkeit von linearen Funktionalen wie  $\mu[f]$  zu definieren.

**Zu Abschnitt 7.5** (Quasifreie Zustände: Die Terminologie stammt aus der Feldtheorie)

Hier sind allerdings nur die sogenannten eichinvarianten quasifreien Zustände betrachtet, d.h. solche, die mit dem Teilchenzahloperator vertauschen. Allgemeiner kann man auch “gequetschte” quasifreie Zustände betrachten, die man aus den eichinvarianten durch eine Transformation des Einteilchenraums erhält, die zwar  $\mathbb{R}$ -linear aber nicht  $\mathbb{C}$ -linear ist. Zusätzlich kann man auch einen Versatz im Phasenraum betrachten, was besonders für Bose-Einstein-Kondensate wichtig ist.

## Aufgaben zum Kapitel 7

**Aufgabe 7.1:** Zeigen Sie: Sei  $P$  ein Projektor und  $t \mapsto P_t$  eine differenzierbare Kurve von Projektoren durch  $P$ , d.h.  $P_0 = P$ . Zeigen Sie, dass die Ableitung bei  $t = 0$  die Form  $\dot{P} = (\mathbb{1} - P)XP + PX(\mathbb{1} - P) = i[Y, P]$  hat, wobei  $X, Y$  geeignete hermitesche Operatoren sind. Wie hängen  $X$  und  $Y$  zusammen? Zeigen Sie, dass in beiden Formen jeder beliebige hermitesche Operator vorkommen kann. [H]



# Kapitel 8

## Störungstheorie

### 8.1 Störungstheorie für isolierte Eigenwerte

Wir hatten in Abschnitt 5.5.2 gesehen, dass die Bestimmung der Eigenwerte eines Teilchens im Coulombpotential nur der Anfang für die Theorie des Wasserstoffspektrums ist. Es ist aber die Basis, vor allem in dem Sinne, dass all die weiteren Korrekturen als kleine Störungen eingearbeitet werden. Dazu gibt es ein allgemeines Verfahren, das üblicherweise unter dem Titel “Zeitunabhängige Störungstheorie” abgehandelt und mit den Namen Rayleigh und Schrödinger verbunden wird. Störungstheorie kommt also immer zum Einsatz, wenn das gegebene Problem nahe an einem exakt lösbaaren liegt. Genauso wichtig ist der Einsatz um qualitative Eigenschaften komplexer Systeme zu bekommen. Experimentell sieht der Zeeman-Effekt eines komplexen Atoms nicht viel komplizierter aus als für Wasserstoff. Die Störungstheorie stützt diese Erwartung und sagt uns, wie wir im Prinzip die Aufspaltung berechnen müssten, auch wenn wir vielleicht keine Chance haben, die Vielteilchen-Wellenfunktion exakt zu bestimmen. Für eine Größenordnungs-Abschätzung reicht aber diese Information und den genauen Wert kann dann genauso experimentell bestimmen wie die genaue Lage der “ungestörten” Niveaus.

Die Grundsituation der Störungstheorie ist ein Hamiltonoperator, der analytisch (also in eine Potenzreihe entwickelbar) von einem Parameter  $\lambda$  abhängt, typischerweise in linearer Form

$$H(\lambda) = \sum_{k=0} \lambda^k H_k = H_0 + \lambda H_1, \quad (8.1)$$

mit hermiteschen  $H_0$  und  $H_1$  (bzw. auch höheren operatorwertigen Koeffizienten). Zu den Ausgangsdaten gehört ferner ein isolierten Eigenwert  $E$  des “ungestörten” Operators  $H_0$  mit endlicher Multiplizität, d.h., sodass der zugehörigen Eigenraum  $P_0\mathcal{H}$  endliche Dimension  $1 \leq \text{tr } P_0 < \infty$  besitzt. Wir suchen eine  $\lambda$ -abhängige Lösung des Eigenwertproblems  $H(\lambda)\Psi(\lambda) = E(\lambda)\Psi(\lambda)$  mit  $E(0) = E$ . Wenn der Eigenwert  $E$  entartet ist ( $\text{tr } P_0 > 1$ ), legt dies die Eigenwerte noch nicht fest, das heißt, wir bekommen

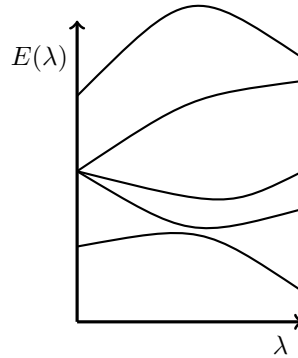


Abb. 8.1: [► Wird noch ausgeführt]

typischerweise mehrere Lösungen: Der Eigenwert spaltet auf in mehrere Äste (siehe Skizze). Die Grundidee ist der Potenzreihenansatz

$$E(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} E_k \lambda^k \quad \text{und} \quad \Psi(\lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k \Psi_k . \quad (8.2)$$

Tatsächlich kann man unter allgemeinen Bedingungen zeigen (z.B. [8.3]), dass dieser Ansatz zum Erfolg führt, das heißt, dass alle Äste der Eigenwertfunktion so beschrieben werden können. Wir folgen hier aber erst einmal dem praktischen Brauch, von (8.2) auszugehen und daraus lediglich die niedrigsten Ordnungen zu extrahieren, auch wenn höhere Korrekturen vielleicht unendlich sind und die Reihe nicht daran denkt zu konvergieren.

Der Koeffizientenvergleich der  $\lambda$ -abhängigen Eigenwertgleichung ergibt bei der Potenz  $\lambda^k$

$$\sum_{r=0}^k (H_r - E_r) \Psi_{k-r} = 0 . \quad (8.3)$$

Für die ersten drei Ordnungen sind das die Gleichungen

$$\begin{aligned} \lambda^0 : & (H_0 - E_0) \Psi_0 = 0 \\ \lambda^1 : & (H_0 - E_0) \Psi_1 + (H_1 - E_1) \Psi_0 = 0 \\ \lambda^2 : & (H_0 - E_0) \Psi_2 + (H_1 - E_1) \Psi_1 + (H_2 - E_2) \Psi_0 = 0 \end{aligned} . \quad (8.4)$$

Weiter wollen wir es hier nicht treiben und statt dessen diese Bedingungen so weit wie möglich auswerten. Die erste Gleichung ergibt nur die Information, dass die  $\Psi_0$  ein Eigenvektor von  $H_0$  ist, das heißt  $\Psi_0 \in P_0 \mathcal{H}$ . Im entarteten Fall legt dies allerdings  $\Psi_0$  noch nicht fest. Als nächstes wenden wir auf die Gleichung zu  $\lambda^1$  den Projektor  $P_0$  an. Da  $P_0(H_0 - E_0) = 0$ , bleibt nur die Gleichung

$$\boxed{P_0 H_1 P_0 \Psi_0 = E_1 \Psi_0} . \quad (8.5)$$

Das heißt also, das  $\Psi_0$  ein weiteres Eigenwertproblem im Raum  $P_0 \mathcal{H}$  lösen muss. Damit sind wir erst einmal auf dem richtigen Weg, um eine diskrete Aufspaltung zu

bekommen. Wir haben maximal  $\text{tr } P_0$  verschiedene Eigenwerte  $E_1$ , also entsprechend verschiedene Steigungen und damit Äste in Abb. ???. Wir wählen nun einen davon und bezeichnen den entsprechenden Eigenprojektor mit  $P_1$ . Per Definition ist  $0 \neq P_1 \leq P_0$ . Da wir  $\Psi_0$  als normiert ansetzen, gilt  $E_1 = \langle \Psi_0 | H_1 | \Psi_0 \rangle$ . Diese Merkregel<sup>1</sup>, die die Ableitung des Eigenwerts als mit dem Erwartungswert der Ableitung des Operators zusammenbringt ist aber falsch, wenn man nicht die schärfere Bedingung (8.5) (oder den nicht entarteten Fall) voraussetzt.

Wir haben nun den in  $P_0\mathcal{H}$  liegenden Teil der  $\lambda^1$ -Gleichung vollständig ausgenutzt und erreicht, dass der zweite Term in dieser Gleichung senkrecht zu  $P_0\mathcal{H}$  liegt. Da wir den ursprünglichen Eigenwert als isoliert vorausgesetzt haben, ist  $(H_0 - E_0)$  auf  $(\mathbb{1} - P_0)\mathcal{H}$  beschränkt invertierbar und wir nennen den inversen Operator

$$R_0 = (\mathbb{1} - P_0)(H_0 - E_0)^{-1}(\mathbb{1} - P_0) . \quad (8.6)$$

Wenden wir diesen Operator auf die  $\lambda^1$ -Gleichung an, bekommen wir  $(\mathbb{1} - P_0)\Psi_1 + R_0(H_1 - E_1)\Psi_0 = 0$ . Da  $R_0\Psi_0 = R_0P_0\Psi_0 = 0$  können wir hier noch den Term mit  $E_1$  weglassen und erhalten

$$\Psi_1 = \Psi_{10} - R_0 H_1 \Psi_0 \quad \text{mit } \Psi_{10} \in P_0\mathcal{H} . \quad (8.7)$$

Der Summand  $\Psi_{10}$  fällt automatisch aus der  $\lambda^1$ -Gleichung heraus, wir können also nichts weiter darüber sagen und haben damit diese Gleichung vollständig ausgewertet.

Bei der  $\lambda^2$ -Gleichung beginnen wir mit dem Anteil in  $P_1\mathcal{H}$ . Da  $P_1 \leq P_0$  fällt der erste Term ganz weg und beim zweiten wegen  $P_1(H_1 - E_1)P_0 = 0$  der Anteil von  $\Psi_{10}$ . Es bleibt also

$$(P_1 H_2 - P_1(H_1 - E_1)R_0 H_1)\Psi_0 = E_2 \Psi_0 . \quad (8.8)$$

Wiederum können wir hier den  $E_1$ -Term weglassen und erhalten so die Eigenwertgleichung

$$\boxed{P_1(H_2 - H_1 R_0 H_1)P_1 \Psi_0 = E_2 \Psi_0} . \quad (8.9)$$

Die verbleibende Freiheit  $\Psi_0 \in P_1\mathcal{H}$  wird hier weiter einschränkt, indem wir einen der Eigenwerte  $E_2$  wählen müssen. Damit treffen wir eine Auswahl zwischen Ästen, die sich in erster Ordnung noch gar nicht unterscheiden. Wenn sich im vorhergehenden Schritt schon  $\text{tr } P_1 = 1$  ergeben hat, ist an dieser Stelle natürlich nichts mehr zu tun und man erhält

$$E_2 = \langle \Psi_0 | H_2 | \Psi_0 \rangle - \langle \Psi_0 | H_1 R_0 H_1 | \Psi_0 \rangle . \quad (8.10)$$

Dies wird gern für den Fall einer linearen Störung ( $H_2 = 0$ ) hingeschrieben, mit Voraussetzung eines rein diskreten Spektrums, also  $H_0 = \sum_\alpha \varepsilon_\alpha |\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|$ , wobei die  $\varepsilon_\alpha$  für verschiedene Indizes gleich sein dürfen. Dann kann der Operator  $(H_0 - E_0)^{-1}$  im Funktional kalkül hingeschrieben werden:

$$E_2 = \sum_{\alpha; \varepsilon_\alpha \neq E} \frac{|\langle \varphi_\alpha, H_1 \Psi_0 \rangle|^2}{E - \varepsilon_\alpha} . \quad (8.11)$$

---

<sup>1</sup>Das "Feynman-Hellman Theorem"

## 8.2 Unbeschränkte Störungen

Wie gut ist nun die Störungstheorie? Wir werden den Potenzreihenansatz (8.2) im nächsten Abschnitt für isolierte Eigenwerte und “relativ beschränkte” Störungen rechtfertigen. Nur ist eben in vielen Anwendungen die Störung nicht beschränkt. Dann gibt es fast keine Garantien mehr für Konvergenz der Reihen. Erstaunlicherweise liefern die ersten Terme einer divergenten Reihe aber oft immer noch gute Approximationen. Eine möglicherweise divergente Reihe, deren erste  $n$  Terme für alle  $n$  immer noch eine Approximation mit einem Fehler der Ordnung  $< \lambda^n$  liefern, nennt man auch eine **asymptotische Reihe**. Für praktische Zwecke ist diese Eigenschaft oft genauso gut wie Konvergenz.

In manchen Fällen ist Konvergenz auch wirklich zu viel verlangt. Ein gutes Beispiel ist die Störung des harmonischen Oszillators durch ein positives Potential, das ein wenig schneller anwächst als das Oszillatorpotential. Dann ist für negatives  $\lambda$  der Operator  $H_0 + \lambda H_1$  nach unten unbeschränkt und hat kontinuierliches Spektrum. Es ist also klar, dass die Reihe für  $E(\lambda)$  für  $\lambda < 0$  nicht konvergieren kann. Dann kann sie aber (als Potenzreihe) auch für positive  $\lambda$  nicht konvergieren. Asymptotische Störungsreihen sind aber in diesem Beispiel (je nach Potential  $H_1$ ) trotzdem möglich. Die Theorie der asymptotischen Reihen ist mathematisch gut entwickelt und vielen Physikern bewusst, nicht zuletzt, weil die Störungsreihe der Quantenelektrodynamik bestenfalls eine solche Reihe ist

Noch interessanter sind Fälle, in denen die Reihe etwas approximiert, was es gar nicht gibt. Typisches Beispiel ist der Hamiltonoperator für den Stark-Effekt: ein Atom (z.B. Wasserstoff) in einem äußeren homogenen elektrischen Feld (proportional zu  $\lambda Q$ ). Dann ist es durch Tunneln dem Elektron immer möglich, den Kernbereich zu verlassen und dies bedeutet kontinuierliches Spektrum auf ganzen Energie-Achse. Für  $\lambda \neq 0$  hat  $H_0 + \lambda H_1$  also *überhaupt keine Eigenwerte*. Trotzdem ist dies eine auch im Vergleich zum Experiment höchst erfolgreiche Anwendung der Störungstheorie. Der Grund für diese Diskrepanz liegt in der extremen Idealisierung eines bis ins unendliche homogenen Feldes. Schneidet man diesen Feldverlauf irgendwo ab, wird die Ionisation durch Tunneln verhindert. Die Matrixelemente der Störung sind aber Integrale über atomare Wellenfunktionen, die in einem sehr kleinen Raumgebiet konzentriert sind. So lange man das Potential also nicht in diesem Bereich abschneidet, hängen die Matrixelemente und damit alle niedrigen Terme der Störungsreihe, nicht von der Art des Abschneidens ab. Man kann dann aber auch gleich bei der Berechnung der Matrixelemente das unbeschnittene Potential einsetzen. Letzten Endes spielt hierbei auch die experimentelle Grundsituation eine Rolle. Im Experiment zum Stark-Effekt wird das Feld nachträglich eingeschaltet und das Experiment ist auf Zeitskalen vorüber die sehr klein gegen die erwarteten Tunnelzeiten. Kurz und gut: Störungstheorie ist oft physikalisch besser als sie es mathematisch verdient. Die mathematische Auseinandersetzung mit diesen Phänomenen läuft unter dem Stichwort **spektrale Konzentration** (siehe z.B. [RS80, Sec. XII.5]).

Es liegt in diesem Beispiel noch eine weitere Moral über die physikalische Bedeutung der mathematischen Spektraltheorie. Die genaue Natur des Spektrums hat immer etwas mit dem Limes  $t \rightarrow \infty$  zu tun. Aber Unendlich ist ziemlich weit weg und wir sind nur wirklich interessiert an viel bescheideneren Zeitskalen. Die Herausforderung ist also, eine Variante von Spektraltheorie zu entwickeln, die dynamische Informationen auf einer vorgegebenen Zeitskala liefert, ohne sich zu sehr um den Limes  $t \rightarrow \infty$  zu scheren.

### 8.3 Störungen in Resolventensprache

Bei unserer Untersuchung der Störungsreihe spielte der Operator  $(H_0 - E_0)^{-1}$  eine Rolle. Allgemeiner nennt man die operatorwertige Funktion

$$R(z) = (H - z\mathbb{1})^{-1} \quad (8.12)$$

die **Resolvente** des Operators  $H$ , die schon in Abschnitt 2.2.4 einmal erwähnt wurde. Diese ist ein entscheidendes Hilfsmittel für die Störungstheorie und übrigens auch der zentrale Begriff für die Spektraltheorie für nicht notwendig normale Operatoren  $H$ . Das Spektrum von  $H$ , auch  $\text{spec}(H)$  ist die Menge der  $z \in \mathbb{C}$  für die der Operator  $(H - z\mathbb{1})$  kein beschränktes Inverses hat. Man prüft leicht nach, dass dies mit unserer Definition für normale Operatoren übereinstimmt und im endlich dimensionalen Fall einfach die Menge der Eigenwerte ist. Auf dem Komplement, der Resolventenmenge ist  $R(z)$  eine analytische (d.h., komplex differenzierbare) Funktion. Wir brauchen daher in diesem Abschnitt Grundzüge der Theorie solcher Funktionen, der Funktionentheorie [?].

Die Differenzierbarkeit der Resolvente sieht man der sogenannten **Resolventengleichung**

$$\begin{aligned} R(u) - R(z) &= (H - u)^{-1} \left( (H - z) - (H - u) \right) (H - z)^{-1} \\ &= (u - z) R(u) R(z) . \end{aligned} \quad (8.13)$$

Dies zeigt zunächst die Stetigkeit von  $R$  und, wenn wir hier durch  $(u - z)$  dividieren und  $u \rightarrow z$  gehen lassen, die Differenzierbarkeit mit  $R'(z) = R(z)^2$ . Wenn  $H$  ein normaler Operator ist können wir ihn diagonalisieren (Abschnitt 2.2.4) und also als Multiplikationsoperator  $(H\Psi)(x) = h(x)\Psi(x)$  in einem Raum  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(X, \mu)$  auffassen. Die Resolvente ist dann die Multiplikation mit der Funktion  $1/(h(x) - z)$ . Daher ist  $\|R(z)\| = \text{ess.sup}\{1/|h(x) - z| \mid x \in X\} = \text{dist}(z, \text{spec}(H))^{-1}$ . Ferner ergibt die Cauchy-Formel der Funktionentheorie direkt eine Charakterisierung des Funktionalkalküls für analytische Funktionen. Sei also  $f$  eine Funktion, die in einer Umgebung von  $\text{spec}(H)$  analytisch ist und  $\mathcal{C}$  eine Ansammlung von geschlossenen Wegen im Analytizitätsgebiet von  $f$ , die nicht durch das Spektrum gehen und es  $\text{spec}(H)$  gerade einmal umschließen (siehe Abb. ??). Dann gibt die Cauchy-Formel für jedes  $\eta \in \text{spec}(H)$ :

$f(\eta) = (2\pi i)^{-1} \int_{\mathcal{C}} dz f(z)/(z - \eta)$ . Daher erhalten wir für den Operator  $f(H)$ , der ja definiert ist als der Operator der Multiplikation mit  $f(h(x))$ :

$$f(H) = \frac{i}{2\pi} \int_{\mathcal{C}} dz f(z) R(z) . \quad (8.14)$$

Dies ist die Definition des analytischen Funktionalkalküls auch für nicht normale  $H$ . Im Augenblick interessiert uns aber nur der normale Fall und besonders der Fall, dass die Funktion  $f$  gleich 1 ist auf einem Teil des Spektrums, das vom Rest des Spektrums überall durch eine Lücke  $\varepsilon$  getrennt ist und Null auf den übrigen Spektralkomponenten. Dann ist  $P = f(H)$  der Spektralprojektor zu der gegebenen Komponente. Insbesondere könnte  $P$  also der Projektor zu einem isolierten Eigenwert sein.

Wenn wir nun zeigen können, dass  $R(z)$  sich bei einer kleinen Störung nur wenig verändert, dann bekommen wir auch, dass der Spektralprojektor sich stetig verändert. Dazu wiederholen wir den Trick von der Resolventengleichung (8.13) für  $R_0(z) = (H_0 - z)^{-1}$  und  $R(z) = (H - z)^{-1}$  mit  $H = H_0 + V$ :

$$R(z) - R_0(z) = R(z) \left( (H_0 - z) - (H - z) \right) R_0(z) = -R(z) V R_0(z) \quad (8.15)$$

$$R(z) = R_0(z) \left( \mathbb{1} + V R_0(z) \right)^{-1} \quad \text{if} \quad \|V R_0(z)\| < 1 . \quad (8.16)$$

Hier sehen wir, dass es bei der Störungstheorie nicht so sehr auf die absolute Größe der Störung  $V$  ankommt, sondern auf die Größe "relativ zu  $H$ ". Dies werden wir unten noch zu einer Betrachtung solcher Störungen, auch mit unbeschränkten Operatoren  $V$  ausbauen. Im Augenblick nehmen wir nur die Trennung einer Spektralkomponente vom Rest um  $\varepsilon$  an und umschließen sie mit einem Weg  $\mathcal{C}$ , der von  $\text{spec}(H)$  überall den Abstand  $\varepsilon/2$  einhält. Wenn nun  $\|V\| < \varepsilon/2$ , dann gilt  $\|V R_0(z)\| < 1$  auf dem ganzen Integrationsweg in (8.14). Wir erhalten also einen Spektralprojektor

$$P(V) = \frac{i}{2\pi} \int_{\mathcal{C}} dz R(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i}{2\pi} \int_{\mathcal{C}} dz R_0(z) \left( V R_0(z) \right)^n . \quad (8.17)$$

Da  $P(\lambda V)$  normstetig von  $\lambda$  abhängt, ist  $P(V)$  stetig mit  $P(0) = P_0$  verbunden und hat also die gleiche Dimension wie  $P_0$ . Die Gesamtzahl der Eigenwerte im Kreis vom Radius  $\varepsilon/2$  ist für  $H$  die gleiche wie für  $H_0$ : Eigenwerte können also nicht einfach im Nichts verschwinden.

Betrachten wir speziell den Fall eines nicht entarteten Eigenwerts. Dann projiziert  $P(V)$  für jedes  $V$  auf einen eindeutig bestimmten Eigenvektor von  $H$ . Für genügend kleine  $\|V\|$ , sodass der Nenner nicht verschwindet, ist der Eigenwert

$$E(V) = \frac{\langle \psi_0 | H P(V) \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | P(V) \psi_0 \rangle} = E_0 + \frac{\langle \psi_0 | V P(V) \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | P(V) \psi_0 \rangle} . \quad (8.18)$$

Dies ist nun nach der Reihenentwicklung (8.17) der Quotient zweier analytischer Funktionen, wobei der Nenner in einer Umgebung von  $\lambda = 0$  nicht verschwindet. Damit ist die Funktion  $E$  selber bei  $\lambda = 0$  analytisch. Dies ist, zumindest im nicht entarteten Fall,



die Rechtfertigung für den Ansatz (8.2). Nebenbei liefert (8.18) auch die Möglichkeit für  $V$  eine Abhängigkeit von mehreren Störungsparametern anzusetzen und so eine Potenzreihe in mehreren Variablen aufzustellen. Ferner (physikalisch meist sehr fern) gibt es auch die Möglichkeit ein nicht hermitesche Störung  $V$  zu diskutieren. Dann werden die Eigenwerte komplex, aber  $P(V)$  bleibt nach dem analytischen Funktionalkalkül eine Projektion  $P^2 = P$ , wenn auch nicht unbedingt hermitesch. Nützlicher ist noch die Bemerkung, dass dieser gesamte Abschnitt ohne Änderungen für beliebige normale Operatoren gilt, insbesondere für unitäre bei denen dann Eigenwerte auf dem Einheitskreis gestört werden.

## 8.4 Niveau-Abstoßung und mehrere Kontrollparameter

In der Formel (8.11) für die Energie in zweiter Ordnung steckt eine Art “Wechselwirkung” zwischen den Eigenwerten: Wenn  $\varepsilon_\alpha$  ein Eigenwert ist, der nur wenig größer ist als  $E$ , dann dominiert in der Summe der  $\alpha$ -Term und ist negativ. Der Eigenwert wird also nach unten gedrückt. Entsprechend drückt ein Niveau  $\varepsilon_\alpha \lesssim E$  den Eigenwert nach oben. Der niedrigste Eigenwert wird entsprechend von allen anderen (in 2. Ordnung, also im Vergleich zu einer Geraden) nach unten gedrückt [Ü8.2]. Dem entspricht eine häufige Beobachtung wenn man die Eigenwerte eines Operators  $H(\lambda)$  als Funktion von  $\lambda$  aufträgt, wie das zum Beispiel bei einer Bandstruktur mit dem Parameter  $p$  getan wird. Man sieht dann, dass die Eigenwerte sich nicht gern kreuzen. Auch wenn man von einem Hamiltonoperator  $H_0(\lambda)$  mit Niveaure Kreuzung ausgeht, wird die Kreuzung meist durch eine kleine Störung  $H_0(\lambda) + \varepsilon V$  aufgehoben (Abb. ??). Dieses Phänomen wollen wir in diesem Abschnitt erklären.

Wir müssen also Störungen in mehreren Parametern zu betrachten, also etwa  $\lambda$  und  $\varepsilon$  im obigen Beispiel. Störungen durch mehrere Parameter sind auch die Basis für die Diskussion von Bandstrukturen in 2 und 3-dimensionalen Gittern. Ein paar wichtige Aussagen bekommen wir sofort aus der Einparameter-Theorie. Insbesondere sind nach (8.18) isolierte Eigenwerte analytisch in der Störung  $V$ . Wenn wir also für  $V$  eine Potenzreihe in  $d$  Parametern ansetzen können, bekommen wir auch eine konvergente Reihe in  $d$  Parametern für den Eigenwert. Besonderheiten erwarten wir also nur im entarteten Fall.

Betrachten wir also  $H = H_0 + \lambda V_1 + \mu V_2$  und nehmen bei  $\lambda = \mu = 0$  einen entarteten Eigenwert  $E$  mit zweifacher Entartung und Eigenraum  $P_0$  an. Was wird typischerweise passieren? Fixieren wir eine Richtung im Parameterraum, gegeben durch einen Winkel  $\alpha$  und setzen  $\lambda = t \cos \alpha$ ,  $\mu = t \sin \alpha$ . Störungstheorie in dem einen Parameter  $t$  sagt uns dann, dass der Eigenwert sich in erster Ordnung wie  $E + m(\alpha)t$  verhalten wird, also eine Gerade durch den Entartungspunkt bildet. Die Steigung  $m(\alpha)$  ist einer der Eigenwerte der  $2 \times 2$ -Matrix  $P_0(V_1 \cos \alpha + V_2 \sin \alpha)P_0$ . Dies müssen wir in Abhängigkeit von  $\alpha$  betrachten. Setzen wir also an  $P_0 V_i P_0 = a_i \mathbb{1} + \vec{b}_i \cdot \vec{\sigma}$ . Dafür sind die Eigenwerte

$a_i \pm |\vec{b}_i|$ . Insgesamt bekommen wir (wieder als Funktion der Störparameter geschrieben):

$$E(\lambda, \mu) = E_0 + a_1\lambda + a_2\mu \pm |\lambda\vec{b}_1 + \mu\vec{b}_2| + \mathbf{o}(\lambda, \mu) , \quad (8.19)$$

also in dieser Näherung ein etwas gekippter Kegel, der durch eine quadratische Relation zwischen den Koordinaten  $(\lambda, \mu, E(\lambda, \mu))$  beschrieben wird. Der Kegel klappt dann (und nur dann) zu einer ebenen Figur zusammen, wenn  $\vec{b}_1$  und  $\vec{b}_2$  linear abhängig sind.

Die typischen **vermiedenen Kreuzungen**<sup>2</sup> in den Eigenwerten einer analytischen Funktion  $H(\lambda)$  sieht man nun so. Jede Beinahe-Kreuzung, sagen wir, bei  $\lambda = 0$  kann durch eine kleine Störung in eine exakte Kreuzung überführt werden, zum Beispiel, indem ich als Störung ein kleines Vielfaches  $-\mu V_2$  eines der Eigenprojektoren addiere. Die gegebene Funktion  $H(\lambda)$  ist also zu betrachten als  $(H(0) - \mu V_2) + \lambda V_1 + \mu V_2 + \dots$ . Um den Entartungspunkt herum erwarten wir dann den gerade betrachteten elliptischen Kegel, den aber die tatsächlichen Eigenwerte um ein kleines  $\mu$  verfehlen. Dies ergibt das typische Bild der vermiedenen Kreuzung (Abb. ??). Man kann auch sagen: Exakte Eigenwertkreuzungen sind nicht stabil: Unter einer typischen kleinen Störung werden sie vermieden.

Der untypische Fall tritt natürlich auch auf. Er ist dadurch gegeben, dass die beiden Störungen  $P_0 V_1 P_0$  und  $P_0 V_2 P_0$  miteinander vertauschen. In dem Beispiel oben sind dann die Vektoren  $\vec{b}_1$  und  $\vec{b}_2$  linear abhängig und nach affiner Transformation können wir einfach einen der beiden Null setzen. Das heißt, die Störung ist nur in einem der Parameter, und wir erhalten (in der zweidimensionalen Sicht) zwei analytische Eigenwertbänder, die sich entlang einer Kurve schneiden, bzw. in der eindimensionalen Sicht einen Kreuzungspunkt, der sich in höherer Ordnung nur verschiebt. Der “untypische” Fall kann auch durch Symmetrie zum typischen werden. Betrachten wir zum Beispiel zwei Niveaus eines rotationssymmetrischen Systems, die zu verschiedenen Gesamtdrehimpulsen  $j$  gehören, sich also zum Beispiel bei einer symmetriebrechenden Störung (Zeeman oder Stark-Effekt) als Multipletts unterschiedlicher Dimension  $(2j + 1)$  erweisen. Solche Niveaus kreuzen sich als Funktion einer rotationsinvarianten Störung ohne Abstoßung, da ja die Störung im Entartungsraum wiederum nach Drehimpulsen zerlegbar ist.

## 8.5 Störungen vom endlichen Rang

Häufig ist die Störung ein Operator, der nur einen niedrig dimensional Teilraum betrifft. Zum Beispiel möchte man in einem Gittersystem die Auswirkung einer Fehlstelle oder Verunreinigung betrachten. Ein solcher Operator ist also nur auf wenigen Plätzen verändert und damit eine Störung, wie wir sie hier betrachten wollen. Das Ziel der Betrachtung ist die Reduktion des Problems auf eine Aufgabe, die sich in dem niedrig dimensional Teilraum lösen lässt. Wir setzen also wieder  $H = H_0 + V$ , wobei  $V$  ein

---

<sup>2</sup>Engl.: avoided crossing

hermitescher Operator vom Rang  $r$  ist, also nach Diagonalisierung

$$V = \sum_{i=1}^r v_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \quad (8.20)$$

für ein Orthonormalsystem  $\{\varphi_i\}_{i=1}^r$  und  $v_i \neq 0$ . Auch der Fall  $r = 1$  bietet schon interessante Ergebnisse. Den Projektor auf den Störungs-Unterraum bezeichnen wir mit  $P = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ . Es gilt also  $V = PV = VP$ . Nach Gleichung (8.17) ist dann gleich klar, dass der Operator  $VP R_0(z)P$  eine entscheidende Rolle spielen wird. Man kann auch direkt von (8.15) ausgehen und findet zunächst (bei weggelassenen  $z$ -Argumenten) durch Multiplikation von rechts mit  $P$ :  $RP(P + VPR_0P) = R_0P$ . Der Operator in der Klammer lebt also ganz auf dem Unterraum  $P\mathcal{H}$ , undy wir brauchen ihn nur als solchen zu invertieren. Einsetzen in (8.15) und Verwenden von  $V = PV$  ergibt

$$R(z) = R_0(z) + R_0(z)P(P + VPR_0P)^{-1}VPR_0(z) . \quad (8.21)$$

Der Witz dabei ist, dass die Bildung der Inversen in dem niedrig dimensionalen Raum  $P\mathcal{H}$  stattfindet, im einfachsten Fall  $r = 1$  ist dies einfach eine skalare Funktion und wir können mit  $V = v|\varphi\rangle\langle\varphi|$  schreiben

$$R(z) = R_0(z) + v \frac{R_0(z)|\varphi\rangle\langle\varphi|R_0(z)}{1 + v\langle\varphi|R_0(z)|\varphi\rangle} . \quad (8.22)$$

Eigenwerte von  $H$  entsprechen Polen der Resolvente  $R(z)$ , also Stellen an denen der Nenner verschwindet, wenn nicht gerade auch der Zähler durch  $R_0(z)$  einen Pol hat. Wir betrachten dies im allgemeinen Rang- $r$  Fall. Sei also  $(a, b) \subset \mathbb{R}$  eine Lücke im Spektrum von  $H_0$ . Das heißt, dass für  $a < \lambda < b$  die Resolvente  $R_0(\lambda)$  ein wohldefinierter beschränkter Operator ist. Wir suchen nun nach Eigenwerten des gestörten Operators  $H$  in der Lücke. Die Eigenwertgleichung können wir mit Hilfe der Resolvente äquivalent umformen:

$$\begin{aligned} (H_0 + V)\varphi &= \lambda\varphi \\ (H_0 - \lambda)\varphi &= -VP\varphi \\ \varphi &= -R_0(\lambda)VP\varphi \end{aligned}$$

Dies lesen wir als eine Gleichung für den Eigenvektor, für den es ausreicht seine Projektion  $P\varphi = \tilde{\varphi}$  zu kennen. Damit das so aus  $\tilde{\varphi}$  berechnete  $\varphi$  tatsächlich ein Eigenvektor ist, muss die Projektion der linken Seite tatsächlich wieder  $\tilde{\varphi}$  ergeben, also die Gleichung  $P\tilde{\varphi} + PR_0(\lambda)V\tilde{\varphi} = 0$  gelten. Da per Definition  $V$  auf dem Unterraum  $P\mathcal{H}$  invertierbar ist (sonst könnten wir ja  $r$  verkleinern), können wir diese Gleichung noch mit  $V$  multiplizieren. Damit ist die Bedingung dafür, dass  $\lambda$  ein Eigenwert von  $H$  ist, gerade dass die  $r \times r$ -Matrix

$$S(\lambda) = P(V + VR_0(\lambda)V)P \quad (8.23)$$

einen Eigenwert 0 hat. Auch die Multiplizitäten stimmen überein.

Der Grund, hier den weiteren Faktor  $V$  einzuführen ist, dass  $S(\lambda)$  nun eine monoton wachsende Funktion in der Operatorordnung ist. Für  $\lambda$  außerhalb des Spektrums ist  $d/(d\lambda)(E - \lambda)^{-1} = (E - \lambda)^{-2} > 0$  für jedes  $E \in \text{spec}(H_0)$ . Der Funktionalkalkül von  $H_0$  und die Tatsache, dass für hermitesches  $V$  die Abbildung  $X \mapsto V XV$  die Ordnung erhält, ergibt dann für  $a < \lambda_1 < \lambda_2 < b$  die Operatorungleichung  $S(\lambda_1) < S(\lambda_2)$ . Sei nun  $s_k(\lambda)$  der  $k$ -te Eigenwert von  $S(\lambda)$ , von unten an mit Berücksichtigung der Multiplizitäten gezählt. Nach dem Rayleigh-Ritzschen Monotonieprinzip (4.56) ist dann jedes  $s_k(\lambda)$  eine strikt monoton wachsende Funktion, hat also höchstens eine Nullstelle. Da wir insgesamt  $r$  solche Funktionen haben, werden wir höchstens  $r$  Stellen  $\lambda \in (a, b)$  finden, in denen  $S(\lambda)$  singulär ist. Zusammenfassend:

Bei einer Störung  $H = H_0 + V$  mit  $V$  vom Rang  $r$  findet man in jeder spektralen Lücke von  $H_0$  höchstens  $r$  Eigenwerte von  $H$ .

Man kann auch untere Schranken an die Zahl der Eigenwerte geben, wenn man das Verhalten der Funktionen  $s_k(\lambda)$  an den Rändern des Intervalls genauer studiert. Nehmen wir der Einfachheit den Fall  $r = 1$ , also  $V = v|\varphi\rangle\langle\varphi|$ . Wenn an der Intervallgrenze  $a$  ein Eigenwert mit Eigenvektor  $\psi_a$  sitzt, dann verhält sich die projizierte Resolvente wie  $\langle\varphi|R_0(\lambda)|\varphi\rangle \approx (a - \lambda)^{-1}|\langle\varphi, \psi_a\rangle|^2 + \text{stetige Terme}$ . Wenn also nicht gerade das Skalarprodukt  $\langle\varphi, \psi_a\rangle$  verschwindet geht  $s_1(\lambda) \rightarrow -\infty$  für  $\lambda \rightarrow a^*$ . Mit dem analogen Argument für  $\lambda \rightarrow b$  erhalten wir also die Garantie, dass  $s_1$  wirklich eine Nullstelle haben muss. Zusammenfassend:

Sei  $H_0$  ein Operator mit nur einfachen Eigenwerten und  $H = H_0 + V$  eine Störung mit  $V = v|\varphi\rangle\langle\varphi|$ , wobei  $\varphi$  auf keinem der Eigenwerte von  $H_0$  senkrecht steht. Dann liegt zwischen je zwei Eigenwerten von  $H_0$  genau einer von  $H$ .

### 8.5.1 °Störung durch Randbedingungen

## 8.6 °Stabilität des Spektrums

## 8.7 Zeitabhängige Störungen

Wir haben bisher die Veränderung der Eigenwerte und Eigenvektoren bei einer Störung betrachtet. Das hat natürlich auch Konsequenzen für den Zeitentwicklungsoperator  $U_t$ . Oft ist man allerdings an zeitabhängigen Störungen interessiert, über die die Störungstheorie der Eigenwerte kaum etwas aussagt. Wir nutzen diese Gelegenheit, um überhaupt die Grundlagen für die Betrachtung zeitabhängiger Hamiltonoperatoren zurecht zu legen. Die Gleichung und den zugehörigen Entwicklungsoperator schreiben wir als

$$\frac{d}{dt}\Psi(t) = -iH(t)\Psi(t) \quad (8.24)$$

$$\Psi(t) = U(t, t_0)\Psi(t_0) \quad (8.25)$$

$$U(t, t_0) = \mathcal{T}e^{-i \int_{t_0}^t dt' H(t')} . \quad (8.26)$$

Der Zeitentwicklungsoperator  $U$  hat jetzt hier zwei Argumente und bildet für jede Lösung von (8.24) den Wert zur Zeit  $t_0$ , also etwa den vorgegebenen Startwert, in den Wert der Lösung zu späterer (oder auch früherer Zeit) ab. Er erfüllt offenbar die Zusammensetzungsregel  $U(t, s)U(s, r) = U(t, r)$  und  $U(t, t) = \mathbb{1}$  ist wie üblich unitär. Die letzte Zeile (8.26) ist eine symbolische Schreibweise als **zeitgeordnete Exponentialfunktion**, von der ich eher abraten würde. Wenn  $H$  konstant ist, gibt sie korrekt den üblichen Zeitentwicklungsoperator  $\exp(-iH(t - t_0))$ , dient also als Beruhigungsspiel für diejenigen, die hier nichts neues sehen wollen. Die Beiträge der verschiedenen  $H(t')$  sind hier irgendwie zeitlich zu sortieren, was auf keinen Fall darauf hinausläuft, erst das Integral, dann die Exponentialfunktion und schließlich den magischen Prozess der Zeitordnung auszuwerten. Gemeint ist eben genau die Lösung der Differentialgleichung (8.24).

Die Operatoren  $U(t, t_0)$  dienen auch als Greensche Funktionen für die Lösung von inhomogenen Gleichungen. Bei einer vorgegebenen Inhomogenität, also einer Funktion  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{H}$  erhalten wir

$$\frac{d}{dt}\Psi(t) = -iH(t)\Psi(t) + f(t) \quad (8.27)$$

$$\Psi(t) = U(t, t_0)\Psi(t_0) + \int_0^t dt' U(t, t')f(t') \quad (8.28)$$

Diese Gleichung benutzen wir nun für die freie Zeitentwicklung  $U_0(t, t_0)$  zum Hamiltonoperator  $H_0(t)$  mit der Inhomogenität  $f(t) = -iV(t)\Psi(t) = -iV(t)U(t, t_0)\Psi(t_0)$ , wobei  $H(t) = H_0(t) + V(t)$  gesetzt wurde. Dies ergibt

$$U(t, t_0) = U_0(t, t_0) - i \int_{t_0}^t dt' U_0(t, t')V(t')U(t', t_0) , \quad (8.29)$$

wobei wir noch den Startvektor  $\Psi(t_0)$  weggelassen haben, also direkt eine Operatorgleichung schreiben. Die gesuchte Zeitentwicklung  $U$  taucht hier auf beiden Seiten auf, wir können diese Gleichung also als Fixpunktgleichung lesen. Wir können sie durch Iteration lösen und bekommen damit gleich eine Lösung als Potenzreihe in  $V$ , die sogenannte Dyson-Reihe:

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= U_0(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0 \leq t_1 \leq \dots \leq t_n \leq t} dt_1 \dots dt_n I(t_n, \dots, t_1) \\ I(t_n, \dots, t_1) &= U_0(t, t_n)V(t_n)U_0(t_n, t_{n-1}) \dots V(t_1)U(t_1, t_0) , \end{aligned} \quad (8.30)$$

wobei wir anstatt eines Zeilenumbruchs den Integranden  $I(t_n, \dots, t_1)$  getrennt herausgeschrieben haben. Dieser Ausdruck bietet wohl den eigentlichen Hintergrund für die “zeitgeordnete Exponentialfunktion” in (8.26): Wenn wir  $H_0 = 0$ ,  $U_0 = \mathbb{1}$ , also  $H(t) = V(t)$  setzen und für nicht notwendig geordnete  $t$ -Argumente den Ausdruck

$I(t_n, \dots, t_1) = \mathcal{T}I(t_n, \dots, t_1)$  als den mit den absteigend geordneten definieren, dann können in (8.30) die Nebenbedingung weglassen, also jede Integration von  $t_0$  bis  $t$  laufen lassen. Wir erhalten dann jeden Term  $n!$  mal, müssen dies also durch einen Faktor  $1/(n!)$  kompensieren, wodurch die “Exponentialfunktion” (8.26) entsteht.

Wie steht es nun mit der Konvergenz der Dyson-Reihe? Da wir sie als Iteration einer Fixpunktgleichung auffassen, können wir die üblichen Abschätzungen des Banachschen Fixpunktsatzes anwenden, wie auch allgemein nach Picard-Lindelöf für Differentialgleichungssysteme. Wir betrachten also den Raum aller operatorwertigen Funktionen  $t \mapsto W(t)$  mit der Norm

$$\|W\|_\gamma = \sup_{t > t_0} e^{-\gamma t} \|W(t)\|, \quad (8.31)$$

wobei  $\gamma$  eine noch geeignet zu bestimmende Konstante ist, die regelt, wie stark Abweichungen zu großen Zeiten für die Norm gewichtet werden. Wir lesen dann die rechte Seite von (8.29) als das Ergebnis der Anwendung eines Operators  $\mathcal{D}$  auf  $W(t) = U(t, t_0)$ , sodass (8.29) zu der Gleichung  $W(t) = (\mathcal{D}W)(t)$  wird. Nehmen wir nun an, dass  $\|V(t)\| \leq \|V\|$  gleichmäßig in  $t$  beschränkt ist. Dann haben wir für zwei operatorwertige Funktionen  $W_1, W_2$

$$\begin{aligned} \|(\mathcal{D}W_1) - (\mathcal{D}W_2)\|_\gamma &= \sup_{t > t_0} e^{-\gamma t} \left\| \int_{t_0}^t dt' U_0(t, t') V(t') (W_1(t') - W_2(t')) \right\| \\ &\leq \sup_{t > t_0} e^{-\gamma t} \|V\| \int_{t_0}^t dt' \|W_1 - W_2\|_\gamma e^{\gamma t'} \\ &\leq \frac{\|V\|}{\gamma} \|W_1 - W_2\|_\gamma. \end{aligned} \quad (8.32)$$

Dabei haben wir die Dreiecksungleichung, die Unitarität von  $U_0(t, t')$ , die Normschränke für  $V$  und die Definition der  $\gamma$ -Norm in der Form  $\|W_1(t') - W_2(t')\| \leq e^{\gamma t'} \|W_1 - W_2\|_\gamma$  verwendet. Sobald wir also  $\gamma > \|V\|$  wählen ist klar, dass die Iteration des Operators  $\mathcal{D}$  von jedem Startwert aus (z.B.  $W = 0$ ) aus gegen den eindeutigen Fixpunkt konvergiert.

Die Verbindung zu Resolventen läuft über den Begriff der **Laplace-Transformierten**. Für eine Funktion  $f$  definieren wir diese Transformierte  $\mathcal{L}f$  durch

$$(\mathcal{L}f)(\eta) = \int_0^\infty dt e^{-\eta t} f(t) \quad (8.33)$$

Dies hängt sehr eng mit der Fouriertransformation zusammen. Außer dem Fehlen eines Faktors  $i$  im Argument gibt es noch die Beschränkung des Integrals auf die positive Halbachse, die besonders für Betrachtung von Übertragungsfunktionen bei linearer Signalverarbeitung nützlich ist. Für beschränktes  $f$  ist das Integral für  $\eta \in \mathbb{C}$ ,  $\Re \eta > 0$  konvergent. Die Laplace-Transformierte des Zeitentwicklungsoperators ist nun

$$(\mathcal{L}U)(\eta) = \int_0^\infty dt e^{-\eta t} U_t = \int_0^\infty dt e^{-(\eta + iH)t} = (\eta + iH)^{-1} = -iR(i\eta). \quad (8.34)$$

Wie bei Fourier-Transformierten werden Faltungen in Produkte überführt und zwar in diesem Fall

$$(f * g)(t) = \int_0^t ds f(t-s)g(s) \quad \Rightarrow \quad \mathcal{L}(f * g)(\eta) = (\mathcal{L}f)(\eta) (\mathcal{L}g)(\eta) \quad (8.35)$$

Wenn wir also die Resolventen von  $H$  und  $H_0$  nach (8.15) zusammenbringen bedeutet das für die Zeitentwicklungen  $U$  und  $U^{(0)}$ :

$$(\mathcal{L}U)(\eta) = (\mathcal{L}U^{(0)})(\eta) - i(\mathcal{L}U)(\eta)V(\mathcal{L}U^{(0)})(\eta) \quad (8.36)$$

$$= (\mathcal{L}U^{(0)})(\eta) + \sum_{n=1}^{\infty} (\mathcal{L}U^{(0)})(\eta) \left( -iV(\mathcal{L}U^{(0)})(\eta) \right)^n \quad (8.37)$$

Wobei wir zur zweiten Gleichung kommen entweder indem wir die erst iterieren oder indem wir die geometrische Reihe für  $(1 + iV(\mathcal{L}U^{(0)})(\eta))^{-1}$  einsetzen. Das Ergebnis können wir direkt zurücktransformieren in den Zeitbereich:

$$U_t = U_t^{(0)} - i \int_0^t ds U_{t-s} V U_s^{(0)} \quad (8.38)$$

$$= U_t^{(0)} + \sum_{n=1}^{\infty} i^n \int_0^{\infty} dt_0 \cdots \int_0^{\infty} dt_n \delta(t - \sum_{k=0}^n t_k) U_{t_n}^{(0)} V \cdots U_{t_1}^{(0)} V U_{t_0}^{(0)} \quad (8.39)$$

## Anmerkungen zum Kapitel 8

### Zu Abschnitt 8.1 (Störungstheorie)

Die Störungstheorie ist älter als die Quantenmechanik: Schrödinger verwendet sie 1926 schon als etablierte Methode zur Behandlung von Stark und Zeeman-Effekt. So gesehen ist es lächerlich, die Formel für die Energiekorrektur erster Ordnung nach Feynman oder Hellman zu benennen. Gute Standardreferenzen sind [Kat84] und der [RS80, Bd. 4].

### Zu Abschnitt 8.4 (Mehrere Parameter)

Kato schreibt dazu in seinem Standardwerk zur Störungstheorie nur einen kurzen Absatz [Kat84, II.§5.7] mit einem Gegenbeispiel, in dem die Analytizität der Eigenwert-Äste, also die zentrale Aussage der Einparameter-Störungstheorie nicht mehr gilt. Damit ist die Theorie für ihn anscheinend zu hässlich für eine weitere Betrachtung. Als Physiker können wir uns den Luxus solcher Geschmacksurteile allerdings nicht leisten. Eine gute Referenz zur Theorie mit mehreren Parametern (die auch die entsprechende Funktionentheorie mehrerer Veränderlicher voraussetzt) ist [Bau85].

## Aufgaben zum Kapitel 8

**Aufgabe 8.1:** Betrachten Sie die Störung einer reellen Diagonalmatrix durch eine zufällige hermitesche Matrix. Lösen Sie das Störungsproblem in hoher Ordnung, indem Sie in einem Computer-Algebra-Programm eine Störungsreihe (8.2) ansetzen, durch Koeffizientenvergleich ein Gleichungssystem gewinnen und dieses lösen.

**Aufgabe 8.2:** Für den Grundzustand ist nach (8.10) die Korrektur  $E_2$  zweiter Ordnung bei einer linearen Störung  $H = H_0 + \lambda H_1$  negativ. Das heißt,  $\lambda \mapsto E(\lambda)$  ist eine konkave Funktion. Zeigen Sie dies direkt mit Hilfe des Variationsprinzips (Abschnitt 4.5).  $\vdash H$





# Kapitel 9

○

## Classical Limit

9.1 Norm limit of observables

9.2 Stationary phase integrals

9.3 WKB-Approximation



# Kapitel 10

## Das Bellsche Theorem

### 10.1 Verborgene Variable: Ist Quantenmechanik etwas Neues?

Ein paar Unterschiede zwischen Quantenphysik und klassischer Physik haben wir schon kennengelernt: Die Quantenmechanik ist als statistische Theorie formuliert, nicht alle sind Observablen gemeinsam messbar [??] und die Einschränkung reiner Zustände eines Produktsystems kann gemischt sein [6.3]. Aber wie tief gehen solche Unterschiede? Könnte es nicht sein, dass es eine verfeinerte Beschreibung gibt, die wieder ganz klassisch ist? Der Zufall wäre dann nur Ausdruck der Unkenntnis dieser feineren Beschreibung, und dass nicht alles gemeinsam messbar scheint läge eben daran, dass wir die nötigen verfeinerten Messungen eben noch nicht geschafft haben. Diese hypothetische verfeinerte Beschreibung nennt man eine Beschreibung durch **verborgene Variablen**. Dabei bedeutet “verborgene” gerade, dass diese Variablen von der Quantenmechanik aus, und damit für alle gegenwärtige Experimentalphysik, nicht zugänglich sind.

Kann man sich solche Erweiterungen der Quantenmechanik vorstellen? Natürlich: Denn das Sammeln statistischer Daten ist ja rein klassische Statistik. Wenn ich also allen Teilchen irgendwie ihre gesamte Präparationsgeschichte und alle daran je gemessenen oder zu messenden Werte zuordne, bekomme ich eine klassische Beschreibung. Als kurzer Slogan: Die verborgenen Variablen sind die Messwerte. Oder “Gott hat’s eh schon immer gewusst”. Das einzig bemerkenswerte an dieser “Theorie” ist, dass sie Vorhersagekraft exakt gleich Null hat. Sie hat mit vielen anderen Vorschlägen gemeinsam, dass sie eigentlich das Papier nicht wert ist: Erst wenn man genauer formuliert, was man von einer solchen Theorie (außer der klassischen Grundstruktur) fordert, kann man erwarten eine nicht-triviale Aussage zu gewinnen.

Es ist vielleicht hilfreich, genauer zu definieren, was eine Theorie verborgener Variablen ist. Die verborgene Variable  $\lambda$  kann irgend eine mathematische Größe sein und

möge Werte in einer Menge  $\Lambda$  annehmen. Wenn alle quantenmechanischen Experimente in der Theorie modellierbar sein sollen, muss es zu jeder Observable  $F = \{F_x\}_{x \in X}$  “Ansprechfunktionen”  $f(x|F, \lambda)$  geben, interpretiert als die Wahrscheinlichkeit dafür an einem System, das durch den Wert  $\lambda$  der verborgenen Variablen charakterisiert wird, bei Messung der Observablen  $F$  den Wert  $x$  zu bekommen. Jeder Präparation  $\rho$  entspricht dann wenigstens ein Wahrscheinlichkeitsmaß  $\mu_\rho$ , sodass stets gilt

$$\text{tr}(\rho F_x) = \int \mu_\rho(d\lambda) f(x|F, \lambda) . \quad (10.1)$$

Im Allgemeinen kann die verborgene Variable viel mehr Detail enthalten als für diese Gleichung nötig. Entsprechend enthält eine komplette Theorie verborgener Variabler auch noch viel mehr Observable als für die Rückgewinnung der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeiten nötig. Von Johann von Neumann gab es einen frühen Beweis der Unmöglichkeit von verborgenen Variablen [vN32]. Eine der Schlüsselerkenntnisse seiner frühen Arbeiten war die Feststellung, dass Ja/Nein-Messungen der Quantenmechanik durch Projektionsoperatoren darzustellen seien. Seine Annahme war, dass Ja/Nein-Alternativen auch in einer erweiterten Theorie diesen Charakter behalten sollten. Im Sinne des letzten Absatzes war das die Annahme, dass für eine projektionswertige Observable (andere betrachtete er eh nicht) auch die Ansprechfunktionen  $f(x|F, \lambda)$  nur die Werte 0 oder 1 annehmen sollten. Diese Annahme führte er dann zum Widerspruch. Da von Neumanns Buch sehr bekannt war, war auch diese Aussage so geläufig, dass sich die ersten Vorschläge für verborgene Variable damit brüsten konnten, etwas zu leisten, was der große von Neumann für unmöglich erklärt hatte. Das ist im Nachhinein ebenso kurios wie die Gegenüberstellung der Masse der orthodoxen Physiker Kopenhagener Prägung gegen die kleine Sekte von Verborgenen-Variablen-Theoretikern: Denn damals wie heute geht in Wirklichkeit die Mehrheit der Physiker mehr oder weniger bewusst von einer Theorie verborgener Variablen aus, die wir nun als Beispiel ansehen.

Beispiel: *Die verborgene Variable ist  $\Psi$ .*

Nehmen wir  $\Psi$  als verborgene Variable, so können wir setzen:

$$f(x|F, \Psi) = \langle \Psi | F_x \Psi \rangle . \quad (10.2)$$

Als  $\mu_\rho$  nehmen wir irgend eine konvexe Zerlegung  $\rho = \sum_\alpha p_\alpha |\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|$  in reine Zustände, das heißt  $\mu_\rho = \sum_\alpha p_\alpha \delta_{\Psi_\alpha}$ , eine Mischung von Punktmaßen, zum Beispiel durch Spektralzerlegung. Das ist bei weitem nicht eindeutig, aber das war auch nicht gefordert. Man sieht auch, dass von Neumanns Annahme hier verletzt ist: Auch für einen Projektor  $P \neq 0, \mathbb{1}$  nimmt  $\langle \Psi | P \Psi \rangle$  alle Werte in  $[0, 1]$  an.  $\diamond$

Die berühmte Arbeit von Einstein, Podolsky und Rosen von 1935 brachte eine weitere Verschärfung des Arguments durch die Idee der Fern-Erkundung: Bei geeigneten quantenmechanischen Korrelationen [6.3] kann man jede Eigenschaft des einen Systems auch stellvertretend am anderen messen und so jede Störung ausschließen. Wie das zu einem Argument gegen die Einzelzustands-Interpretation wird, betrachten wir in Abschnitt 10.4. Noch weiter verschärft wurde das Argument 1964 von Bell. In seiner

Variante braucht man von der Quantenmechanik nur noch den Vorschlag für ein Experiment. Wenn das so ausfällt, wie die Quantenmechanik vorhersagt und wenn man Fernwirkungen ausschließt, dann widerlegt das nicht nur die Einzelzustands-Interpretation sondern *jede* Beschreibung durch klassische Variable. Dieser atemberaubend weitreichenden Konsequenz ist dieses Kapitel gewidmet. Ich habe im Laufe der Zeit immer wieder versucht, das Argument auf seinen einfachsten Kern zu bringen. Eine Variante aus der Mitte der 90er Jahre findet sich in Abschnitt 10.2.2, eine spätere, die ich 2010 mit drei Doktoranden für die Zeitschrift *Physik in unserer Zeit* entwickelt habe, macht den Anfang in Abschnitt ???. Bells eigenes Argument war eher ähnlich wie in Abschnitt 10.2.1. Eine mögliche Erklärung, warum Einstein nicht gleich den ganzen Weg zum Bellschen Theorem ging, findet sich in Abschnitt 10.4, wo auch eine nähere Beschreibung des Original-EPR Arguments gegeben wird.

## 10.2 Zwei Ableitungen

### 10.2.1 Korrelationstabeln und Ungleichungen

Der Kern der Geschichte sind die Daten eines Korrelationsexperiments wie in Abb. ??. Von einer Quelle werden Paare von Teilchen an zwei getrennte Labors verschickt, die üblicherweise von Alice und Bob betrieben werden. Für jeden der beiden stehen Messapparate  $A_1, A_2, \dots$  bzw.  $B_1, B_2, \dots$  zur Verfügung, an denen Messergebnisse  $a$  bzw.  $b$  abgelesen werden können. Die Wiederholung eines solchen Experiments liefert dann Wahrscheinlichkeiten

$$\mathbb{P}(a, b \mid A, B) . \quad (10.3)$$

Im einfachsten Fall sind die Ergebnisse  $a, b = \pm 1$  (die im folgenden  $\bigcirc, \times$  ersetzen werden) und auf beiden Seiten stehen jeweils zwei Apparate zur Verfügung. Damit sind durch Wahlen von  $A, B$  vier Experimente möglich, in denen jeweils die Häufigkeit von vier Ausgängen  $(a, b)$  bestimmt werden kann. Die Größen (10.3) können wir dann als Komponenten eines Vektors in  $\mathbb{R}^{16}$  auffassen, den wir als Korrelationstabelle für den gewählten Aufbau bezeichnen. Da Wahrscheinlichkeiten zwischen 0 und 1 liegen, liegen alle Korrelationstabellen in dem Würfel  $[0, 1]^{16}$ . Weitere triviale Einschränkungen ergeben sich aus den vier Normierungsbedingungen  $\sum_{a,b} \mathbb{P}(a, b \mid A_i, B_j) = 1$ . Die Menge der dann noch möglichen Korrelationstabellen bezeichnen wir mit  $K$ .

Betrachten wir den einfachsten Fall, entsprechend einer Quelle die lauter gleiche gedruckte Lotterielose produziert. Die “Lose” sind bedruckt mit dem Werte-Tupel  $\lambda = (a_1, a_2, b_1, b_2)$  mit  $a_i, b_j = \pm$ . Wenn das Tupel  $\lambda$  festliegt, sind die Wahrscheinlichkeiten entweder 0 oder 1, nämlich

$$\mathbb{P}(a, b \mid A_i, B_j) = \delta_{a,a_i} \delta_{b,b_j} = f(a|A_i, \lambda) f(b|B_j, \lambda) . \quad (10.4)$$

Dabei beschreiben die Funktionen  $f$  das “deterministische Ansprechen” des Lesevorgangs für jeweils das rechte oder das linke Symbol. Bei einer echten Lotterie gibt es

natürlich gemischte Lose mit verschiedenen  $\lambda$ . Allgemein entspricht das der Mischung verschiedener Quellen  $\mathbb{P}_i$  durch Umschalten mit einem Zufallsgenerator. Wenn der den Wert  $i$  mit Wahrscheinlichkeit  $p_i$  liefert, ist die resultierende Quelle die Konvexkombination  $\mathbb{P} = \sum_i p_i \mathbb{P}_i$ . Wir erhalten also Korrelationstabellen von der Form

$$\mathbb{P}(a, b \mid A_i, B_j) = \int \mu(d\lambda) f(a|A_i, \lambda) f(b|B_j, \lambda) , \quad (10.5)$$

wobei  $\mu$  die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Lostypen ist. Offenbar können die Wahrscheinlichkeiten einer gemischten Lotterie so geschrieben werden. Der Ausdruck (10.7), der von John Bell [†] stammt, lässt noch mehr zu: Eine beliebige “verborgene Variable”  $\lambda$  kodiert hier die Eigenschaften der Teilchenpaare, die Quelle wird durch das Wahrscheinlichkeitsmaß  $\mu$  beschrieben und von Detektoren wird nur gefordert, dass bei bekannten Eigenschaften der Teilchenpaare die Messergebnisse der beiden Apparate unabhängig sind und auch nicht etwa das Ergebnis  $a$  von der Wahl  $B_j$  abhängt. Die Ansprechwahrscheinlichkeiten  $\mathbb{P}(a \mid A_i, \lambda)$  müssen keineswegs 0 oder 1 sein: Die Messapparate brauchen also nicht deterministisch zu arbeiten. Damit ist (10.7) eine direkte Erweiterung von (10.1) auf zwei getrennte Messungen und der allgemeinste Ausdruck, den die klassische Wahrscheinlichkeitstheorie für die Korrelation der Zufallsvariablen “Ansprechen bei Alice” und “Ansprechen bei Bob” zur Verfügung stellt. Wir nennen also die Menge all solcher Korrelationstabellen  $C \subset K$  für “classical” und weil  $K$  schon vergeben ist.

Wir müssen noch klären, dass  $C$  genau aus den gemischten Lotterieverteilungen besteht, dass also die Verallgemeinerung auf beliebige Variable  $\lambda$  und nicht-deterministischen Messungen keine neuen Korrelationen hervorbringt. Wir verwandeln zunächst eine beliebige Theorie in eine mit deterministischen Ansprechfunktionen  $f(a|A_i, \lambda)$ . Dazu erweitern wir die gegebene Variable um zwei weitere Komponenten  $\eta_1, \eta_2 \in [0, 1]$ , die unabhängig von  $\lambda$  und voneinander im Intervall  $[0, 1]$  gleichverteilt sind. Die neue Variable ist als  $\tilde{\lambda} = (\lambda, \eta_1, \eta_2)$  und das Wahrscheinlichkeitsmaß ist  $\tilde{\mu}(d\tilde{\lambda}) = \mu(d\lambda) d\eta_1 d\eta_2$ . Als modifizierte Ansprechfunktionen definieren wir

$$\tilde{f}(a \mid A_i, \lambda, \eta_1) = \begin{cases} 1 & \text{if } f(a|A_i, \lambda) \leq \eta_1 \\ 0 & \text{if } f(a|A_i, \lambda) > \eta_1 \end{cases} , \quad (10.6)$$

und entsprechend für  $\tilde{\mathbb{P}}(b \mid B_j, \lambda, \eta_2)$ . Bei der Auswertung von (10.7) mit den modifizierten Größen kann man dann die Integrale über  $\eta_1$  und  $\eta_2$  ausführen und erhält genau den alten Ausdruck zurück. Nebenbei heben wir damit gezeigt, dass bei all den Diskussionen um verborgene Variable die Frage des Determinismus, das heißt ob die Kenntnis der verborgenen Variable die Ergebnisse aller Messungen bestimmt, eine untergeordnete Rolle spielt<sup>1</sup>.

Wenn wir nun ein Modell haben, in dem die Ansprechfunktionen nur die Werte 0, 1 annehmen können ergibt jede Wahl einer Observable, z.B.  $A_1$  eine Zerlegung der

<sup>1</sup>In einer Phase, in der Einstein und Born in ihren Briefen [BE69] aneinander vorbeiredeten, hat Pauli geholfen die Situation zu klären: Nach Gesprächen mit Einstein schreibt er einen Brief an Born, in dem er betont, (Zitat)

Menge aller  $\lambda$  in diejenigen mit  $f(+|A_1, \lambda) = 1$  und diejenigen mit  $f(-|A_1, \lambda) = 1$ . Wenn wir die Durchschnitte der vier binären Zerlegungen (für  $A_1, A_2, B_1, B_2$ ) bilden, haben wir eine Zerlegung in 16 Stücke, die gerade durch die verschiedenen Lostypen gegeben sind. Offenbar kommt es für die Auswertung von (10.7) nur auf die Integrale über diese Stücke an und dies sind gerade die Wahrscheinlichkeiten für eine äquivalente gemischte Lotterie.

Die in der Geschichte angegebene Korrelationstabelle gehört sicher nicht zu  $C$ . Wie wir gezeigt haben, ist sie aber in der Quantenmechanik möglich, gehört also zur Menge  $Q$  der Korrelationstabellen von der Form

$$\mathbb{P}(a, b \mid A_i, B_j) = \text{tr } \rho F_A(a) \otimes F_B(b) , \quad (10.7)$$

wobei  $\rho$  ein Dichteoperator auf einem Tensorprodukt-Hilbertraum ist und  $F_A, F_B$  geeignete Observablen der Teilsysteme. Es gilt  $Q \supset C$ , weil wir jeden klassischen Fall in der Quantenmechanik mit diagonalen Matrizen realisieren können.

Alle betrachteten Korrelationstabellen haben die Eigenschaft, dass sie es Alice und Bob nicht erlauben zu kommunizieren. Die einzige Möglichkeit dafür wäre in dem betrachteten eingeschränkten Szenario, dass Alice ihre Botschaft in die Wahl von  $A_1$  oder  $A_2$  kodiert und Bob dies an veränderten Wahrscheinlichkeiten seiner Messergebnisse spürt, denn etwas das Alice tut muss einen beobachtbaren Effekt bei Bob haben. Wir nennen eine Korrelationstabelle **kommunikationsfrei**<sup>2</sup>, wenn dies unmöglich ist, das heißt, wenn

$$\begin{aligned} \sum_a \mathbb{P}(a, b \mid A, B) & \quad \text{unabhängig von } A \\ \sum_b \mathbb{P}(a, b \mid A, B) & \quad \text{unabhängig von } B \end{aligned} \quad (10.8)$$

für alle Messungen  $A, B$ , die zu der gegebenen Tabelle gehören. Für die Quantenmechanik ist dies stets erfüllt, weil alle Observable die gleiche Normierungsbedingung  $\sum_a F_A(a) = \mathbb{1}$  erfüllen. Die Menge der kommunikationsfreien Korrelationstabellen bezeichnen wir mit  $N$  und haben so die Inklusionen der

$$C \subset Q \subset N \subset K . \quad (10.9)$$

Es stellt sich die Frage, wie man entscheiden kann, in welche dieser Mengen eine gegebene Korrelationstabelle fällt. Bei  $N$  ist das einfach, weil ja (10.8) einfach nachgerechnet werden kann. Bei  $C$  oder  $Q$  könnte es aber am eigenen Unvermögen liegen, wenn man keine Darstellung der gesuchten Form findet. Hier hilft die Geometrie konvexer Mengen: Sie haben stets eine Beschreibung durch lineare Ungleichungen. Geometrischer formuliert: Eine abgeschlossene konvexe Menge ist der Durchschnitt aller abgeschlossenen Halbräume, die sie enthalten. Speziell für **Polytope**, also konvexe Mengen, die von endlich vielen Extrempunkten erzeugt werden, braucht man

---

<sup>2</sup>Engl.: no-signalling

nur endlich viele Ungleichungen. Sie entsprechen gerade den Seiten<sup>3</sup> des Polytops, den flachen Randstücken maximaler Dimension. Für  $C$  haben wir die Extrempunkte angegeben und abgezählt:  $C$  ist also ein Polytop. Die begrenzenden Ungleichungen von  $C$  nennt man **Bell-Ungleichungen** und ihre Entsprechung für  $Q$  nennt man **Tsirelson-Ungleichungen**, jeweils nach den Physikern die die ersten aufgestellt haben. Im Allgemeinen ist es nicht leicht, diese Ungleichungen alle aufzufinden, speziell wenn wir mehr Observable mit mehr Ausgängen und evtl auch mehr Parteien zulassen.

Für das einfachste Beispiel einer solchen Ungleichung führen wir die “Korrelation” der Ergebnisse  $a, b = \pm 1$  ein, nämlich

$$\begin{aligned} C(A, B) &= \sum_{a,b} ab \mathbb{P}(a, b \mid A, B) \\ &= \mathbb{P}(+,+ \mid A, B) + \mathbb{P}(-,- \mid A, B) - \mathbb{P}(+,- \mid A, B) - \mathbb{P}(-,+ \mid A, B) , \end{aligned} \quad (10.10)$$

also die Wahrscheinlichkeit für gleiche Ergebnisse minus die für verschiedene Ergebnisse. Für jede Korrelationstabelle  $\mathbb{P}$  betrachten wir dann die sogenannte **Bell-Korrelation**

$$\beta(\mathbb{P}) = C(A_1, B_1) + C(A_1, B_2) + C(A_2, B_1) - C(A_2, B_2) . \quad (10.11)$$

Für die klassischen Extrempunkte  $\mathbb{P}_\lambda$ , die durch einen Lostyp  $\lambda = (a_1, a_2, b_1, b_2)$  gegeben sind erhalten wir  $C(A_i, B_j) = a_i b_j$ , also

$$\beta(\mathbb{P}_\lambda) = a_1(b_1 + b_2) + a_2(b_1 - b_2) . \quad (10.12)$$

Von diesen Summanden ist immer einer gleich Null, je nachdem, ob  $b_1 = b_2$  oder  $b_1 = -b_2$ . Der andere Summand hat dann Betrag 2. Insgesamt gilt also  $|\beta(\mathbb{P}_\lambda)| = 2$  und damit die Bell-Ungleichung

$$\boxed{\mathbb{P} \in C \Rightarrow \beta(\mathbb{P}) \leq 2} , \quad (10.13)$$

die man auch die Clauser-Horne-Shimony-Holt oder CHSH-Ungleichung nennt. Da jeweils die Hälfte der Extrempunkte auf der durch  $\beta = 2$  definierten Hyperebene in  $\mathbb{R}^{16}$  liegt, ist klar, dass sie eine Seite von  $C$  beschreibt. Weitere Ungleichungen dieses Typs bekommt man durch Verschieben des Minuszeichens in (10.11) und ein globales Vorzeichen. Zusammen mit den Positivitätsungleichungen und den Identitäten (10.8) ist dies ein vollständiger Satz von Ungleichungen für  $C$  in diesem einfachsten Fall. In der Geschichte ist die Korrelation  $0,7 = 0,85 - 0,15$  realisiert für alle in (10.11) positiv eingehenden Terme und  $-0,7$  für den letzten Term; insgesamt also  $\beta(\mathbb{P}) = 2,8$ . Die CHSH-Ungleichung ist also verletzt: Diese Korrelationstabelle lässt sich nicht klassisch erzeugen. Das in der Geschichte gegebene Argument läuft übrigens genau auf eine Ableitung der CHSH-Ungleichung hinaus: Bob wird genau dann dadurch zu einer fehlerhaften Wahrscheinlichkeitseinschätzung veranlasst, wenn  $\beta > 2$ .

---

<sup>3</sup>Engl.: faces



Im Beispiel wurde gezeigt, dass die 0,7 für den Singlet-Zustand durch  $1/\sqrt{2}$  ersetzt werden kann, was zur Bell-Korrelation  $2\sqrt{2} \approx 2,82$  führt. Dies ist auch der größte erreichbare Wert: Die zugehörige Tsirelson-Ungleichung [†] lautet

$$\boxed{\mathbb{P} \in Q \Rightarrow -2\sqrt{2} \leq \beta(\mathbb{P}) \leq 2\sqrt{2}} \quad (10.14)$$

Wir geben hier eine Ableitung, die auch den Fall der Gleichheit noch charakterisiert: Wenn ein Experiment tatsächlich den maximalen Wert liefert, können wir schließen, dass genau das Singlet-Beispiel vorliegt. Genauer: Wir können die Hilbertraum  $\mathcal{H}_A$  zerlegen in  $\mathcal{H}_A = \mathbb{C}^2 \otimes \widetilde{\mathcal{H}}_A \otimes \mathcal{N}_A$  und entsprechend für  $B$ , sodass

*Beweis:* Zunächst ist eine Observable  $A$  mit den Ausgängen  $+1$  und  $-1$  charakterisiert durch den Operator  $F_A(+1) - F_A(-1) = 2F_A(+1) - \mathbb{1}$ . Wir bezeichnen ihn der Einfachheit direkt mit  $A$ . Dieser Operator liefert also den Erwartungswert des Vorzeichens  $\pm 1 \in \mathbb{R}$ , wobei die Spektralzerlegung von  $A$  nichts mit den Messwerten zu tun hat, da die Observable  $F_A(\pm 1) = (\mathbb{1} \pm A)/2$  im Allgemeinen nicht projektionswertig ist. Die Einschränkungen an die erlaubten  $A$  ergeben sich aus  $F_A(\pm 1) \geq 0$  und sind  $-\mathbb{1} \leq A \leq \mathbb{1}$ .

Mit dieser Notation für die vier beteiligten Observablen  $A_1, A_2, B_1, B_2$  können wir die Bell-Korrelation im Zustand schreiben als  $\beta = \text{tr } \rho T$  mit dem "Testoperator"

$$T = A_1 \otimes (B_1 + B_2) + A_2 \otimes (B_1 - B_2) . \quad (10.15)$$

Wir müssen für diesen Operator zeigen, dass  $\|T\| \leq 2\sqrt{2}$ . Dafür führen wir zwei nicht-hermitesche Hilfsoperatoren ein nämlich

$$A = \frac{1}{2}(A_1 + iA_2) \otimes \mathbb{1} \quad \text{und} \quad B = \frac{1}{2\sqrt{2}} \mathbb{1} \otimes ((B_1 + B_2) - i(B_1 - B_2)) . \quad (10.16)$$

Dann rechnet man leicht nach, dass  $A^*A + AA^* = (A_1^2 + A_2^2)/2 \leq \mathbb{1}$  und  $B^*B + BB^* = (B_1^2 + B_2^2)/2 \leq \mathbb{1}$ . Wenn wir auf den Operatoren auf  $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  das Skalarprodukt  $\langle X, Y \rangle_\rho = \text{tr } \rho(X^*Y + YX^*)$  und die entsprechende Seminorm  $\|\cdot\|_\rho$  einführen bekommen wir also einerseits  $\|A\|_\rho \leq 1$  und  $\|B\|_\rho \leq 1$ . Andererseits ist

$$\beta = \text{tr } \rho T = 2\sqrt{2} \Re \langle A, B \rangle_\rho . \quad (10.17)$$

Also gilt nach der Schwarzschen Ungleichung  $|\beta| \leq 2\sqrt{2}$ .

Werden wir also den Fall der Gleichheit aus. Zunächst muss  $\|A\|_\rho = \|B\|_\rho = 1$  gelten, sodass die positiven Operatoren  $(\mathbb{1} - A_k^2) \otimes \mathbb{1}$  Erwartungswert null haben und entsprechend für  $B$ . Damit ist nach (2.62) auch  $(\mathbb{1} - A_k^2) \otimes \mathbb{1} \rho = \mathbb{1} \otimes (\mathbb{1} - B_k^2) \rho = 0$ . Ferner ist offenbar  $\langle A, B \rangle_\rho = 1$ , als  $\|A - B\|_\rho^2 = 0$ . Dieser Ausdruck besteht wieder aus zwei positiven Termen, sodass wir schließen können:  $(A - B)\rho = (A - B)^*\rho = 0$ .

Sei nun  $N_A$  der größte Projektor auf  $\mathcal{H}_A$ , sodass  $\text{tr } \rho(N_A \otimes \mathbb{1}) = 0$ . Dann gilt  $(N_A \otimes \mathbb{1})\rho = (N_A \otimes \mathbb{1})\rho = 0$  und wir können die Operatoren  $A_k$  durch  $A'_k = (\mathbb{1} - N_A)A_k(\mathbb{1} - N_A)$  ersetzen, ohne irgendwelche Erwartungswerte und die Prämisse  $\beta = 2\sqrt{2}$  zu verändern. Im folgenden betrachten wir daher nur  $A'_k$

■

[►Non-local boxes]

### 10.2.2 Der Satz vom Bellschen Telefon

Einstein hat im Zusammenhang mit verschränkten Quantenteilchen einmal von “spukhaften Fernwirkungen” gesprochen. Das wirft die Frage auf, was eine Verletzung der Bellschen Ungleichungen mit Kommunikation zu tun hat. Auch in der Geschichte kam ja die Untersuchung vor, ob vielleicht die beiden Loshälften miteinander kommunizieren. Als ein **Bellsches Telefon** bezeichne ich jeden Apparat, der es ermöglicht, Korrelationen zu einer Signalübertragung auszunutzen. Wir hatten schon geklärt, dass quantenmechanische Korrelationstabellen immer kommunikationsfrei sind ( $Q \subset N$ ). Im Rahmen der Quantenmechanik ist das Bellsche Telefon eine unmögliche Maschine, sogar die Spitze einer Hierarchie von unmöglichen Maschinen, wie wir in Abschnitt 10.3.4 zeigen werden. In der Tat wäre eine Theorie, die das Bellsche Telefon zulässt, also die Bedingungen (10.8) verletzt, mehr als merkwürdig. Sie würde es Bob erlauben Schlüsse über Alices Apparatwahl zu treffen sogar bevor sie diese Wahl getroffen hat: Denn bei genügend weit getrennten Laboren ist die Korrelation unempfindlich gegenüber der Wahl des genauen Messzeitpunkts. Wenn die Teilchen um 12 Uhr verschickt werden und eine Stunde später bei den weit getrennten Laboren ankommen, könnte Bob sofort messen und Alice zwei Stunden später. Trotzdem könnte Bob einen guten Tip abgeben, wie sich Alice entscheiden wird. Aber was ist der Status dieser Aussage, wenn Alice ihre Mittagspause verlängert hat und ihr Teilchen ohne Messung vernichtet wurde? Ein Bellsches Telefon wäre also immer eine massive Verletzung der Kausalität. Der einzige Grund, dass Einstein dies nicht eine “absurde Fernwirkung” nennt sondern eben eine “spukhafte”, ist, dass sie sich mit quantenmechanischen Mitteln eben nicht realisieren lässt.

Zunächst muss klar gemacht werden, dass das bloße Vorhandensein einer Korrelation nicht zur Nachrichtenübertragung taugt. Denn um die Korrelation überhaupt festzustellen, müssen Alice und Bob ja ihre Ergebnisse in jedem Einzelexperiment zunächst einmal zusammenbringen, also ohnehin schon Informationen austauschen. Es gibt erschreckend viele Darstellungen der Ungleichungen, in denen schon die Korrelation selbst als mysteriös verkauft wird. Ich schlage hier als einfaches Kriterium den **Pingpongball-Test** vor. Man substituiere also für alle quantenmechanischen Teilchen in den Ausführungen eines Autors Pingpongball. Wenn dann das, was als paradox bezeichnet wird, immer noch wahr ist, hat der Autor nichts begriffen. Als paradox bezeichnet wird dann — so transformiert — gelegentlich das Beispiel einer Kiste mit einem Pingpongball, in die eine Trennwand eingeschoben wird und deren Hälften weit voneinander getrennt werden. Wenn ich nun meine Hälfte öffne und einen Ball finde, dann weiß ich sofort, also “mit Überlichtgeschwindigkeit” dass der Empfänger der zweiten Hälfte, z.B. auf dem Mond, keinen Ball hat! Solchen Schwachsinn findet man auch bei “seriösen Autoren”.

Um ein Bellsches Telefon zu konstruieren, müssen wir den Rahmen der Quantenmechanik verlassen. Wir werden das tun, indem wir — im Gegensatz zur Quantenmechanik — annehmen, die beiden von Bob verwendeten Messungen ließen eine gemeinsame Messung zu. In der Geschichte würde dies bedeuten, dass wir Bob einen trickreichen Apparat erfinden lassen, der es erlaubt, die Einschränkung zu umgehen, dass Gewinn- und Testfeld nicht beide geöffnet werden können. Nennen wir diesen hypothetischen Apparat  $B_1 \& B_2$ . Mit ihm können wir noch zwei Korrelationsexperimente bilden, die sich in der Wahl von Alices Apparat unterscheiden. Wir betrachten also die vereinfachte Korrelationstabelle

$$\mathbb{P}(a, (b_1, b_2) \mid A_i, B_1 \& B_2) = p_i(a, b_1, b_2) , \quad (10.18)$$

wobei wir noch eine Abkürzung für die erzielten Wahrscheinlichkeiten eingeführt haben. Als “gemeinsame Messung” bezeichnen wir den hypothetischen neuen Apparat, wenn das Ignorieren einer Anzeige zu einem der schon bekannten statistischen Ergebnisse führt, also

$$\begin{aligned} \sum_{b_2} p_i(a, b_1, b_2) &= \mathbb{P}(a, b_1 \mid A_i, B_1) \\ \sum_{b_1} p_i(a, b_1, b_2) &= \mathbb{P}(a, b_2 \mid A_i, B_2) \end{aligned} \quad (10.19)$$

Wir nehmen nun an, dass Alice durch die Wahl von  $A_1$  vs.  $A_2$  ein Signal sendet. Inspiriert von der Geschichte wählen wir für Bob das Dekodierungsverfahren:

$$\text{Tippe auf } \begin{cases} A_1 & \text{wenn } b_1 = b_2 \\ A_2 & \text{wenn } b_1 \neq b_2 \end{cases} . \quad (10.20)$$

Wir nehmen noch an, dass Alice die beiden Werte mit gleicher Wahrscheinlichkeit benutzt, wie sich das für eine effizient kodierte Quelle gehört. Dann können wir die Wahrscheinlichkeit  $p_{\text{ok}}$  abschätzen, dass Bob mit dieser Regel richtig rät. Wir haben

$$\begin{aligned} p_{\text{ok}} &= \frac{1}{2} \sum_{a, b_1, b_2} p_1(a, b_1, b_2) \left| a \right| \left| \frac{b_1 + b_2}{2} \right| \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{a, b_1, b_2} p_2(a, b_1, b_2) \left| a \right| \left| \frac{b_1 - b_2}{2} \right| \\ &\geq \frac{1}{2} \sum_{a, b_1, b_2} p_1(a, b_1, b_2) \left| a \right| \left( \frac{b_1 + b_2}{2} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{a, b_1, b_2} p_2(a, b_1, b_2) \left| a \right| \left( \frac{b_1 - b_2}{2} \right) \\ &= \frac{1}{4} \sum_{a, b_1} \mathbb{P}(a, b_1 \mid A_1, B_1) a b_1 + \frac{1}{4} \sum_{a, b_2} \mathbb{P}(a, b_2 \mid A_1, B_2) a b_2 + \\ &\quad + \frac{1}{4} \sum_{a, b_1} \mathbb{P}(a, b_1 \mid A_2, B_1) a b_1 - \frac{1}{4} \sum_{a, b_2} \mathbb{P}(a, b_2 \mid A_2, B_2) a b_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{4}(C(A_1, B_1) + C(A_1, B_2) + C(A_2, B_1) - C(A_2, B_2)) \\
&= \frac{\beta}{4}.
\end{aligned} \tag{10.21}$$

Dabei ist die erste Summe nach dem ersten Gleichheitszeichen die Summe aller Wahrscheinlichkeiten für Fälle in denen Alice  $A_1$  verwendet (das gibt den Faktor  $1/2$ ) und in denen außerdem Bob richtig liegt: Der Faktor unter der Summe ist nur eine für das folgende geschickte Weise, zu schreiben “1, wenn  $b_1 = b_2$  und 0 sonst”. Entsprechendes gilt für den zweiten Term und  $A_2$ . Am “ $\geq$ ”-Zeichen wird nur die Ungleichung  $|x| \geq x$  benutzt. Die vier so entstehenden Terme werden getrennt behandelt. Da in jedem über eine Variable  $b_i$  summiert wird, die nicht im Produkt  $ab$  auftaucht, kann die Bedingung an gemeinsame Messung ins Spiel gebracht werden, wodurch gerade die Korrelationskoeffizienten aus der Definition der Bell-Korrelation auftauchen.

Wir fassen diese Rechnung im “Satz vom Bellschen Telefon” zusammen:

Wenn Bob über einen gemeinsamen Messapparat  $B_1$  &  $B_2$  für  $B_1$  und  $B_2$  verfügt und Alice die beiden Bits mit gleicher Wahrscheinlichkeit versendet, dann tippt Bob nach der angegebenen Regel bei jedem gesendeten Bit mit Wahrscheinlichkeit  $\geq \beta/4$  korrekt.

Natürlich ist dieser Satz überhaupt nichts wert, solange  $\beta \leq 2$  ist. Denn dann garantiert er kein besseres Ergebnis, als Bob auch durch völlig blindes Tippen erreichen könnte (nämlich die Trefferquote  $1/2$ ). Sobald aber  $\beta > 2$  ist, findet eine echte Signalübertragung statt. Bei kleinem  $(\beta - 2)$  ist es ein sehr verrauschter Kanal, der aber durch Erhöhung der Redundanz (alles sehr oft senden) beliebig sicher gemacht werden kann. In den quantenmechanisch realisierbaren Fällen läge die Trefferquote bei  $2^{-1/2} \approx 0.7$ .

Die Annahme der gemeinsamen Messbarkeit ist eine typisch klassische Eigenschaft und in jeder Theorie mit verborgenen Variablen erfüllt. Der Satz vom Bellschen Telefon sagt also, dass in jeder klassischen Theorie (sofern sie eine Verletzung der Bellschen Ungleichungen erlaubt) akausale Signale vorkommen. Man kann natürlich versuchen, sich darauf herauszureden, dass diese Variable eben *verborgen* sind und dass der gemeinsame Messapparat, den wir eingeführt haben, irgendwie illegal auf die verborgenen Variablen zugreift. Wie auch immer, eine solche Theorie trägt eine zusätzliche Beweislast, nämlich die, zu erklären warum die akausalen Signale nicht sichtbar werden. Es muss also einen Mechanismus geben, der wiederum erklärt, *warum* die gemeinsame Messung der beiden Observablen von Bob nicht oder nur sehr schwer realisiert werden kann.

Man könnte sich vorstellen, auch Alice hätte einen gemeinsamen Messapparat bei Impossible Machines Inc. erworben. Dies führt dann allerdings auf eine gemeinsame Wahrscheinlichkeitsverteilung für alle vier Messergebnisse und wieder zu dem Schluss, dass die CHSH-Ungleichung gar nicht verletzt werden kann.

## 10.3 Das Bellsche Theorem

### 10.3.1 Zusammenfassung des Bellschen Theorems

Als Bellsche Theorem bezeichne ich die Schlussfolgerung aus den Bellschen Ungleichungen. Das logische Muster ist:

Keine Theorie kann alle drei folgenden Eigenschaften besitzen:

- (1) Empirische Korrektheit**
- (2) Klassikalität**
- (3) Lokalität**

Was damit jeweils gemeint ist, muss noch genauer formuliert werden. Ja nachdem bekommt man auch verschiedene Aussagen. Die Ableitung der Bellschen Ungleichungen in Abschnitt 10.2.1 war (2: Annahme verborgener Variablen) und (3: Statistische Unabhängigkeit entfernter Messungen bei bekanntem  $\lambda$ )  $\Rightarrow \beta \leq 2$ , also Nicht(1). Beim Bellschen Telefon in Abschnitt 10.2.2 hatten wir gezeigt (2: Existenz einer gemeinsamen Messung für Bob) und (1:  $\beta > 2$ )  $\Rightarrow$  Telefon funktioniert, also Nicht(3). Beides ist logisch äquivalent zu “Nicht ((1) und (2) und (3))”. In der Quantenmechanik, wie sie in diesem Buch betrieben wird, gelten (1) und (3), aber (2) wird aufgegeben.

**(1) Empirische Korrektheit  $\beta > 2$**

Dies ist die am wenigsten kontroverse, da experimentell überprüfbare Tatsache. Es sollte allerdings nicht verschwiegen werden, dass man auch hier noch Fragezeichen anbringen kann. Wir diskutieren sie in Abschnitt ??

**(2) Klassikalität**

Hier gibt es recht verschiedene Varianten, von denen die direkteste die Annahme von verborgenen Variablen ist. Für das Bellsche Telefon hatten wir eine Annahme gemeinsamer Messbarkeit gewählt. Viele Formulierungen hängen auch mit einer Forderungen nach Objektivität oder Realismus zusammen, wonach die Eigenschaften physikalischer Systeme unabhängig von jeglicher menschlicher Invention, also von Akten der Präparation oder Messung festliegen sollten, auch wenn wir diese Eigenschaften nicht alle herausfinden können. Die Zusammenfassung dieser Eigenschaften (der “ontische Zustand”<sup>[†]</sup>) ist dann die verborgene Variable. Ein Problem mit dieser Annahme ist, dass sie manchen als so selbstverständlich gilt, dass sie gar nicht als Annahme erscheint.

**(3) Lokalität**

Dieses Prinzip ist hier formuliert als “Unmöglichkeit des Bellschen Telefons”. In Abschnitt 10.2.1 war es die Faktorisierungsannahme bei gegebener verborgenen Variablen, wobei die Ansprechraten nicht von der entfernten Instrumentenwahl abhängen. Oft wird hier auch Einsteinsche Signalkausalität eingesetzt, also die

Unmöglichkeit überlichtschneller Signale. In der Quantenfeldtheorie ist dies realisiert durch die Vertauschbarkeit von Observablen mit raumartig getrennter Lokalisierung.

In der Quantenmechanik gilt offenbar (1), denn wir haben ja explizit Fälle mit  $\beta = 2\sqrt{2}$  gefunden. Es gilt auch (3) im Sinne der Unmöglichkeit des Bellschen Telefons: Dies folgt einfach aus den in Abschnitt ?? formulierten Regeln zur Beschreibung zusammengesetzter Systeme. Betrachten wir noch einmal ein allgemeines Korrelationsexperiment, in dem Bob einen Apparat  $B$  mit Ausgängen  $b$  verwendet. Die Ansprechoperatoren dieses Apparats seien  $F_B(b) \geq 0$ , wobei die Normierungsbedingung  $\sum_b F_B(b) = \mathbb{1}$  ausdrückt, dass in jedem Experiment eines der Ergebnisse  $b$  angezeigt wird. (Alles entsprechend für Alice). In einem Korrelationsexperiment werden nun wieder die Größen  $\mathbb{P}(a, b \mid A, B) = \text{tr}(\rho(F_A(a) \otimes F_B(b)))$  gemessen, aus denen sich auch die Wahrscheinlichkeiten  $\mathbb{P}(b \mid A, B) = \sum_a \mathbb{P}(a, b \mid A, B)$  ergeben, die Bob feststellen kann, ohne Alices Anzeige von  $a$  ablesen zu können. Im Prinzip könnte dieser Ausdruck noch von  $A$  abhängen und gerade eine solche Abhängigkeit würde die Möglichkeit des Bellschen Telefons bedeuten. Wenn wir aber den quantenmechanischen Ausdruck einsetzen bekommen wir

$$\mathbb{P}(b \mid A, B) = \text{tr}(\rho(F_A(a) \otimes F_B(b))) = \text{tr}(\rho(\mathbb{1} \otimes F_B(b))) , \quad (10.22)$$

also einen Ausdruck, der von  $A$  *nicht* mehr abhängt. Die rechte Seite dieser Gleichung können wir mit der reduzierten Dichtematrix  $\rho_2$  einfach als  $\text{tr}(\rho_2 F_B(b))$  schreiben. So gesehen bedeutet das Prinzip der Lokalität einfach, dass die Reduktion eines Zustands auf ein Teilsystem eine wohldefinierte Operation ist, die nicht davon abhängt, welchen Apparat ein anderer Physiker in einem anderen Teil der Welt aufstellt. Dieses Prinzip benutzen wir im Grunde ständig, wenn wir irgend ein System betrachten, ohne seine Korrelation mit dem ganzen Rest der Welt mitzubeschreiben. Die Konsequenz des Bellschen Theorems ist dann, dass wir uns von klassischen Beschreibungen verabschieden müssen.

Quantenmechanik ist also geradezu charakterisiert als die lokale Option. Das muss hier noch einmal betont werden, weil die Literatur voll ist mit der Diskussion angeblicher **Nichtlokalität der Quantenmechanik**. Gemeint ist dabei bei näherem Hinsehen immer die (notwendige) Nichtlokalität einer klassischen Zusatztheorie zur Quantenmechanik, also einer Theorie verborgener Variablen. Dies wäre also eine Beschreibung der gleichen Experimente wie in der Quantenmechanik (mit den gleichen Ergebnissen), in der aber eine Beschreibung von *Einzelsystemen* durch klassische Parameter möglich ist. Äquivalent dazu ist die Aussage, dass in einer solchen Theorie alle Observable im Prinzip gemeinsam messbar sind. Wegen des Satzes vom Telefon kann dies aber nicht mehr getrennt für  $A$  und  $B$  gelten, sondern nur für das komplette Experiment mit  $A \& B$ . Bobs Apparat  $B_1 \& B_2$  läuft auf einen direkten Zugriff auf diese verborgenen Variablen hinaus und der Satz vom Bellschen Telefon demonstriert prompt die dadurch auftretende Nichtlokalität. Auch bei den hartgesottensten Verfechtern verborgener Variablen ist mit dieser Behauptung von Nichtlokalität *nicht* die Behauptung

verbunden, man könne Bellsche Telefone tatsächlich bauen. Die Nichtlokalität bleibt eben im spukhaften klassischen Teil der Theorie verborgen. Von einer solchen Theorie sollte man grundsätzlich auch verlangen, dass sie einen Mechanismus enthält, der erklärt, wie dieses Verbergen passiert: Warum enthält die Theorie einerseits massive Fernwirkungen, von denen andererseits aber nie etwas zu spüren ist? Man kann das damit vergleichen, dass eine Äthertheorie schon auch erklären können muss, wie die mechanischen Eigenschaften des vorgeschlagenen Äthers letzten Endes dazu führen, dass sich alle Experimente auch gemäß Relativitätstheorie und ohne Äther beschreiben lassen. Einschlägige Forschungsprojekte sind wohl ein Stück Trauerarbeit über die verlorene mechanische Welt des 19. Jahrhunderts oder im Fall der Quantenmechanik über die verlorene klassische Welt.

### 10.3.2 Experimente

Im letzten Abschnitt hatte ich behauptet, die empirische Feststellung  $\beta > 2$  sei unproblematisch. Das war eine Vereinfachung: Wenn man es genau nimmt, steht das Experiment noch aus, auch wenn es gute Chancen gibt, dass es in Kürze (2014) gelingt. Die ersten Experimente wurden 19xx von Clauser gemacht und tatsächlich waren sie zunächst nicht schlüssig. Das änderte sich, als mit der Technologie des optischen Pumpens, also der gezielten Präparation angeregter Atom-Zustände, "helle" Quellen für verschränkte Photonenpaare verfügbar wurden. Die Experimente in 19xx von Aspect und Mitarbeitern sind Klassiker. Meine Lieblingsstelle ist eine Bildunterschrift, in der man winzige Fehlerbalken um eine Kurve sieht, mit der Bemerkung "The curve is not a fit to the data, but the prediction of quantum mechanics". Das beschreibt auch die Situation in der Zeit: Die Quantenmechanik hatte sich so weit durchgesetzt, dass eigentlich kaum jemand ernsthaft am Ausgang des Experiments zweifelte. Warum das Experiment also überhaupt noch machen? In der Tat erzählt Alain Aspect, dass er John Bell besuchte und ihm von den Plänen berichtete die Verletzung der Ungleichung nachzuweisen. Bell fragte darauf als erstes, ob er denn eine permanente Stelle habe. Etwas zu bestätigen, and das (fast) alle ohnehin glauben ist eben ein Karriererisiko. Da Photonen recht schnell sind, es gelang Aspect's Team sogar, die Wahl der Einstellungen bei Alice und Bob raumartig zueinander vorzunehmen, also so schnell zu schalten, das ein lichtschnelles Signal des Schaltereignisses erst nach der Detektion auf der anderen Seite eintreffen konnte. Inzwischen ist eine Verletzung der Bellschen Ungleichung in vielen Laboren so etwas wie eine Aufwärmübung in allen Experimenten, die verschränkte Systeme produzieren.

Wo also liegt da noch ein Problem? Das Gravierendste ist, dass man nicht wirklich Einzelexperimente mit Paaren von Photonen macht, sondern mit Strahlen experimentiert und Zählraten (pro Zeit) misst. Die meisten Photonenpaare gehen aber einfach daneben. Wenn man diese mit in die Statistik aufnimmt und keine weitere Annahme darüber zulässt, dass diese Paare einer ähnlichen Wahrscheinlichkeitsverteilung genügen wie die wirklich gemessenen, dann kann man leicht klassische Modelle produzieren.

Dies nennt sich das Detektions-Schlupfloch<sup>4</sup>. Die klassischen Modelle, die man für ein solches Experiment aufstellen kann, sind zwar künstlich und enthalten ein “verschwörerisches” Element, aber das tut nichts zur Sache, wenn andererseits so weitreichende Folgerungen zum Test anstehen.

Betrachten wir ein einfaches Modell, das demonstriert, worum es geht. In diesem Modell trägt jedes “Photon” noch die zusätzliche Information, für welchen Detektor es bestimmt ist. Wenn es einen anderen antrifft, löst es einfach keinen Klick aus. Für den vorgesehenen Detektor dagegen trägt es ein deterministisches Ergebnis. Die Quelle produziert Paare solcher Teilchen nach einer Wahrscheinlichkeitsverteilung. Das Ganze funktioniert, weil der Experimentator nur die Fälle betrachtet und in seine Auswertung einbezieht, bei denen beide Detektoren ausgelöst haben. Das senkt zwar die Zählrate auf ein Viertel, aber es lässt sich jede endliche Korrelationstabelle  $\mathbb{P}(a, b \mid A, B)$  damit vortäuschen, also auch  $\beta = 4$  erreichen oder die Kommunikationsfreiheit verletzen. Man braucht also Teilchen, bei denen praktisch sichere Detektion möglich ist. Dies wären zum Beispiel Atome. Die sind dann aber wieder so langsam, dass das raumartige Wählen der Einstellungen nicht möglich ist. Die Verschränkung der internen Zustände zweier Ionen in einer Falle lässt sich zwar zweifelsfrei nachweisen und praktisch jeder verschränkte Zustand lässt sich präzise präparieren, aber wenn diese Atome nur ein paar  $\mu\text{m}$  auseinander liegen, ist das Fehlen jeder Wechselwirkung und Kommunikation nicht wirklich überzeugend. Man spricht hier vom Lokalitäts-Schlupfloch. Die Kunst ist also beide zu schließen.

Gibt es noch weitere Schlupflöcher für hartnäckige Gegner der Quantenmechanik?. Natürlich immer. So hat Gerardus t’Hooft vorgeschlagen, die Welt könne auf der Planck-Skala (für die ihm niemand die Kompetenz absprechen kann), ein klassischer vollkommen deterministischer Zellularautomat sein. Eine solche Theorie kommt in Nöte, weil sie erklären muss, woher die beobachteten Verletzungen der Bellschen Ungleichungen kommen und warum die dafür klassische nötige überlichtschnelle Kommunikation ansonsten nicht in Erscheinung tritt. Er schlägt also vor, eine weitere Annahme auszuhebeln, die wir bisher stillschweigend gemacht haben, nämlich dass Alice und Bob die Einstellungen ihrer Geräte tatsächlich wählen können. In der Tat ist das in einer grundlegend deterministischen Welt nicht mehr offensichtlich. Die beiden mögen also glauben, sie hätten einen freien Willen oder mögen dem Zufallsgenerator vertrauen, mit dem die Einstellungen getrieben werden (es geht eh meist für Menschen zu schnell). Aber alles vergebens: Die Einstellungen lagen schon von Anbeginn der Zeit fest und der Nachweis ist am “free will loophole” gescheitert. Für meinen Geschmack schüttet dieses Argument das Kind, hier das komplette Unternehmen “empirische Naturwissenschaft”, mit dem Bade aus. Es schraubt auch die Anforderung an den Autor ziemlich hoch, diese kolossale Verschwörung irgendwie plausibel zu machen.

---

<sup>4</sup>Engl.: detection loophole



### 10.3.3 °Absoluter Zufall

Schon früh fragte man sich woher eigentlich der quantenmechanische Zufall kommt. Da gibt es eine plausible Antwort<sup>5</sup>: Wenn wir an atomaren und sub-atomaren Teilchen messen, dann könnten wir schon klassisch kaum reproduzierbare Ergebnisse erwarten, wenn wir nicht auch Mess-und Präparierprozess auf dieser Skala kontrollieren. Das aber ist offenbar unmöglich. Der Zufall resultierte danach aus der ungenügenden Feinkontrolle der makroskopischen Messgeräte. So plausibel diese Antwort ist, ist sie doch vollkommen falsch. Dies sieht man sofort an einem Korrelationsexperiment, bei dem die entfernten Ergebnisse perfekt korreliert sind. Für sich genommen sind die Ergebnisse zufällig, aber wenn dies mit mangelnder Feinkontrolle zu tun haben soll, ist nicht zu verstehen, wie dieser Mangel, der ja die einzelnen Apparate jeweils für sich betrifft, über große Distanzen perfekt synchronisiert sein sollte.

### 10.3.4 °Unmögliche Maschinen

Das Bellsche Telefon verhält sich zur Quantenmechanik wie das Perpetuum Mobile zur Thermodynamik und die Ätherwindmühle zur Relativitätstheorie.

Bellsches Telefon

gemeinsame Messung

Klonieren (Broadcasting)

ins klassische Übersetzen

## 10.4 °Zustandstrennung und Steering

unmögliche Maschine: Mischungs-Trenner

bedingte Zustände

"hidden state models"

### 10.4.1 °Einstein, Podolsky und Rosen

Wieso "Unvollständigkeit"?

---

<sup>5</sup>Ich erinnere mich, dies einmal bei Bohr gesehen zu haben, konnte es aber nicht wiederfinden. Das könnte ein Fall der Bohrschen Unschärferelation sein (Wenn man seine seine Texte mehrfach liest bekommt man jedesmal einen anderen Inhalt.), ist aber wohl doch eher mein Fehler.



# Kapitel 11

## Interpretationen und Paradoxien

Es wird gern betont, dass die Quantenmechanik zwar praktisch äußerst erfolgreich sei, ihre Interpretation aber bis heute umstritten. Das hängt davon ab, was man mit “Interpretation” meint. Die engste Bedeutung des Wortes bezeichnet einfach das, was man zum mathematischen Apparat hinzufügen muss, um ihn auf die physikalische Welt anzuwenden, also einen Satz von Regeln, der klärt, wie physikalische Objekte und Eigenschaften im mathematischen Teil der Theorie abzubilden sind. Wenn man so will und sich auf ein Galilei-Zitat stützt, ist es also eine Anleitung zum Lesen im Buch der Natur. Er sagte [?]: Oder Hertz [†]: “Wir machen uns innere Scheinbilder oder Symbole der äußeren Gegenstände und zwar machen wir sie von solcher Art, daß die denknotwendigen Folgen der Bilder stets wieder die Bilder seien von den naturnotwendigen Folgen der abgebildeten Gegenstände”. In diesem pragmatischen Sinn von “Abbildung” gibt es eigentlich nur eine Interpretation der Quantenmechanik nämlich die, die auch diesem Buch zugrunde liegt. Es ist das, was man braucht um die Theorie “äußerst erfolgreich” im Sinne des Eingangssatzes anzuwenden. Nennen wir das die **minimale statistische Interpretation**. Sie ist tatsächlich der konsensfähige Durchschnitt vieler Ansätze. Zum Beispiel tummeln sich in meinem Forschungsgebiet, der Quanteninformationstheorie, Leute mit den verschiedensten Ansichten zu den Grundlagen, unter anderem viele Vielweltler. Wenn es aber darum geht, ob ein bestimmter Quantenalgorithmus funktioniert und wie man den Erfolg überprüfen würde, treten all diese Unterschiede zurück: Dafür reicht die minimale Interpretation.

Differenzen gibt es nur darüber, was man darüber hinaus noch wollen könnte. Ganz oben auf der Liste steht der Anspruch, nicht nur über experimentell gewonnene Fakten etwas sagen zu können, sondern über die Welt selbst, das Ding an sich, in all den Eigenschaften, die unabhängig davon bedeutsam sind, ob zufällig ein ausgebildeter Experimentator vorbeischaut. Noch weiter gehend könnte man auch Fragen nach dem Warum oder nach der Bedeutung des Ganzen stellen. Eine Interpretation enthielte dann auch Vorschläge für ein modernes Weltbild angesichts der Quantenmechanik. Hier kommt man schnell in Regionen, wo Debatten mehr Hitze als Licht erzeugen und eine Einigung oft nicht gelingt. Das liegt natürlich meist an Grundeinstellungen, die

lange vorher fest lagen und für die Beteiligten auch gar nicht “zur Debatte stehen” [?]. In diesem Sinn beginnt unser Gang durch die Interpretationen mit ein paar Fragen an denen sich die Geister scheiden.

## 11.1 °Grundfragen der Interpretation

### 11.1.1 Was geschieht zwischen Präparation und Messung?

Der Mensch hat ein angeborenes Bedürfnis, Gesehenes zu einer Geschichte zusammenzufügen. Die Kontinuität der Figuren dieser Geschichten ermöglicht Handlungsstränge und im Einzelnen verfolgbare Abläufe, aus denen wir unsere Welt zusammensetzen. Diese Kontinuität ist ein Kernstück unseres kognitiven Apparats, seit die Evolution uns überzeugt hat, dass der Tiger, der hinter einem Felsen verschwunden ist, immer noch Teil der Geschichte ist. Klassische Physik führt dies weiter mit immer feineren Beschreibungen, deren Entwicklungsgleichungen gerade direkt davon abhängen, dass die Welt in jedem Moment durch einen Satz von Variablen vollständig beschrieben werden kann. Am Doppelspalt nachzufragen, durch welchen Spalt nun ein Teilchen gegangen ist, ist ein Reflex, der uns angeboren ist und der durch ein wissenschaftliches Training noch einmal deutlich verstärkt wird. Nur: Die Quantenmechanik funktioniert nicht so. Ihre statistischen Vorhersagen sind ausgezeichnet überprüfbar und bewährt, aber kennen keine solche Detailbeschreibung des Ablaufs. Die Vorhersagen darüber, was passiert, wenn ich zusätzliche Beobachtungen einführe, sind ebenfalls genau. Aber der Abhängigkeit jeder solchen Vorhersage von der experimentellen Anordnung entkommt man nicht. Die Quantenmechanik schweigt also zu der Frage “Was tun unbeobachtete Quantenteilchen”?

Es ist unsinnig, solche Fragen “verbieten” zu wollen, schon allein, weil im wissenschaftlichen Prozess niemand etwas zu verbieten hat. Es sind auch keine einfachen Anfängerfehler, weil sie sich auch dem eingefleischtesten Quantenmechaniker immer wieder mal aufdrängen. Aber man muss festhalten, dass die Quantenmechanik nicht einfach aus Nachlässigkeit schweigt. Schon beim Doppelspalt oder Interferometer kommt man ja zu falschen Folgerungen, wenn man klassische Vorstellungen naiv und direkt verwendet. Beim Bellschen Theorem wird dies noch gravierender, weil jede lokale klassische Beschreibung versagt. Da die Quantenmechanik die beste Theorie ist, die wir über die einschlägigen Phänomene haben und weil diese Phänomene auch experimentell überprüft sind, müssen wir darin schon ein Körnchen wahre Naturerkenntnis sehen. Die Natur selbst sträubt sich gegen unseren Geschichtendrang. Um eine Analogie zu verwenden, betrachten wir die Frage: Was geschah zwischen den Bildern eines Films? Bei einem klassischen Filmepos ist das meistens eine sinnvolle Frage, klare Bewegungsabläufe lassen sich verlässlich interpolieren. Wenn man aber einen Videoclip mit vielen harten Schnitten betrachtet, gibt es vielleicht keine sinnvolle Interpolation mehr. Es hängt also vom Gegenstand ab, welche Fragen sinnvoll sind. Unsere an der klassischen

Welt geschulte Intuition geht in der mikroskopischen Welt leicht in die Irre.

Der Umgang mit diesem Problem ist unterschiedlich. Physiker entwickeln eine “Laborsprache” in der durchaus von Teilchen mit Eigenschaften wie Spin und Ort die Rede ist, wo in gewissem Umfang durchaus “Geschichten erzählt” werden. In vielen Fällen ist die klassische Sprache dadurch abgedeckt, dass man sich weit weg von quantenmechanischen Unschärfegrenzen, in der Nähe des klassischen Limes befindet. Zum Beispiel ist ein Flugzeitspektrometer ein Gerät, bei dem Eintritt und Ausgang einer Flugstrecke durch Verschlüsse so kontrolliert werden, dass nur Teilchen einer definierten Geschwindigkeit durchkommen. Jeder denkt hier an klassische Teilchen und benutzt entsprechende Formeln, auch weil die quantenmechanische Rechnung dazu schon heftige Anforderungen stellt. Bei der anschließenden Beugung so gefilterter Neutronen an einem Kristall benutzt man ebenso selbstverständlich ein Wellenbild. Ähnlich wirken vielfältige Bilder und Teiltheorien zusammen, bei denen einem Puristen die Haare zu Berge stehen. Das Ganze funktioniert, weil sich die Beteiligten der Begrenztheit dieser Bilder bewusst sind, Erfahrung mit ihren problematischen Aspekten haben und weil es letzten Endes eine Rückfallposition gibt: Im Zweifel kann man ja eine quantenmechanische Rechnung anstrengen, die zwar puristisch von Bildern befreit ist, aber wenigstens Gewissheit gibt. Braucht man diesen Sicherheitsanker oft genug, kann sich eine neue Sprechweise oder ein neues Bild als Abkürzung entwickeln. Die gesamte Physik, nicht nur die Quantenmechanik ist voll von Sprechweisen, deren Geltungsbereich sich aus einer speziellen Näherung ergibt und die sich sozusagen verdinglichen.

Für mich ergibt sich daraus eine Aufgabe, nämlich “rückführende Theoretische Physik” zu betreiben. Das heißt, Begründungen aus der grundlegenden Theorie zu liefern, wo immer das möglich ist und ein Bewusstsein für die Begrenztheit vieler Verfahren und Bilder zu pflegen. In Bezug auf die Titelfrage dieses Abschnittes bedeutet es, durchaus zu versuchen, mehr oder weniger klassische Sprechweisen und Bilder für “Quantenprozesse” zu entwickeln und damit die Ausdrucksfähigkeit der Quantenmechanik zu erweitern. Das entscheidende Kriterium ist dabei der Bezug auf mögliche experimentelle Kontexte und die Rechtfertigung aus der vollen Theorie. In diesem Sinn habe ich zum Beispiel Ankunftszeit-Observablen entwickelt, die einerseits gängige Laborpraxis wiedergeben, andererseits aber damals in der Literatur kaum existierten [???]. Ich bin also sehr für den Versuch, auch über unbeobachtete Teilchen zu reden, nur ist da weder bei mir noch bei sonst jemandem etwas Belastbares herausgekommen.

### 11.1.2 Ersetzt die Quantenmechanik alle klassischen Theorien?

Ein einfaches Bild des wissenschaftlichen Fortschritts sagt, dass jede als überholt erkannte Theorie durch ihren Nachfolger vollständig verdrängt wird. Klassische Physik hätte danach also seit 1926 in den Lehrplänen und in den Köpfen nur noch als didaktische Vorstufe der Quantenmechanik etwas zu suchen. Dagegen hat Bohr immer betont, dass schon allein zur Kommunikation von quantenmechanischen Messergeb-

nissen auf eine klassische Sprache nicht verzichtet werden kann. Wir sind mit der minimalen statistischen Interpretation in diesem Punkt Bohr (und vielen anderen [?]) gefolgt und haben Observable und Zustände als Beschreibung klassisch beschreibbarer Verfahren gedeutet. Im Gegensatz dazu könnte man versuchen das ganze Experiment, den Experimentator und seinen Theoretiker-Kollegen inklusive, quantenmechanisch zu beschreiben. Das bedeutet sehr viele Teilchen, im Detail schwer zu definierende Hamiltonoperatoren und unendlich viele Freiheitsgrade für das Strahlungsfeld, aber weit und breit nichts was einen die Idee fixierter Messergebnisse ausdrücken ließe. Wenn also jemand mit diesem Vorschlag kommt, kann man ihm/ihr nur einen schönen Urlaub von der Physik wünschen und vielleicht hoffen, dass die Sprachfähigkeit irgendwann wieder kommt. Mit anderen Worten: Auf einer pragmatischen Ebene ist Bohrs Standpunkt einfach nicht von der Hand zu weisen.

Dennoch ist die Idee der **Universalität** der Quantenmechanik sehr weit verbreitet. Schrödinger hat die Anwendung der Quantenmechanik auf makroskopische Objekte mit der “burlesken” Situation einer **Katze** illustriert [Sch35], deren Leben oder Tod an ein quantenmechanisches Ereignis (einen radioaktiven Zerfall) gekoppelt wird und die demnach in einer Überlagerung von tot und lebendig existiert, wundersam verschränkt mit dem zerfallenden Kern. Das Internet ist voll von graphischen Darstellungsversuchen einer solchen superponierten Katze. Das suggeriert, es müsse sich um einen exotischen Zustand handeln, sozusagen eine besonders abgefeimte Tortur für die Katze. Also: Wie fühlt sich das eigentlich an, so eine Superposition? Zum Glück kann ich diese Frage aus unmittelbarer eigener Erfahrung beantworten, denn neulich traf mich ein Photon, dass einen Strahlteiler passiert hatte, also nicht zu mir hätte kommen müssen, sodass ich nun in einem verschränkten Zustand mit dem Rest der Welt bin. Der Unterschied war allerdings nicht sehr dramatisch.

Verschränkung verschiedenster Systemen unserer Umgebung passiert ständig, da die natürlichen Wechselwirkungen nicht abgeschaltet werden können. Warum war es dann so schwierig, Verschränkung im Labor zu demonstrieren? Weil es dafür darauf ankommt, die verschränkten Freiheitsgrade auch weiterhin identifizieren, manipulieren und detektieren zu können. Schwierig ist also nicht die Herstellung von Verschränkung an sich, sondern von *kontrollierbarer* Verschränkung. Hier sieht es nun mit makroskopischen Objekten finster aus. Wir haben immer nur Zugriff auf einen kleinen Teil der Observablen eines solchen Systems. Quantenkorrelationen, die sich über das ganze System verbreitet haben, könnten zwar durch eine Zeitumkehr wieder hervorgebracht und gemessen werden, aber das würde die experimentellen Möglichkeiten extrem übersteigen und zum Beispiel verlangen, dass in den Nachthimmel entlassene Wärmestrahlung kohärent wieder eingefangen werden müsste. Solche Korrelationen sind also nur noch “im Prinzip”, also ehrlicherweise “gar nicht” messbar. Das ist der Grund, warum sich eine Superposition und eine Mischung oder ein verschränkter Zustand und ein unverschränkter Zustand eines makroskopischen Objekts meist weder von mir (als betroffenem System) noch von sonst jemand unterscheiden lassen. Die Katze in Schrödingers Kasten ist in jeder denkbaren Hinsicht genauso “entweder tot oder lebendig” wie alle ihre Artgenossen.

Im vorhergehenden Absatz habe ich übrigens von makroskopischen Objekten in quantenmechanischen Begriffen gesprochen und damit sozusagen die Gültigkeit der Quantenmechanik für solche Systeme anerkannt. Dennoch muss man festhalten, dass der Quantenmechanik hier etwas fehlt. Einfache Systemeigenschaften wie die Temperaturverteilung oder der Brechungsindex sind ja in der Sprache der quantenmechanischen Vielteilchenbeschreibung nicht enthalten. Die Quantenmechanik ist nicht nur extrem übergenau, sie enthält nicht einmal die Antwort auf die naheliegendsten Fragen. Das ist natürlich nicht neu, sondern gerade der Forschungsauftrag der Statistischen Mechanik. Dort geht es genau darum, aus der mikroskopischen Beschreibung eine brauchbare makroskopische zu begründen. Das braucht zusätzliche Annahmen über die vorkommenden Quantenzustände und die realisierbaren Messungen und den Nachweis, dass sich die Zeitentwicklung bloß makroskopisch spezifizierter Zustände auf dieser Skala noch verlässlich vorhersagen lässt. Dieser Nachweis ist bislang sicher nicht in befriedigender Allgemeinheit gelungen. Andererseits zweifelt niemand daran, dass die makroskopische Physik so begründet werden kann und dass in diesem Prozess auch die Empfindlichkeit auf subtile Quantenkorrelationen und Superpositionen verloren geht (“Dekohärenz”). Denn die bekannten makroskopischen Theorien enthalten ja nichts davon. Zusammenfassend: Für makroskopische Systeme ist nicht die Vielteilchen-Quantenmechanik zuständig, sondern die Statistische Mechanik. Ihre Aufgabe ist die Erklärung der Entstehung (“emergence”) der klassischen Welt aus der Quantenmechanik.

Wo genau fängt aber jetzt die klassische Welt an? Ich habe oben einfach die Begriffe makroskopisch und mikroskopisch für diesen Kontrast benutzt, aber es ist sicher nicht einfach eine Frage der Größe oder der Teilchenzahl. Die Grenzen auszuloten ist ein interessantes experimentelles Programm. Dazu gehören zum Beispiel die Interferenzexperimente mit großen Molekülen [?]. Auch theoretisch ist es eine interessante Frage, wie weit man der Dekohärenz gezielt noch ein Schnippchen schlagen kann. Um einen Quantencomputer mit ernsthaft vielen Qubits zu bauen, müsste man genau das tun. Die Grenze zwischen der klassischen, makroskopischen Welt und der mikroskopischen Quantenwelt ist nicht scharf gezogen. Sie hängt auch teilweise von einer bewussten Entscheidung ab, wie ich das System im weiteren anschauen möchte. Wenn ich das Projekt aufgebe, emittierte Photonen kohärent einzufangen und zurückzuführen, sie also in der theoretischen Beschreibung auszuspüren [6.2], habe ich mich schon auf den Übergang von reinen zu gemischten Zuständen und somit teilweise auf eine klassische Beschreibung eingelassen. Dennoch ist die Unterscheidung letzten Endes sehr klar. Ein gutes Bild dafür habe ich von Berge Englert gehört: Wenn man am Strand mit den Füßen im Wasser steht, verschwimmt die Unterscheidung zwischen Land und Meer. Wenn man aber den Blick hebt und entlang des Horizontes schaut, könnte sie klarer sein.

Ein Spezialproblem, dass sich aus der Auffassung von der Universalität der Quantenmechanik ergibt, ist das sogenannte **Messproblem**<sup>1</sup>: Wenn die Quantenmechanik auch für die Messapparate zuständig ist, wie kann dann jemals von Messergebnissen gesprochen werden? Wir sind in unserem Aufbau der Quantenmechanik einfach von

---

<sup>1</sup>Engl.: measurement problem

den Messergebnissen und ihrer Statistik ausgegangen. So gesehen ist das Messproblem einfach kein Problem der Quantenmechanik. Aber natürlich kann man fragen, ob die ausgebaute Theorie die anfänglich gemachte Annahme noch einmal rechtfertigt. Das Messproblem ist dann ein Konsistenzproblem, wie es auch in anderen Bereichen der Physik auftaucht. Zum Beispiel startet man die Allgemeine Relativitätstheorie mit der Einführung der Raumzeit-Metrik zur systematischen Erfassung der Bahnen frei fallender Teilchen als Geodäten. Wenn dann die Feldgleichungen dazugekommen sind, stellt sich die offensichtliche Frage, ob die Verzerrung der Raumzeit, die durch das Testteilchen selbst verursacht wird, tatsächlich im Limes leichter Teilchen vernachlässigbar ist (“Einkörperproblem” der Relativitätstheorie) und die ursprüngliche Annahme der geodätischen Bewegung rechtfertigt. Allerdings ist das Messproblem, wie oben ausgeführt, nur eine kleine Ecke eines grundlegenden Problems nämlich des Problems der Entstehung der klassischen Welt.

Einige Leute, darunter John Bell [1], wollen sich mit dieser Einordnung des Messproblems nicht zufrieden geben. Selbst wenn man eine befriedigend durchgeführte statistische Mechanik hätte, sei dies bloß eine Lösung “für alle praktischen Zwecke”. Die quantenmechanische Superposition zweier Katzen sei damit ja lediglich als praktisch nicht mehr detektierbar nachgewiesen, aber immer noch “da”. Dieses angeblich noch grundlegendere Messproblem verstehe ich nicht. Ich finde es durchaus einen Erfolg, ein Problem für viele praktische Zwecke zu lösen. Aber selbst die absurde Übersteigerung “für alle” ist Bell hier nicht stark genug. Letzten Endes geht es ihm nur um das ontologische Pathos im Wörtchen “da”, dem wir uns in [11.1.3] noch einmal zuwenden.

### 11.1.3 Kann man den Beobachter eliminieren?

## 11.2 Alternative Ansätze

### 11.2.1 Kopenhagener Interpretation

Die Kopenhagener Interpretation, mit den Hauptvertretern Bohr, Heisenberg und Pauli, gilt vielfach als die “orthodoxe” Interpretation der Quantenmechanik. Leider muss man sagen: Es gibt sie nicht. Der Ausdruck suggeriert, es gäbe da irgendwo ein Grundsatzpapier, einen “Codex Copenhagensis”, vielleicht eine Textsammlung, in dem diese Interpretation nachzulesen sei. Aber es gibt keinen solchen Text. Von den Gründervätern Bohr, Heisenberg und Pauli gibt es jeweils populäre Vorträge, die schon deshalb nicht in Frage als “Interpretation der Quantenmechanik” kommen, weil sie in halbklassischer Sprache formuliert sind, im Wesentlichen ohne die 1926 erreichte neue Struktur überhaupt aufzunehmen. Auch sind sich Bohr und Heisenberg in vielen Grundfragen überhaupt nicht einig. Bei Heisenberg ist da viel mehr vom Einfluss des Beobachters die Rede, der durch den Akt der Beobachtung erst Fakten schafft. Bohr ist dafür viel zu vorsichtig. Auch der frühe und der späte Bohr sind sich kaum einig. Wenn in den



frühen Diskussionen mit Einstein (1927) die Unschärferelation noch direkt auf den Messapparat angewendet wird, lehnt er das später, vielleicht unter dem Einfluss der EPR-Arbeit völlig ab. Aus der Kombination der Schriften von Bohr und Heisenberg könnte man jedenfalls die verschiedensten Interpretationen zusammenbasteln.

Klarheit war auf keinen Fall eine Kopenhagener Tugend. Ich habe schon im historischen Einleitungskapitel Bohrs Vorliebe für “tiefe Wahrheiten” erwähnt. Auch wenn ich sonst die Lektüre der Klassiker durchaus empfehle, kann ich das bei Bohr nur bedingt. Bohr-Forscher haben mir versichert, dass sich bei genügend häufiger Lektüre der gesammelten Werke durchaus ein Verstehen einstellt. Das mag sein, aber es bleibt unklar, ob das der Mühe wert ist. Bohr ist zeitlebens in der “alten” Quantenmechanik seines Atommodells, also einer klassischen Physik mit zusätzlichen komplementären Verbotstafeln, gefangen geblieben und die Passagen, in denen er die Revolution von 1926 zur Kenntnis nimmt, muss man mühsam suchen. Ob er die moderne Quantenmechanik von innen heraus verstanden hat, bleibt für mich offen. Auf jeden Fall, ist es unmöglich, sie aus seinen Texten zu lernen. Bohrs Ablehnung klarer Aussagen hat er an seinen Schüler Heisenberg zumindest teilweise vererbt. Aufschlussreich fand ich Heisenbergs Kommentar zu einem Versuch von Henry Stapp, 1972 eine Zusammenfassung der Kopenhagener Interpretation zu geben [Sta72]. Er fand “...it may be a point in the Copenhagen interpretation that its language has a certain degree of vagueness, and I doubt whether it can become clearer by trying to avoid this vagueness”.

Wer also hat die Idee aufgebracht es gäbe so etwas wie einen Codex Copenhagensis? Eine Antwort darauf gibt der Wissenschaftshistoriker Don Howard [How04]. Danach war es Heisenberg und zwar bei einer bestimmten Konferenz 1955. Er konnte damit an seine eigene wissenschaftliche Glanzzeit anknüpfen und gleichzeitig eine gewisse Definitionsheute für die Quantenmechanik beanspruchen, obwohl er und Bohr seit den Kriegereignissen [Fra05] nicht mehr die besten Freunde waren. Jedenfalls ist die Erfindung gut angenommen worden. Ohne sich allzu genau festzulegen, kann sich jetzt jeder als Vertreter der akzeptierten, “orthodoxen” Interpretation behaupten oder umgekehrt die Vertreter der Orthodoxie beschimpfen. Für beides ist Präzision nur hinderlich. Ich schlage also vor, den Ausdruck nicht zu benutzen und statt dessen jeweils direkt zu beschreiben, was man meint.

Natürlich gibt es Grundzüge, die von der überwiegenden Mehrheit der Interpreten der Kopenhagener Schule zugerechnet werden und einige sind auch Teil der in diesem Buch vertretenen (minimalen statistischen) Interpretation. Dazu gehört, dass quantenmechanische Aussagen sich immer auf eine bestimmte experimentellen Anordnung beziehen. Wer weiter in die umfangreiche Literatur vordringen will, könnte hier [Fay14] starten.

### 11.2.2 Einzelzustands-Interpretation

Diese weit verbreitete Interpretation haben wir in [10.1] schon als Theorie verborgener Variablen kennengelernt. Einstein hat das Problem schon auf dem Solvay-Kongress von 1927 in einer Diskussionsbemerkung auf den Punkt gebracht[BV09]. Er stellte zwei Alternativen gegenüber, wie man die Wellenfunktionen der Quantenmechanik verstehen könnte. Seine Variante II ist die Einzelzustands-Interpretation, die er auch später immer wieder als die “orthodoxe Auffassung” der Wellenfunktion bezeichnete. Viele Interpreten 1927 war das eine natürliche Idee: Die Variablen der klassischen Mechanik, Orte und Impulse, waren nun durch eine neue Variable namens  $\Psi$  ersetzt. Mit Feldern war man ohnehin gewohnt umzugehen. Dieses neue Feld beschrieb wiederum eine Teilcheneigenschaft, nach Born so etwas wie die Stärke einer Tendenz Detektoren klicken zu lassen. Hier gibt Einstein zu bedenken, dass in vielen Experimenten  $\Psi$  über einen sehr großes Raumgebiet verschmiert ist, aber stets nur ein Teilchen detektiert wird. Danach müsste mit dem ersten Klick auf einem Auffangschirm die Klickigkeit überall sonst instantan zusammenbrechen und damit auch  $\Psi$  Null werden. Dieser **Kollaps der Wellenfunktion** müsste also im Gegensatz zur Relativitätstheorie eine instantane Wirkungsausbreitung enthalten. Einstein ist damit sehr unzufrieden. Seine Variante I ist die statistische Interpretation, die er die Ensemble-Auffassung nennt<sup>2</sup> und die diesem Buch zugrunde liegt. Einstein war spätestens seit seiner Arbeit von 1905 über die Brownsche Bewegung mit probabilistischen Theorien eher besser vertraut als die meisten Physiker der Zeit. Eine Größe wie die Ortswahrscheinlichkeitsdichte eines Brownschen Teilchens ist zwar auch eine Funktion des Ortes, aber kein physikalisches Feld, dessen Wert an einer Stelle in der Nähe dieser Stelle feststellbar wäre. Die Dichte hängt eben wesentlich davon ab, wie der Prozess gestartet wurde und welche vorangegangenen Beobachtungen in die Analyse aufgenommen werden. Wenn ich das Teilchen nun bei meinem nächsten Blick ins Mikroskop an einem bestimmten Ort finde, kann ich diese Beobachtung als neuen Startwert nehmen oder allgemeiner zu einer bedingten Wahrscheinlichkeit übergehen. Das ist nun ebenfalls die instantane Veränderung einer Funktion, aber eben kein physikalischer Prozess, für den man dramatische Ausdrücke wie “Kollaps” heranziehen könnte. Abb. ?? bringt den Unterschied zwischen Einzelzustands-Interpretation und Ensemble-Interpretation noch einmal in ein Bild.

Wie gesagt, ist die Einzelzustands-Interpretation sehr weit verbreitet, wenn auch meist nur in Form von Sprechweisen wie etwa von “der Wellenfunktion des Teilchens” oder von einem “Teilchen im Zustand  $\Psi$ ”. Deutlicher wird die Differenz dann in den jeweiligen Formulierungen der Grundpostulate. Wenn hier so getan wird als sei “Zustand” ein nicht weiter erklärungsbedürftiger Begriff, befindet man sich schon eindeutig auf dem Terrain der Einzelzustands-Interpretation. Expliziter wird es meist nicht, schon weil die Ensemble-Interpretation gar nicht als ernsthafte Alternative ins Blickfeld gerät und man sich deshalb auch nicht davon abgrenzen muss. Wenn doch mal argumentiert

<sup>2</sup>Er hat dies nie detailliert ausgearbeitet, sodass es hier einen Interpretationsspielraum gibt. Arthur Fine [Fin86] beschreibt eine ziemlich idiotische (verborgene Variablen-) Variante als “Standard”-Form der Ensemble Interpretation, allerdings nur, um zu betonen, dass Einstein das wohl nicht gemeint haben kann.

wird, wird gern auf Experimente mit einzelnen Atomen verwiesen, die angeblich nicht mit einer statistischen Interpretation beschrieben werden können. Wir werden uns daher mit diesem Argument kurz auseinandersetzen, bevor wir auf die Frage eingehen, was eigentlich an der Einzelzustands-Interpretation problematisch ist.

Die Meinung, dass die Langzeit-Beobachtung eines einzelnen Atoms in einer Falle nicht in die statistische Interpretation passt, beruht auf einem Missverständnis, das von einigen Darstellungen nahe gelegt wird. So spricht Einstein 1927 von einem Schwarm von Teilchen und auch von Neumann spricht 1927 von einem Ensemble bzw. einer “Gesamtheit  $\{\mathfrak{S}_1, \mathfrak{S}_2, \dots\}$ ” als einer Menge von Systemen, die man noch unterteilen kann, um zum Beispiel die Erwartungswerte verschiedener Observablen festzustellen. Soweit ich sehen kann, hat hier Ludwig die nötige Klärung vollzogen, indem er die Herstellungsverfahren als definierendes Element nimmt. Es geht also nicht um massenhaft viele Teilchen, sondern um Wiederholbarkeit: Die Mitgliedschaft im Ensemble wird durch die Kriterien festgelegt, die diesen Fall als Einzelfall in einer Versuchsreihe “des gleichen Experiments” ausweisen. Das Einzelatom, das wochenlang in einer Falle gehalten wird und das der Experimentator schon freundschaftlich Hugo nennt, demonstriert geradezu ideal die Rolle des Einzelfalls in einer statistischen Theorie. Es entsteht in der Beobachtungszeit ein langes Messprotokoll über Hugo: mit welchen Lasern er gekitzelt wurde und welches Fluoreszenzlicht beobachtet wurde. Was ist nun an diesem Protokoll mitteilenswert? Das wissenschaftliche Ergebnis liegt nicht in der einzelnen Messreihe, auch wenn eine solche Reihe als Bild in einer Veröffentlichung erscheinen sollte um die Natur der Daten zu erklären. Interessant sind hier lediglich die Eigenschaften, die reproduzierbar sind, also auch bei der nächsten Versuchsreihe (mit Helga) Bestand haben. Etwas formaler ausgedrückt: Die einzelnen Messreihen werden als Stichproben eines stochastischen Prozesses genommen. Ein einzelner Punkt  $x \in X$  im Ergebnisraum der einschlägigen Observablen ist eine komplette Trajektorie von Beobachtungen. Die Vorhersagen der Quantenmechanik beziehen sich auf das Wahrscheinlichkeitsgesetz dieses Prozesses. Im beschriebenen Fall stellt sich heraus (durch theoretische Analyse und durch experimentelle Überprüfung), dass der Prozess ergodisch ist, das heißt, dass die interessanten statistischen Eigenschaften sich schon am Einzelfall erheben lassen (“Zeitmittel gleich Scharmittel”). Nehmen wir als Beispiel ein Atom, von dem drei Niveaus benutzt werden  $|g\rangle$ ,  $|e\rangle$  und  $|m\rangle$ . Eine konstant eingestellte Laserbeleuchtung treibt den Übergang  $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$  an, wobei der angeregte Zustand  $|e\rangle$  meist schnell zum Grundzustand  $|g\rangle$  zerfällt und dabei beobachtbares Licht abstrahlt. Gelegentlich jedoch findet ein Übergang  $|e\rangle \rightarrow |m\rangle$  in einen metastabilen Zustand statt, der nur sehr langsam in den Grundzustand zurückgeht: Das Atom wird dunkel (“Dehmelt darkness”). Was hier interessiert ist die Statistik dieser Hell/Dunkelperioden. Ich habe dieses Experiment absichtlich so beschrieben, wie man hier normalerweise redet und keine Sorgfalt darauf verwendet, Einzelzustands und Ensemble-Elemente zu trennen. “Ein Atom” meint in diesem Kontext natürlich nicht Hugo sondern die Spezies, sagen wir Rubidium. “Zustand” meint einerseits spezielle Vektoren im Hilbertraum für Atome dieser Spezies (“Grundzustand”) andererseits die anfängliche Präparation  $\rho$ , deren Einfluss sich allerdings bei einem ergodischen Prozess mit der Zeit verflüchtigt. In diesem mathematischen Rahmen produziert nun die

Quantenmechanik gerade die gesuchte Vorhersage, nicht über die Einzelheiten des an Hugo beobachteten Ablaufs  $x$ , sondern über das allen Prozessen unter den gegebenen Versuchsbedingungen gemeinsame statistische Gesetz.

Wenn es jetzt nur so wäre, dass die Einzelzustands-Interpretation überflüssig wäre im Sinne der Berechnung von Erwartungswerten, dann wäre es übertriebener positivistischer Purismus dagegen zu argumentieren. Zusatzvorstellungen können ja intuitionsbildend sein und schließlich sind Generationen von Physikern damit nicht schlecht gefahren. Warum könnte also jemand dagegen sein? Diese Frage kann man natürlich genauso gut zu jeder Theorie verborgener Variablen stellen. Und in Kapitel 10 haben wir gesehen, dass es für solche Theorien gerade bei verschränkten Zuständen brenzlich wird. Solange also Verschränkung keine ernsthafte Rolle spielt, kommt man mit verkorksten Vorstellungen wie der Einzelzustands-Interpretation einigermaßen davon. Ich hatte zwar behauptet, Verletzungen der Bell-Ungleichungen seien inzwischen eine Routine-Beobachtung, aber das gilt eben nur in Experimenten, die den Quanteninformatiker interessieren und die sind nur eine kleine Ecke im großen Unternehmen Physik. Für, sagen wir mal, die Vorhersage von Festkörpereigenschaften muss der Theoretiker natürlich wissen, dass ein Tensorproduktraum nicht nur Produktvektoren enthält, also dass es verschränkte Zustände gibt. Aber die tauchen nur als Zwischenstadien in einer Rechnung auf. Und so kommt man mit “Shut up and calculate” bestens über alle Grundlagenfragen hinweg. Wenn es aber gerade um diese Fragen geht, wie in diesem Kapitel, sollte man aber doch noch einmal genauer hinschauen.

Hier also nochmal eine kurze Sammlung der problematischen Aspekte der Einzelzustands-Interpretation.

(1) *Kein physikalisches Feld*

$\Psi$  kann in keinem Fall als physikalisches Feld analog etwa dem Maxwell-Feld gedeutet werden: Der Wert  $\Psi(x)$  an einer Raumstelle  $x$  beschreibt nichts, was in der Nähe von  $x$  festgestellt werden könnte. Das ergibt sich schon daraus, dass für Mehrteilchensysteme das Argument  $x$  im Konfigurationsraum aller Teilchen liegt. Aber selbst im Einteilchenfall ist dies problematisch. Man bekommt ein Bild von Teilchen, die “zerfließen” also jedenfalls sehr ausgedehnte Objekte sein können. Schrödinger wollte ja zunächst  $e|\Psi(x)|^2$  als Ladungsdichte deuten. Das hätte eigentlich einen Beitrag der Selbstenergie dieser Ladungsverteilung zur Energie erzwungen, wodurch die Wasserstoff-Energien falsch herausgekommen wären und die gesamte Theorie nichtlinear geworden wäre. Diesen, von der Einzelzustands-Interpretation nahe gelegten Fehler hat Schrödinger selbst vermieden. Penrose hat ihn allerdings im Zusammenhang mit Gravitationswechselwirkungen erneut vorgeschlagen.

(2) *Der Kollaps*

Dies war ja schon für Einstein 1927 das Argument gegen die Einzelzustands-Auffassung. Bei einer Detektion ändert sich sofort und überall die  $\Psi$ -Funktion, was ja nun bedeutet, dass sich die Eigenschaften des Teilchens dramatisch geändert haben. Hier ist also etwas passiert, ein physikalischer Prozess, für den die Theorie aber andererseits keine dynamische Beschreibung zu bieten hat. Von Neumann hat den Kollaps daher mit

seinem Projektionspostulat [1.8.2] zum zweiten dynamischen Prinzip der Quantenmechanik erhoben. Die Schrödingergleichung erscheint nun als deterministische Zeitentwicklung des “Eigenschaftsvektors”  $\Psi$ , die kontrastiert wird mit den stochastischen Kollapsereignissen, die eintreten, wann immer jemand hinschaut. Einstein hatte die manifeste Nichtlokalität dieses Prozesses kritisiert. Einen ganzen Rattenschwanz von Bauchschmerzen hat die Frage verursacht, wann denn der Kollaps eigentlich stattfindet. Bei der Beschreibung eines konkreten Messprozesses habe ich ja die Wahl, Teile des Apparates quantenmechanisch zu beschreiben, also den Heisenberg-von Neumannschen **Schnitt** zwischen Quantenobjekt und klassischem Messapparat zu verschieben. Das verschiebt dann auch das Kollapsereignis. Wie also findet man die Grenze, an der der Kollaps “wirklich” passiert? Von Neumann hat argumentiert, dass es darauf nicht wirklich ankommt, weil man äquivalente Beschreibungen erhält. Das ist in der statistischen Interpretation auch richtig. Wenn aber ein realer Prozess gemeint sein soll, gilt diese Äquivalenz eigentlich nicht mehr. In einer Verzweiflungstat hat Wigner zeitweise mit dem Gedanken gespielt, die Grenze an die Schwelle der “geistigen Welt” zu legen, also dorthin, wo das Messergebnis einem Experimentator bewusst wird. Auch das funktioniert aber nicht, weil ja noch ein Freund den Experimentator betrachten könnte und die Auswirkung des Messergebnisses auf das Verhalten des Experimentators quantenmechanisch studieren könnte. Auch wenn Wigner sich von dieser Idee später distanziert hat, hat dieser Vorschlag, bei dem ja der Geist auf die Materie einwirkt, in der New Age und Esoterik-Bewegung kräftig Blüten getrieben [11.2.7].

## (2) Anwendbarkeit auf Teilsysteme

Die Gretchenfrage ist aber immer wieder: Wie funktioniert die Interpretation in Anwendung auf verschränkte und nicht mehr wechselwirkende Systeme? Wenn jedes Teilchen durch seine Wellenfunktion beschrieben ist, dann ist auch die Frage nach der Wellenfunktion von Bobs Teilchen legitim. Wie in der EPR-Arbeit festgestellt, hat diese Frage aber keine vernünftige Antwort. Die Annahme, die Teilsysteme hätten jeweils ihre Wellenfunktionen, wobei sie im einzelnen unbekannt sein können und nur eine irgendwie korrelierte Verteilung unterstellt wird, führt geradewegs zu der experimentell widerlegten Aussage, dass die Bell-Ungleichung erfüllt sein müssten. Wir schließen also: Bobs Teilchen haben keine Wellenfunktion und, da nach der Grundprämisse der Einzelzustands-Interpretation jedem einzelnen quantenmechanischen System eine Wellenfunktion zugeordnet ist, schließen wir: Bobs Teilchen ist kein quantenmechanisches System. Der beliebteste Ausweg ist, sich darauf zu berufen, dass das Gesamtsystem ja immer noch eine ordentliche  $\Psi$ -Funktion hat. Die Quantenmechanik bezieht sich also dann nur auf das Gesamtsystem, aber

Die Einzelzustands-Interpretation ist auf Teile verschränkter Systeme nicht anwendbar.

Deswegen muss es irgendwie unmöglich sein, die Teilsysteme zu trennen: Man nennt sie untrennbar<sup>3</sup>, auch und gerade in Situationen, in denen man Quantenteilchen soeben meilenweit *getrennt* hat und jede Wechselwirkung ausgeschlossen ist.

---

<sup>3</sup>Engl.: non-separable

Die Entscheidung, dass Teilsysteme nicht als ordentliche quantenmechanische Systeme in Frage kommen, führt fast unweigerlich in einen Regress. Denn welches System ist nicht Teilsystem eines anderen? Man kann den Regress immer dort anhalten wo ein Teilsystem in einem reinen Zustand ist. Aber dies ist eine höchst fragile Begebenheit, die durch jede Wechselwirkung mit dem Rest der Welt sofort zerstört wird. Die einzige sichere Rückzugsposition ist dasjenige System, das nicht Teil eines anderen sein kann: das Universum. Wir können allerdings leider nicht viel über die Wellenfunktion des Universums sagen, außer, dass sie natürlich  $\Psi$  heißt und in einer geeigneten Basis die Komponenten  $(1, 0, 0, \dots)$  hat.

Wann immer uns eine Interpretation abverlangt, Objekte einzuführen, über die wir absolut nichts intelligentes mehr sagen können, finde ich Vorsicht angebracht. Wenn man die Probleme der Interpretation der Quantenmechanik nur lösen kann, indem man sie ins kosmische aufbläst, hat man eigentlich gar nichts erreicht. Wohl gemerkt habe ich nichts gegen eine Wellenfunktion des Universums einzuwenden, wenn sie im Rahmen einer versuchten Vereinigung von Quantenmechanik und allgemeiner Relativitätstheorie auftritt. Bei der Suche nach einer noch unbekannten Theorie muss alles erlaubt sein. Vorverurteilungen irgendwelcher Begriffsbildungen sind da einfach kontraproduktiv, auch wenn es da dämliche und weniger dämliche Vorschläge gibt und kein Fortschritt möglich ist, wenn die einschlägigen Schulen sich hier nicht gegenseitig kritisch begleiten. Aber als Fluchtpunkt vor den Problemen der Einzelzustands-Interpretation (ohne jede ernsthafte Auseinandersetzung mit Quantengravitation) ist die Wellenfunktion des Universums nur lächerlich.

### 11.2.3 Bohmsche Mechanik

Seit Heisenbergs erster Arbeit von 1925 ist der Begriff der Bahn für Quantenteilchen in der Kritik und wurde effektiv aufgegeben. Hier nun ist eine Theorie die solche Trajektorien liefert! Wir bekommen also schließlich doch ein Bild von den Geschehnissen zwischen Präparation und Messung und obendrein eines das den Beobachter oder irgendwelche Messinstrumente nicht braucht. Nach Kapitel [10] ist klar, dass dieses klassische Bild mit einer massiven Nichtlokalität einhergehen muss. Dies wird von den Vertretern der Theorie als Erkenntnis angepriesen. Wie also funktioniert ein solche Theorie? Welche Geschichte wird hier erzählt? Und was ist der Preis für die Trajektorien?

Die Grundidee ist eine klassische Zeitentwicklung, deren Ortswahrscheinlichkeitsdichte zu jeder Zeit mit der quantenmechanischen übereinstimmt. Sie wurde zuerst 1926 von deBroglie als Theorie der "Führungswelle" vorgeschlagen, dann 1926 von Madelung als Strömung einer hypothetischen Flüssigkeit. Bohm hat 1952 daraus eine klassisch-mechanische Gleichung gemacht mit linker Seite "Masse mal Beschleunigung" für jedes Teilchen. John Bell, der eine klare Vorliebe für klassische (und damit nichtlokale) Theorien hatte, hat diese Theorie in den 70ern verteidigt und jedenfalls als ernst zu nehmende Alternative zur Quantenmechanik angesehen. Nelson führte 1962 einen

zusätzlichen Diffusionsterm ein. In seiner “Stochastischen Mechanik” ist der klassische Prozess ein Markov-Prozess. Tatsächlich kann man einen solchen Prozess recht einfach auch für beliebige Observable anstatt des Ortes [?] angeben. Die Nichtlokalitäten haben Edward Nelson dazu gebracht, seine Theorie als physikalisch falsch aufzugeben, aber einige seiner Anhänger sind ihm darin nicht gefolgt. In den 80er Jahren haben dann Detlef Dürr, Sheldon Goldstein und Nino Zangì die deterministische Version der Bohmschen Theorie wiederbelebt, wobei sie direkt auf Arbeiten von John Bell aufbauen konnten. Heute bezieht sich der Ausdruck “Bohmsche Mechanik” überwiegend auf ihre Arbeiten und die ihrer Schüler [?, ?].

Klären wir zunächst die Gleichungen. Sie beziehen sich auf ein System aus nicht-relativistischen massiven Teilchen, die über Potentiale wechselwirken und sich auch in äußeren Magnetfeldern befinden können. Spin ist erlaubt, ebenso weitere Teilchen (z.B. Photonen), denen später keine Bahn zugeordnet werden soll. Der Hilbertraum besteht also aus Wellenfunktionen über dem Konfigurationsraum (Sammlung aller Ortskoordinaten), mit Werten in einem Hilbertraum  $\mathcal{H}_{\text{Rest}}$ , in dem die Spinfreiheitsgrade und die übrigen Teilchen beschrieben werden. Wir betrachten dann die Kontinuitätsgleichung  $\dot{\rho} + \text{div} j = 0$  auf mit der Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(x) = \|\psi(x)\|_{\text{Rest}}^2$  im Konfigurationsraum und dem **Wahrscheinlichkeits-Strom**

$$j_\mu(x) = \frac{\hbar}{m_\mu} \text{Im} \left\langle \psi(x) \left| \frac{\partial \psi(x)}{\partial x_\mu} \right\rangle_{\text{Rest}} - \frac{e_\mu}{m_\mu c} A_\mu(x) \rho(x) , \quad (11.1)$$

wobei  $e_\mu, m_\mu$  die Ladung und Masse des Teilchens ist, zu dem die Koordinate  $x_\mu$  gehört. Die Kontinuitätsgleichung folgt damit aus der Schrödingergleichung, wobei man je nach Wechselwirkungen mit den Rest-Freiheitsgraden noch Korrekturterme braucht. Der Vektorpotential-Term sorgt dafür, dass  $j$  sich bei Eichtransformationen [5.8] nicht ändert. Wir deuten nun mit Madelung [Mad26] den Strom  $j$  als Konvektionsstrom  $\rho v$  mit  $v$  als Strömungsgeschwindigkeit eines “Materials” mit Dichte  $\rho$ . Die Teilchen dieses “Materials” folgen demnach dem gewöhnlichen Differentialgleichungssystem

$$\dot{q}_\mu = \frac{1}{\rho(q)} j_\mu(q) . \quad (11.2)$$

In der Bohmschen Mechanik ist das “Material” einfach Wahrscheinlichkeit. Die zeitabhängige Konfiguration  $q(t)$  wird neben  $\Psi$  zur zweiten Hauptvariable der Theorie und (11.2) nennt sich die **Führungsgleichung**. Gegeben also eine hinreichend glatte Lösung der Schrödingergleichung  $\Psi_t(x)$ , kann man (11.2) aufstellen und für fast [BDG<sup>+</sup>] jede Anfangsbedingung lösen. Wenn dann die Anfangsbedingungen ( $t = 0$ ) mit Wahrscheinlichkeitsdichte  $\|\Psi_0(x)\|_{\text{Rest}}^2$  gewählt werden, bleibt die Verteilung der Lösungen zur Zeit  $t$  die jeweilige quantenmechanische Dichte  $\|\Psi_t(x)\|_{\text{Rest}}^2$ .

In einer Dimension kann man sich die Lösung der Führungsgleichung (11.2) sparen. Weil die Bahnen einer gewöhnlichen Differentialgleichung erster Ordnung sich nicht kreuzen können, ist die Wahrscheinlichkeit links von  $q(t)$ , also

$$I(t) = \int_{-\infty}^{q(t)} dx \|\Psi_t(x)\|_{\text{Rest}}^2 \quad (11.3)$$

eine Erhaltungsgröße. Man findet also  $q(t)$  indem man für die Anfangsbedingung  $I(0)$  bestimmt und (11.3) mit  $I(t) = I(0)$  nach  $q(t)$  auflöst. Dies kann man zur Visualisierung der Zeitentwicklung von eindimensionalen Schrödingergleichungen benutzen ähnlich, wie man ein Vektorfeld durch seine Feldlinien visualisieren kann.

Der Anspruch der Bohmschen Mechanik ist natürlich größer: Die Trajektorien sind danach tatsächlich die wirklichen Bahnen realer Teilchen (Mein Versuch das ontologische Pathos angemessen wiederzugeben). An der Quantenmechanik wird in diesem Sinn kritisiert, sie habe gar keinen Gegenstand: “Quantum mechanics is not about any thing”. Hier zählen die gesammelten Gegenstände praktisch der gesamten modernen Physik als “nichts”. Auch die Einzelzustands-Interpretation reicht den Bohmianern nicht, auch wenn sie als selbstverständlicher Hintergrund vorausgesetzt wird. Es fehlt ihnen auch hier das Ding als solches. Damit ist die klassische Natur der Theorie fixiert: Die Theorie hat sich damit zu beschäftigen was IST, unabhängig von irgend einer menschlichen Aktion. Dieses Prinzip ist bei Bohmianern so tief verwurzelt, dass es nicht zur Debatte steht, also nicht wie in [??] als *Annahme* gesehen werden kann. Die Folgerung aus den Bellschen Ungleichungen ist damit Nichtlokalität der Welt. Der Sinn dieses Abschnitts ist also, der Frage nachzugehen, was für eine Theorie man bekommt, wenn man sich angesichts des Bellschen Theorems nicht wie die Quantenmechanik für die Lokalität entscheidet, sondern für die Klassikalität. Kann eine solche Theorie als physikalische Theorie funktionieren? Welche Geschichten erzählt sie eigentlich? Dabei sollte man grob zwei Bereiche unterscheiden: Das eine sind die Geschichten über kleine Quantensysteme, speziell einzelne Teilchen. Das andere sind Geschichten, die den Messapparat enthalten und schließlich (ganz im Sinne von [11.2.2]) das ganze Universum.

Fangen wir mit den kleinen Systemen an, also zum Beispiel dem **Doppelspalt-Experiment**. Was daran von vielen als Paradox empfunden wird ist der Vergleich der beiden Experimente mit einem bzw. zwei offenen Spalten. Das Schließen eines Spalts scheint ja nichts anderes zu bewirken, als einige der Teilchen abzufangen, ganz entsprechend der gedanklichen Sortierung von Teilchen, die durch den einen oder den anderen Spalt gingen. Dass die Quantenmechanik mühelos beide Situationen beschreibt ist dabei schon vorausgesetzt, weswegen eine “Erklärung” der Art “Halte die Klappe<sup>4</sup> und sieh ein, dass die beiden Situation verschiedene Lösungen der Schrödingergleichung erfordern” den Frager, der hier nach dem “Geschehen” am Spalt sucht, kaum zufrieden stellen dürfte. Die jetzt mit Spannung erwartete Bohmsche Antwort ist: “Sieh ein, dass die beiden Situation verschiedene Lösungen der Schrödingergleichung erfordern. Löse nun noch die Führungsgleichung und halte jetzt die Klappe.” Dass das Teilchen, das durch einen Spalt geht “spürt” ob der andere Spalt offen ist, wird noch als Signatur der quantenmechanischen Nichtlokalität gedeutet. Die Teilchen spielen bei dieser Erklärung eigentlich nicht mit.

In Energie-Eigenzuständen erhält man eine zeitunabhängige Führungsgleichung. Wenn man den Eigenvektor reel wählt, was in nicht magnetischen Systemen oft mög-

---

<sup>4</sup>Engl.: Shut up and calculate.



lich ist, ist  $v = 0$ , sodass das Teilchen wie angenagelt stehen bleibt. Das macht deutlich, dass der klassische Limes von Eigenzuständen nicht funktionieren kann. Man könnte auch glauben, dass ein geladenes Elektron in fester Position zum Kern für ein zufälliges aber festes Dipolmoment im Wasserstoff-Grundzustand sorgen würde. Das ist allerdings ein Missverständnis: Die Bohmschen Teilchen haben keine Ladung oder sonst irgendwelche physikalischen Eigenschaften außer “da” zu sein. Jede Wechselwirkung wird nach der Theorie ja über äußere Felder und Potentiale, also über die Schrödingergleichung vermittelt. Anderes funktioniert wie erwartet. Wenn man zum Beispiel scharf lokalisierte Wellenpakete betrachtet, haben die meisten Bohmschen Teilchen keine andere Wahl als dem Peak zu folgen: In diesem Fall kann man den klassischen Limes aus der Quantenmechanik importieren. Die asymptotische Ortsverteilung freier Teilchen ist ja die Impulsverteilung [4.1.2]. Hier gilt noch die nette Bohmsche Verschärfung, dass sich die Teilchen asymptotisch geradlinig gleichförmig bewegen.

Wie immer wird es interessant bei Mehrteilchen-Problemen. Schon bei nicht-wechselwirkenden verschränkten Teilchen werden die Trajektorien schnell ziemlich unübersichtlich und auch Bohmianer versuchen meist gar nicht erst, so etwas wie ein trajektorienbasiertes physikalisches Verständnis zu entwickeln. Eine interessante Möglichkeit ist, Korrelationen zwischen weit entfernten verschränkten Partnern zu untersuchen. Um möglichst guten Überlapp zwischen Quantenmechanik und Bohmscher Mechanik zu erzeugen, betrachten wir nur Ortsmessungen an verschränkten freien Teilchen, zum Beispiel die Unterscheidung rechts/links von einem geeigneten Punkt. Da die Ortsobservablen eines freien Teilchens zu verschiedenen Zeiten nicht kommutieren, kann man damit quantenmechanisch eine (sogar maximale [?]) Verletzung der Bellschen Ungleichung bekommen, bei der die Apparate-Einstellung einfach die Messzeit ist. Auch Bohmsch gibt es eine Korrelation der Trajektoriengrößen zu verschiedener Zeit, aber die kommt falsch heraus, denn es gibt eine globale gemeinsame Verteilung und also keine Verletzung der Bell-Ungleichungen.

Eine beliebte Behauptung ist, die Bohmsche Mechanik sei **empirisch äquivalent** zur Quantenmechanik. Denn schließlich seien die Wahrscheinlichkeitsverteilungen von Ort/Konfiguration ja in beiden Theorien gleich. Die erste Frage, die sich hier aufdrängt ist: Was ist den mit anderen quantenmechanischen Größen, wie Impuls und Spin? Die Antwort darauf ist, diese Größen seien eben im Gegensatz zum Ort nicht “real”. Spin sei eben durch ein Messverfahren, wie ein Stern-Gerlach-Magnet definiert, durch den schließlich der Spin-Freiheitsgrad in eine räumliche Aufspaltung übersetzt wird. Entsprechend lasse sich Impuls für freie Teilchen als asymptotischer Ort interpretieren [4.1.2]. Diese Unterscheidung ist Physikern schwer zu erklären, die im Labor ständig Zustände zwischen verschiedenen Freiheitsgraden übertragen, also die volle Freiheit im Hilbertraum ausnutzen. Für den Praktiker sind da keine Unterschiede im “Realitätsstatus” erkennbar und auch theoretisch geht man Spin und Impuls anders um als durch Rückführung auf den Ort. Immerhin, für den Ort selbst braucht man keine solchen Krücken, hier scheint die Bohmschen Mechanik sozusagen direkt an der quantenmechanischen Wahrheit teilzuhaben. Die Trajektorien selbst mögen ja schwer beobachtbar sein, weil jeder Messeingriff auch ein Bohmsches System stört. Aber für

eine direkte Beobachtung scheint alles gut. Allerdings gibt es Situationen, wo sich die Frage der Störung nicht stellt, speziell für zwei weit getrennte nicht wechselwirkende freie Teilchen: Hier kann ich sowohl quantenmechanisch als auch Bohmsch die Zeit der Ortsbestimmung für beide Teilsysteme frei wählen. Solche Zwei-Zeit Korrelationen kommen allerdings falsch heraus. Da die Ortsobservablen eines freien Teilchens zu verschiedenen Zeiten nicht kommutieren, kann man damit einerseits quantenmechanisch eine (sogar maximale [?]) Verletzung der Bellschen Ungleichung bekommen, bei der die Apparate-Einstellung einfach die Messzeit ist. Andererseits geht das Bohmsch natürlich nicht, denn alle betrachteten Variablen haben ja eine gemeinsame Verteilung. Die Bohmsche Auflösung dieser Diskrepanz ist [], sich darauf zu berufen, dass die zeitlich frühere Ortsmessung einen Kollaps der Wellenfunktion verursacht, der nichtlokal den Ort des zweiten Teilchens verändert. An dieser Antwort fand ich kurios, dass die Bohmsche Mechanik ja gerade angetreten war, besondere Messakte aus der Theorie zu eliminieren. Man muss aber der Theorie zu Gute halten, dass es eine Theorie “effektiven” Kollapses im Rahmen der Bohmschen Mess-Theorie gibt, die hier dann wohl einzusetzen wäre.

Jedenfalls haben wir hier praktisch das Ende der Betrachtung von “kleinen” Systemen erreicht. Schon das einfache Beispiel der Zwei-Zeit Korrelationen war ja nicht mehr ohne Einbeziehung des Messapparats auflösbar. Man kann auch allgemeiner sagen: Wenn die Bohmsche Mechanik mit der Quantenmechanik verglichen werden soll, wird sich das immer auf die Beschreibung kompletter Experimente beziehen müssen, sodass kein Weg an einer Bohmschen Mess-Theorie vorbeiführt. Die erste grundsätzliche Bemerkung dazu ist, dass die Struktur möglicher Wechselwirkungen in der Theorie ja schon fixiert ist. Damit ist erst mal unklar, ob eine Ablesung am Messapparat uns irgend etwas über den Bohmschen Ort des Teilchens verrät. Im Prinzip wäre ja möglich, dass für einen geeignet konstruierten Apparat eine hohe Korrelation zwischen den Bohmschen Orten des Teilchens und den Zeigerstellungen am Messapparat bestünde.

Die Rückführung ist nur plausibel, wenn man behauptet, letzten Endes sei jede Messung eine Ortsmessung am Messapparat, etwa, weil das Ergebnis als die Stellung eines Zeigers repräsentiert ist. Das ist ziemlich albern. Warum soll eine Darstellung durch Spin-Ausrichtung von Arealen auf einer Festplatte oder durch die Farbe auf einem Bildschirm weniger real sein?

### 11.2.4 Viele Welten

### 11.2.5 Consistent Histories

### 11.2.6 Dynamischer Kollaps

### 11.2.7 Esoterik und Bewusstsein

[► Von Neumann to Wigner to Capra to Schmidt. Penrose, Stapp, Deepak Chopra ]

## Anmerkungen zum Kapitel 11

### Zu Abschnitt 11.2.1 (Copenhagen)

Zur Geschichte von Bohr und Heisenberg gehört Heisenbergs Besuch 1941 in Kopenhagen. Er kam als Vertreter der Besatzungsmacht und es ist bis heute unklar was genau er bei Bohr wollte. Seine Nachkriegsversion [Hei73] ist, dass er eine Allianz der Physiker vorschlagen wollte, die die erwarteten großen Schwierigkeiten für den Bau der Bombe als Argument anführen könnten, ihren Bau zu verhindern. Für andere war er einfach ein Nazi, der es aus Inkompetenz nicht zustande brachte, die Bombe zu bauen und 1941 nur die Konkurrenz aushorchen oder verwirren wollte. Michael Frayns Theaterstück [Fra05] nimmt diese Spannung auf. Zusammen mit den historischen Kommentaren der zitierten Ausgabe absolut lesenswert.



# Kapitel 12

## Symmetrien und Observable elementarer Systeme

In diesem Kapitel verfolgen wir das Programm, das am Ende von Abschnitt 1.7 angedeutet wurde: Wir benutzen die Symmetrien, vor allem Raum-Zeit Symmetrien, die wir sinnvollerweise von einem Teilchen fordern können, um die grundlegenden Observablen für ein solches System zu fixieren. Das ist durchaus auch historisch ein wichtiges Motiv gewesen [Sch06]. Die erste Auflage von Hermann Weyls Buch [?] erschien 1928 und ist schon eine Zusammenfassung früherer Entwicklungen. So hat Weyl die gruppentheoretische Interpretation der kanonischen Vertauschungsrelationen in einem Brief an Born schon betont, bevor dieser sie überhaupt (mit Jordan und Heisenberg) publiziert hatte. Ebenfalls in die Frühzeit fallen Arbeiten von Wigner zum gruppentheoretischen Verständnis der Aufspaltung von Termen in Atomspektren. Seine Ableitung der irreduziblen Darstellungen der Poincaré-Gruppe, die die Teilcheneigenschaften Masse und Spin als Darstellungsparameter erklärt erschien 1935 und wird hier in Abschnitt ?? abgehandelt.

Wir holen dazu etwas weiter aus und stellen erst noch einmal die Grundbegriffe zu unitären Gruppendarstellungen zusammen. Davon ist einiges schon in Kapitel ?? angesprochen worden und wird hier systematisiert. Die Darstellung ist dennoch sehr kompakt und übergeht viele Feinheiten. Sie taugt also nicht zum gründlichen Lernen sondern nur für einen ersten Eindruck und zum Nachschlagen der Grundbegriffe.

Der zentrale Begriff für die Fixierung von Observablen ist der einer “kovarianten” Observablen, die sich unter einer gegebenen Gruppendarstellung wie eine analoge klassische Größe transformiert. Bei der Konstruktion stellt sich heraus, dass man den Fall von projektionswertigen Observablen am besten vorab studiert (Abschnitt 12.2). Damit sind dann schon wichtige Beispiele abgedeckt. Weitere ergeben sich, wenn man die Voraussetzung der Projektionswertigkeit fallen lässt.

## 12.1 Gruppen und Darstellungen

### 12.1.1 Topologische und Lie-Gruppen

Die Symmetriegruppen der Physik sind in der Regel **topologische Gruppen**, das heißt dass die Gruppe  $G$  auch ein topologischer Raum ist, in dem also Begriffe wie Nachbarschaft und Konvergenz definiert sind. Als Verträglichkeitsbedingung zwischen Algebra und Topologie wird dann gefordert, dass die Gruppenmultiplikation als Funktion beider Argumente stetig und die Inversenbildung stetig ist. Nach dieser Erläuterung ist die topologische Struktur vollständig durch das System  $\mathcal{N}$  der **Umgebungen der Eins** spezifiziert. Die Gruppentranslationen sind ja dann topologische Isomorphismen und die Umgebungen eines Punktes  $g \in G$  sind einfach von der Form  $gN = \{gn \mid n \in N\}$  mit  $N \in \mathcal{N}$ . Für die Drehgruppe ist ein System von Nachbarschaften durch die Drehungen um Winkel  $\leq \varepsilon$  gegeben und mit wenig Übung ist klar, wie man die Begriffe Konvergenz, offene und abgeschlossene Menge und Stetigkeit analog zur Analysis auf  $\mathbb{R}$  zu definieren hat. Um nur ein Beispiel zu geben: Die geforderte Stetigkeit der Multiplikation bedeutet, dass man zu je zwei Punkten  $g, h$  und einer Nachbarschaft  $N \in \mathcal{N}$  Nachbarschaften  $M, K \in \mathcal{N}$  angeben kann, sodass aus  $g' \in gM$  und  $h' \in hK$  folgt, dass  $g'h' \in ghN$  gilt. Weil die Nachbarschaften aller Gruppenelemente bis auf Translation gleich sind, gibt es auf Gruppen immer auch einen natürlichen Begriff von gleichmäßiger Stetigkeit:  $f : G \rightarrow \mathbb{C}$  heißt gleichmäßig stetig, wenn es zu jedem  $\varepsilon$  eine Nachbarschaft  $N \in \mathcal{N}$  gibt, sodass aus  $g \in hN$  folgt, dass  $|f(g) - f(h)| \leq \varepsilon$ . Wir betrachten vor allem **lokal kompakte** Gruppen. Der hierin steckende Begriff der kompakten Teilmenge bezeichnet eine Teilmenge, für die jede offene Überdeckung eine endliche Teilüberdeckung hat. In  $\mathbb{R}^n$  sind das die beschränkten und abgeschlossenen Mengen. Das Beiwort "lokal" heißt, dass wir die Umgebungen  $N \in \mathcal{N}$  kompakt wählen können. Dabei machen wir uns zu Nutze, dass zwei Nachbarschaftssysteme  $\mathcal{N}$  und  $\mathcal{N}'$  die gleiche Topologie (also die gleichen offenen Mengen, Stetigkeitsbegriffe etc.) definieren, wenn jede Menge  $N \in \mathcal{N}$  eine Menge  $N' \in \mathcal{N}'$  enthält und umgekehrt. In  $\mathbb{R}^n$  haben wir die Wahl, ob wir als Umgebungen die offenen oder die abgeschlossenen Kugeln verwenden wollen. Die abgeschlossenen Kugeln sind kompakt, also ist  $\mathbb{R}^n$  lokal kompakt. Die wichtigste Eigenschaft lokal kompakter Gruppen ist, dass darauf ein, bis auf einen positiven Faktor eindeutiges invariantes Maß existiert, das sogenannte **Haarmaß**. Wir bezeichnen Integration bezüglich dieses Maßes einfach mit  $\int dg \dots$ . Invarianz bedeutet dann, dass für jedes  $h \in G$  und jede messbare Funktion  $f : G \rightarrow \mathbb{C}$  gilt:

$$\int dg f(hg) = \int dg f(g) . \quad (12.1)$$

Als kurze Substitutionsregel kann man das auch als " $d(h^{-1}g) = dg$ " schreiben. Für die Substitution  $g \mapsto gh$  durch Rechtsmultiplikation gilt dies im Allgemeinen nicht. Hier tritt eine Funktionaldeterminante auf, die sogenannte **modulare Funktion**  $\Delta : G \rightarrow \mathbb{R}_+$ , für die

$$\int dg f(gh) = \Delta(h) \int dg f(g) \quad (12.2)$$

gilt. Für viele lokal kompakte Gruppen, sogenannte unimodulare Gruppen ist konstant  $\Delta(g) = 1$ . Dazu gehören offenbar alle abelschen Gruppen, denn dort sind ja die linken Seiten von (12.1) und (12.2) gleich. Das Haarmaß der Gruppe  $\mathbb{R}^n$  ist das **Lebesgue-Maß**.

Unimodular sind auch alle kompakten Gruppen. (Man sieht leicht, dass die modulare Funktion ein Homomorphismus und stetig sein muss, auf einer kompakten Menge also auch ihr Minimum annehmen muss. Wegen  $\Delta(g)\Delta(g^{-1}) = 1$  kann dieses Minimum nicht Null sein und nicht  $> 1$ . Wäre es  $\Delta(g) < 1$ , hätten wir auch  $\Delta(g^2) = \Delta(g)^2 < \Delta(g)$ , ein Widerspruch). Genau auf den kompakten Gruppen ist das Haarmaß der ganzen Gruppe endlich. In diesem Fall wählen wir den Normierungsfaktor per Konvention so, dass  $\int dg = 1$  ist. Zu den kompakten Gruppen gehören alle abgeschlossenen Gruppen von endlich dimensionalen Matrizen, deren Matrixelemente beschränkt sind, speziell also die Drehgruppe und abgeschlossene Untergruppen der unitären Gruppe in endlicher Dimension.

Eine **Lie-Gruppe** ist eine topologische Gruppe, in der auch zusätzlich das Differenzieren einen Sinn bekommt. Die Gruppe ist dann eine differenzierbare Mannigfaltigkeit endlicher Dimension  $n$ , d.h., wir können in einer Umgebung jedes Punktes  $n$  Koordinaten einführen, wobei auf Überlappgebieten zweier solcher “Karten” die Koordinatenumrechnung beliebig oft differenzierbar sein muss. Für eine Gruppe fordert man als Verträglichkeit natürlich die Differenzierbarkeit der Gruppenoperationen. Im Prinzip könnte man bei den Kartenwechseln auch einen geringeren Differenzierbarkeitsgrad fordern, inclusive Grad 0, also einfacher Stetigkeit. Es ist nun eines der grundlegenden Ergebnisse und die Lösung des 5. Hilbertschen Problems durch Gleason und Montgomery-Zippin[?, ?], dass dies für eine Gruppe keinen Unterschied macht, dass also aus einem Kartensystem (“Atlas”) mit nur stetige Kartenwechseln immer einer mit  $C^\infty$  oder gar analytischen Kartenwechseln aussortiert werden kann. Die Gruppenstruktur wirkt hier glättend und die wesentliche Eigenschaft lokal durch  $\mathbb{R}^n$  kartierbarer Gruppen ist, dass genügend kleine Umgebungen der Eins keine nicht-trivialen Untergruppen mehr enthalten.

Das meiste von der Struktur einer Lie-Gruppe lässt sich schon in einer Umgebung der Eins, genauer in erster Ordnung der Abweichung von der Eins, also im Tangentialraum  $T_e G$  bei der Eins analysieren. Zunächst erlaubt die Gruppenstruktur eine Identifikation aller Tangentialräume mit dem Tangentialraum bei  $e$ . Die Vektoren in  $T_e G$  lassen sich als die Richtungsableitungen von differenzierbaren Kurven  $\gamma : \mathbb{R} \rightarrow G$  mit  $\gamma(0) = e$  interpretieren. Zu jeder solchen Kurve definiert  $\tilde{\gamma}(t) = \gamma(t)g$  eine entsprechende Kurve  $\tilde{\gamma}(0) = g$  und dies liefert eine Abbildung der Tangentialräume  $T_e G \rightarrow T_g G$ . Aus einem Tangentialvektor bei  $e$  wird damit ein (“rechtsinvariantes”) Vektorfeld. Wie jedes Vektorfeld definiert das eine gewöhnliche Differentialgleichung auf  $G$  und die bei  $e$  startenden Lösungen sind gerade die einparametrischen Untergruppen von  $G$ . Der Kommutator zweier Vektorfelder ist wieder ein solches und dies liefert eine bilineare Operation auf dem Tangentialraum  $T_e G$ . Die übliche Sprechweise dazu ist:  $\mathfrak{g} = T_e G$  ist die **Lie-Algebra** der Gruppe  $G$  und die angesprochene Operation wird als Kom-

mutatorklammer geschrieben. Zu  $\xi_1, \xi_2 \in \mathfrak{g}$  ist also  $[\xi_1, \xi_2] \in \mathfrak{g}$  und diese Zuordnung ist bilinear. Die so definierte Lie-Klammer erfüllt automatisch die Jacobi-Identität

$$[\xi_1, [\xi_2, \xi_3]] + [\xi_2, [\xi_3, \xi_1]] + [\xi_3, [\xi_1, \xi_2]] = 0. \quad (12.3)$$

Umgekehrt nennt man jeden Vektorraum über  $\mathbb{R}$  mit einem antisymmetrischen bilinearen Produkt, das dieser Identität genügt, eine (abstrakte) Lie-Algebra. Jede abstrakte Lie-Algebra entsteht auf diese Weise. Allerdings kann es mehrere Gruppen mit der gleichen Lie-Algebra geben. Die Angabe der Lie-Algebra charakterisiert genau die lokale Struktur der Gruppe. Das heißt, die Lie Algebren zweier Gruppen sind genau dann isomorph, wenn die Gruppen **lokal isomorph** sind, wenn es einen in beiden Richtungen stetigen Isomorphismus zwischen geeigneten Umgebungen der Eins gibt, der auch alle dort definierten Produkte ineinander überführt. Unterschiede gibt es also nur bei der globalen Struktur, also bei Elementen, die mit der Eins gar nicht verbunden sind, und bei möglichen Identitäten zwischen hohen Potenzen kleiner Transformationen. Um dies genauer zu klären, müssen wir die Zusammenhangsverhältnisse in der Gruppe betrachten.

Eine Menge  $M$  in einem topologischen Raum heißt **zusammenhängend**, wenn man nicht zwei disjunkte offene Mengen  $U_1, U_2$  finden kann, sodass  $M = (M \cap U_1) \cup (M \cap U_2)$ . In einer topologischen Gruppe ist die **Zusammenhangskomponente** der Eins die größte zusammenhängende Menge  $G_0$ , die die Eins enthält. Im Allgemeinen muss eine zusammenhängende Menge nicht wegzusammenhängend sein, das heißt man kann nicht unbedingt je zwei Punkte mit einem stetigen Weg verbinden. Da aber die Nachbarschaften einer Lie-Gruppe topologisch äquivalent zu Kugeln im  $\mathbb{R}^n$  gewählt werden können und damit wegzusammenhängend sind, ist die Zusammenhangskomponente der Eins tatsächlich auch wegzusammenhängend.  $G_0$  besteht also aus den Elementen  $g$ , sodass es einen stetigen Weg  $\gamma: [0, 1] \rightarrow G$  gibt mit  $\gamma(0) = e$  und  $\gamma(1) = g$ . Daraus sieht man, dass  $G_0$  eine Untergruppe ist, denn solche Wege kann man multiplizieren und invertieren, indem man  $(\gamma_1 \gamma_2)(t) = \gamma_1(t) \gamma_2(t)$  und  $(\gamma^{-1})(t) = \gamma(t)^{-1}$  setzt.  $G_0$  ist sogar eine normale Untergruppe, da für  $h \in G$  das Element  $hgh^{-1}$  durch den Weg  $h\gamma(t)h^{-1}$  mit der Eins verbunden ist. Damit ist der Quotient  $G/G_0$  wieder eine Gruppe, die gerade ein Element für jede Zusammenhangskomponente enthält. Nehmen wir als Beispiel die Gruppe  $O_3$  der orthogonalen  $3 \times 3$ -Matrizen. Darauf ist die Determinantenfunktion stetig, also gibt es keinen stetigen Weg, der Matrizen  $R, R'$  mit  $\det R = +1$  und  $\det R' = -1$  verbindet.  $G_0$  ist hier die Untergruppe der Drehungen, die offenbar durch Änderung des Drehwinkels mit der Eins verbunden sind.  $G/G_0$  besteht aus zwei Punkten, die wir passenderweise als 1 und  $-1$  mit der Multiplikation als Gruppenprodukt wählen können.

Für die nächst feinere Analyse betrachten wir nur noch die Zusammenhangskomponente  $G_0$ , nehmen also an, dass die Gruppe  $G$  bereits zusammenhängend ist. Als **einfach zusammenhängend** bezeichnet man einen topologischen Raum, in dem jeder Weg zu einem konstanten Weg kontrahiert werden kann oder äquivalent, in dem es zu je zwei Wegen  $\gamma_1, \gamma_2$  mit gleichen Endpunkten eine Interpolation gibt, also eine Funktion  $\gamma_{12}: [0, 1]^2 \rightarrow G$  gibt, mit  $\gamma_{12}(t, 0) = \gamma_1(t)$  und  $\gamma_{12}(t, 1) = \gamma_2(t)$ . Solche Wege



heißen auch homotop. Die Drehgruppe ist ein Beispiel für eine zusammenhängende, aber nicht einfach zusammenhängende Gruppe. Der Prototyp eines nicht kontrahierbaren Weges ist die volle Drehung um  $2\pi$ , also  $\gamma(t)$  eine Drehmatrix um den Winkel  $2\pi t$  um eine feste Achse. [►Evtl Diskussion aus Sec.5.4 hierher.].

Aus jeder zusammenhängenden Lie-Gruppe  $G$  kann man eine lokal dazu isomorphe Lie-Gruppe  $\tilde{G}$  zu machen, die obendrein einfach zusammenhängend ist. Die Konstruktion dieser sogenannten “universellen” **Überlagerungsgruppe**  $\tilde{G}$  geht so: Wir betrachten zunächst die Gruppe der stetigen Wege mit Anfangspunkt  $e$  mit den oben beschriebenen Operationen. Die Gruppenoperationen sind offenbar mit der Äquivalenzrelation “Homotopie” verträglich; wir erhalten also wieder eine Gruppe  $\tilde{G}$ , wenn wir homotope Wege identifizieren. Eine differenzierbare Struktur für  $\tilde{G}$  können wir zusammenbauen, indem wir eine Karte für eine einfach zusammenhängende Umgebung der Eins wählen. Für Wege die ganz in dieser Umgebung verlaufen ändert sich offenbar gar nichts und wir wählen auch die gleiche Karte für  $G$  und  $\tilde{G}$ . Durch Multiplikation können wir diese Karte an den Endpunkt jedes Weges transportieren und müssen zeigen, dass diese Wahl die Homotopie angemessen berücksichtigt und die Kartenwechsel differenzierbar bleiben. Die Überlagerungsgruppe wird so zur Lie-Gruppe und ist offenbar lokal isomorph zu  $G$ . Ferner ist die Endpunktabbildung  $\eta : \tilde{G} \rightarrow G$  differenzierbar und ein surjektiver Homomorphismus. Damit ist der Kern von  $\eta$ , also  $\ker \eta = \eta^{-1}(\{e\})$  eine normale Untergruppe. Elemente von  $\ker \eta$  sind also die Homotopieklassen von Wegen von  $e$  nach  $e$ . Die Elemente sind daher die gleichen, wie die der sogenannten Fundamentalgruppe  $\pi_1(G)$  von  $G$  als topologischen Raum. Auch ohne Gruppenstruktur kann man Wege mit gleichem Anfangs- und Endpunkt aneinandersetzen und umkehren und diese Zusammensetzung wird für die Definition der Fundamentalgruppe verwendet. Man macht sich aber leicht klar, dass dies zur oben verwendeten  $t$ -weisen Multiplikation homotope Wege produziert. Daher gilt auch im Gruppensinn  $\pi_1(G) \cong \ker \eta \subset \tilde{G}$ . Per Konstruktion ist  $\ker \eta$  eine diskrete Untergruppe von  $\tilde{G}$ , das heißt zu jedem Element können wir eine Nachbarschaft angeben, sodass diese sämtlich disjunkt sind. Als diskrete normale Untergruppe liegt  $\ker \eta$  im Zentrum der Gruppe, das heißt für  $g \in \tilde{G}$  und  $h \in \ker \eta$  gilt  $gh = hg$ . (Zur Begründung: Sei  $\gamma_0$  ein Weg, der  $h$  definiert und  $\gamma$  ein Weg der  $g$  definiert. Dann ist  $\gamma_{12}(t, s) = \gamma(st)\gamma_0(t)\gamma(st)^{-1}$  eine Homotopie der Wege für  $h$  und  $ghg^{-1}$ , also sind diese Elemente in  $\tilde{G}$  gleich).

Wir können damit den Zusammenhang zwischen Lie-Gruppen und Lie-Algebren präziser fassen: Zu jeder abstrakten Lie-Algebra  $\mathfrak{g}$  gehört genau eine zusammenhängende und einfach zusammenhängende Lie-Gruppe  $\tilde{G}$ . Sie ist zu jeder anderen zusammenhängenden Lie-Gruppe  $G$  mit Lie-Algebra  $\mathfrak{g}$  die universelle Überlagerungsgruppe.

Einige Beispiele: Die Überlagerungsgruppe zu  $O_3$  ist  $SU(2)$  mit  $\pi_1(G) = \{1, -1\}$ . Die Überlagerungsgruppe zum Einheitskreis in  $\mathbb{C}$  mit Multiplikation ist  $\mathbb{R}$  mit  $\pi_1(G) = \mathbb{Z}$ . Oder: Bei Drehungen um eine feste Achse habe ich die Wahl, entweder Drehungen um  $2\pi$  als äquivalent zur Eins anzusehen oder (dies in  $\tilde{G} \cong \mathbb{R}$ ) Volldrehungen mitzuzählen wie ein Kilometerzähler. Umgekehrt, wenn ich in  $\mathbb{R}^n$  ein diskretes Gitter wähle, also einen Satz von  $n$  linear unabhängigen Vektoren  $\vec{a}_i$  und damit die diskrete Unter-

gruppe  $\Gamma = \{\sum_i n_i \vec{a}_i \mid n_i \in \mathbb{Z}\}$ , dann ist  $\mathbb{R}^n/\Gamma = T$  ein Torus mit Gruppenstruktur und  $\pi_1(T) = \Gamma \cong \mathbb{Z}^n$ .

In der Darstellungstheorie kann man für topologische Gruppen den Begriff der **stetigen Darstellung** erklären, d.h. Darstellungen für die die Funktion  $g \mapsto U_g$  stetig ist. Von den in Frage kommenden Topologien auf der Operatorseite ist eine (fast immer) zu stark, nämlich  $\|U_g - \mathbb{1}\| \leq \varepsilon$  für  $g$  in einer Nachbarschaft der Eins. Die anderen beiden sind auf unitären Operatoren eh gleich, nämlich die “starke” Stetigkeit, das heißt die Normstetigkeit aller Funktionen  $g \mapsto U_g \varphi$  für festes  $\varphi$  und die “schwache” Stetigkeit, d.h., die Stetigkeit aller Matrixelemente  $\langle \varphi, U_g \psi \rangle$ . (Beweis durch Ausdrücken des Normquadrats als Skalarprodukts und Ausnutzen der Unitarität). Es reicht unter ziemlich allgemeinen Voraussetzungen sogar, nur die Messbarkeit der Matrixelemente zu fordern um wiederum starke/schwache Stetigkeit zu folgern [?].

In einer Lie-Gruppe folgt aus der Stetigkeit auch die Differenzierbarkeit der Darstellung: Nach dem Satz von Stone-von Neumann hat ja eine stetige Darstellung der Gruppe  $\mathbb{R}$  einen selbstadjungierten Erzeuger. Die einparametrischen Untergruppen einer Lie-Gruppe sind ja nun gerade durch ihre Ableitungen bei  $e$ , also die Elemente der Lie-Algebra gegeben. Man schreibt die Untergruppe auch als  $\exp(t\xi)$  für  $\xi \in \mathfrak{g}$ . Dann ist für eine stetige Darstellung  $U$  die Funktion  $t \mapsto U_{\exp(t\xi)} = \exp(\frac{it}{\hbar} G(\xi))$ , wobei  $G(\xi)$  ein selbstadjungierter Operator ist. Die Abbildung  $\xi \mapsto G(\xi)$  ist linear und hat die Eigenschaft, dass

$$\frac{i}{\hbar} [G(\xi_1), G(\xi_2)] = G([\xi_1, \xi_2]) . \quad (12.4)$$

$G$  nennen wir die zu  $U$  gehörige Darstellung von  $\mathfrak{g}$ . Umgekehrt kann man eine Darstellung der Lie-Algebra zu einer Darstellung der Gruppe exponentiieren, wenn es einen gemeinsamen dichten invarianten Definitionsbereich  $\mathcal{D}$  der selbstadjungierten Operatoren  $G(\xi)$  und all ihrer Potenzen gibt, sodass man die Exponentialreihen angewendet auf Vektoren in  $\mathcal{D}$  aufsummieren kann.

Wir haben das alles schon einmal durchgeführt für die Drehgruppe und die Darstellung der Lie-Algebra der Drehimpulse. Dabei haben wir in Abschnitt 5.4 gerade das ausgenutzt, was “schief gehen” kann, wenn man eine Gruppendarstellung über die Darstellung ihrer Lie-Algebra konstruiert: Die Lie-Algebra unterscheidet ja gerade nicht zwischen den verschiedenen nicht einfach zusammenhängenden, aber lokal isomorphen Gruppen mit der gleichen Algebra. Es kann also passieren, dass man eine Darstellung der universellen Überlagerungsgruppe bekommt. Aus der Darstellung  $\tilde{U} : \tilde{G} \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$  bekommt man dann nicht unbedingt durch  $U_{\eta(g)} = \tilde{U}_g$  eine Darstellung  $U$  der gegebenen Gruppe zurück, nämlich gerade dann nicht, wenn es Elemente  $g \in \pi_1(G) \subset \tilde{G}$  gibt, die nicht durch  $\mathbb{1}$  dargestellt werden. Wie bei der Drehgruppe ist uns das aber in der Regel egal, weil ja immer noch eine projektive Darstellung bekommen können, nämlich, wenn solche  $\tilde{U}_g$  wenigstens Vielfache der  $\mathbb{1}$  sind. Dies ist sogar automatisch der Fall, wenn die Darstellung  $\tilde{U}$  irreduzibel ist. Da  $\pi_1(G)$  im Zentrum von  $\tilde{G}$  liegt, also mit allen anderen Elementen vertauscht, muss dann  $\tilde{U}_g$  mit der gesamten Darstellung vertauschen, also ein Vielfaches von  $\mathbb{1}$  sein.

### 12.1.2 Irreduzibilität und Darstellung kompakter Gruppen

Betrachten wir eine Menge  $U_G = \{U_g | g \in G\} \subset \mathcal{B}(\mathcal{H})$  von Operatoren, deren Gruppenstruktur uns für einen Moment nicht interessiert. Man nennt eine solche Menge **reduzibel**, wenn es einen gemeinsamen invarianten Unterraum  $\mathcal{H}_1 \subset \mathcal{H}$  gibt (mit  $\mathcal{H}_1 \neq \{0\}$  und  $\mathcal{H}_1 \neq \mathcal{H}$ ), der von allen  $U_g$  in sich abgebildet wird, also  $U_g \mathcal{H}_1 \subset \mathcal{H}_1$ . Wenn  $P$  der Projektor auf  $\mathcal{H}_1$  ist, gilt dann genau  $U_g P = P U_g P$  für alle  $G$ . Leicht umgeformt ist dies  $(\mathbb{1} - P)U_g P = 0$ , das heißt in der Block-Matrix Zerlegung der Operatoren  $U_g = \sum_{i,j=0,1} P_i U_g P_j$  mit  $P_0 = (\mathbb{1} - P)$  ist dann immer der 0-1-Block Null. Wenn die Menge von Operatoren unter Adjungiertenbildung abgeschlossen ist ( $(U_g)^* = U_g$ ), und das ist für unitäre Darstellungen wegen  $(U_g)^* = U_{g^{-1}}$  immer der Fall, dann ist automatisch auch der Block  $P U_g (\mathbb{1} - P) = 0$ . Dies wiederum ist äquivalent zu der Aussage, dass  $P U_g = U_g P$  für alle  $g$ . Solche Projektoren können wir finden, sobald es irgend einen Operator  $A$  gibt, der mit allen  $U_g$  vertauscht und nicht gerade ein Vielfache der  $\mathbb{1}$  ist: Dies gilt dann nämlich auch für  $(A + A^*)$  oder  $i(A - A^*)$ . Wir können also annehmen, dass  $A$  hermitesch ist. Da  $A \neq a\mathbb{1}$  gibt es eine Spektralprojektor  $P \neq 0, \mathbb{1}$ , der dann auch mit  $U_G$  vertauscht. Wir nennen allgemein die Menge

$$U'_G = \{A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) | \forall g \in G [U_g, A] = 0\} \quad (12.5)$$

die **Kommutante**<sup>1</sup> der Operatormenge  $U_G$  und haben gezeigt, dass  $U_G = (U_G)^*$  nicht reduzibel, genannt **irreduzibel** ist, genau dann, wenn  $U'_G = \mathbb{C}\mathbb{1}$ . Für die Zwecke von unitären Darstellungen ist dies der Begriff von Irreduzibilität, den wir im folgenden verwenden. Die irreduziblen Darstellungen von  $G$  zu finden ist eine, wenn nicht *die* Grundaufgabe der Darstellungstheorie, denn daraus lassen sich alle weiteren zusammensetzen.

Für den Vergleich von Darstellungen verallgemeinern wir die Kommutante auf den Fall zweier Darstellungen  $U_g^{(1)}$  auf  $\mathcal{H}_1$  und  $U_g^{(2)}$  auf  $\mathcal{H}_2$ : Wir nennen  $A : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$  einen **Verkettungsoperator**<sup>2</sup>, wenn  $A U_g^{(1)} = U_g^{(2)} A$  für alle  $g$  gilt. Wir schreiben dafür auch kurz  $A : U^{(1)} \rightarrow U^{(2)}$ . Die "Kette" im Namen erinnert daran, dass mit einem weiteren Verkettungsoperator  $B : U^{(2)} \rightarrow U^{(3)}$  auch  $BA : U^{(1)} \rightarrow U^{(3)}$  ein Verkettungsoperator ist. Die Verkettungsoperatoren einer Darstellung mit sich selbst bilden die Kommutante. Als **Schursches Lemma** bezeichnet man die elementare Bemerkung, dass ein Verkettungsoperator  $A$  zwischen irreduziblen unitären Darstellungen entweder bis auf einen Faktor unitär oder Null ist, denn  $A^* A$  und  $A A^*$  liegen ja in den jeweiligen Kommutante, müssen also Vielfache der Eins sein. Wir bezeichnen mit  $\text{Irrep}(G)$  die Menge der Äquivalenzklassen von irreduziblen Darstellungen. Das heißt, zu jedem  $\alpha \in \text{Irrep}(G)$  betrachten wir eine irreduzible Darstellung  $U^{(\alpha)}$  auf einem Hilbertraum  $\mathcal{H}_\alpha$  als gegeben. Für verschiedene  $\alpha, \beta \in \text{Irrep}(G)$  sollen diese Darstellungen verschieden sein (es gibt nur die Null als Verkettungsoperator) und andererseits soll diese Liste komplett sein, das heißt jede irreduzible Darstellung ist zu einem  $U^{(\alpha)}$  unitär äquivalent.  $\alpha$  dient in dieser Notation nur als Label, so wie wir das vom Spin gewöhnt sind, der die irre-

<sup>1</sup>Engl.: commutant

<sup>2</sup>Engl.: intertwining operator

duziblen Darstellungen von  $SU(2)$  durchnummeriert. Mit  $d_\alpha = \dim \mathcal{H}_\alpha$  bezeichnen wir die Dimension der Darstellung  $\alpha$ . Später werden wir auch eine Basis in  $\mathcal{H}_\alpha$  brauchen. Diese bezeichnen wir mit  $|\alpha j\rangle$  mit  $j = 1, \dots, d_\alpha$ .

Sei nun  $U$  eine beliebig Darstellung und  $U^{(\alpha)}$  eine irreduzible. Wenn es einen Verkettungsoperator  $0 \neq A : U^{(\alpha)} \rightarrow U$  gibt, sagen wir dass  $U^{(\alpha)}$  in  $U$  enthalten ist. Wir können dann  $A$  so normieren, dass  $A^*A = \mathbb{1}$ , also  $A$  eine Isometrie ist. Dann ist  $AA^*$  ein Projektor in der Kommutante von  $U$  und wir können  $U$  zerlegen in  $AA^*U$  und  $(\mathbb{1} - AA^*)U$  und in der letzteren Darstellung wieder nach darin enthaltenen Irreduziblen suchen. Wenn dieser Prozess des **Ausreduzierens** zum Ende kommt, hat man die Darstellung in eine (vielleicht unendliche) direkte Summe von irreduziblen Darstellungen zerlegt und nennt die Darstellung **vollständig reduzibel**. Jede irreduzible Darstellung kann dabei mehrfach vorkommen, wobei die Anzahl oder “**Vielfachheit**” (oder Multiplizität)  $n_\alpha(U)$  nicht von Zerlegungsprozess abhängt. Wenn  $n_\alpha(U) > 1$  ist die Wahl der Unterräume nicht eindeutig, ähnlich wie die Eigenvektoren bei einem entarteten Eigenwertproblem. Bei Eigenwertproblemen ist daher oft die eindeutige Zerlegung mit möglicherweise mehrdimensionalen Eigenprojektionen hilfreich. Entsprechend kann man die Ausreduktion einer Gruppendarstellung  $U$  als unitäre Äquivalenz schreiben

$$\mathcal{H} \cong \bigoplus_{\alpha} \mathcal{H}_{\alpha} \otimes \mathbb{C}^{n_{\alpha}} \quad (12.6)$$

$$U_g \cong \bigoplus_{\alpha} U_g^{(\alpha)} \otimes \mathbb{1} . \quad (12.7)$$

Die Vieldeutigkeit der Ausreduktion entspricht dann genau einer Basiswahl in dem Multiplizitätsraum  $\mathbb{C}^{n_\alpha}$ . Im Allgemeinen ist eine Gruppendarstellung nicht vollständig reduzibel, schon weil es ein Kontinuum von verschiedenen irreduziblen Darstellungen gibt. In der Analogie mit Eigenwertproblemen entspricht das dem kontinuierlichen Spektrum. Die Kommutante enthält dann Projektoren, die immer feiner unterteilt werden können.

In einem wichtigen Fall ist allerdings alles diskret zerlegbar, nämlich wenn die Gruppe  $G$  kompakt ist. Neben der Drehgruppe und  $SU(2)$  schließt dies die unitäre Gruppe auf einem endlich dimensional Hilbertraum und alle endlichen Gruppen ein. Der Hauptgrund für die Vereinfachung ist, dass man jeden Operator durch Integration zu einem Verkettungsoperator aufwerten kann. Da das Haarmaß im kompakten Fall endlich ist und nur bis auf einen Faktor bestimmt ist, werden wir im folgenden das Maß als Wahrscheinlichkeitsmaß normieren, also  $\int dg = 1$  setzen. Für den Rest dieses Abschnitts bezeichnet  $G$  eine kompakte Gruppe. Seien also  $U^{(1)}$  und  $U^{(2)}$  Darstellungen von  $G$  und  $A : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$  ein beschränkter Operator. Dann betrachten wir den Operator

$$M(A) = \int dg U_{g^{-1}}^{(2)} A U_g^{(1)} . \quad (12.8)$$

Wegen der Invarianz des Haarmaßes ist dies immer ein Verkettungsoperator. Wenn  $A$  schon ein Verkettungsoperator war, ist offenbar  $M(A) = A$ . Außerdem erhält  $M$  die Positivität und für jeden Spurklasseoperator  $A$  gilt  $\text{tr } M(A) = \text{tr } A$ .

Als erste Aussage zeigen wir: *Jede Darstellung einer kompakten Gruppe hat eine endlich dimensionale Teildarstellung.* Dazu betrachten wir einen Einheitsvektor  $\varphi$  und mitteln dies zu  $\rho = M(|\varphi\rangle\langle\varphi|)$ . Nach den gerade genannten Eigenschaften ist  $\rho$  eine Dichtematrix, weil positiv mit  $\text{tr } \rho = 1$ . Sei nun  $P$  der Eigenprojektor von  $\rho$  zu einem von Null verschiedenen Eigenwert. In der Spursumme kommt dieser Wert dann  $\text{tr } P$  mal vor, sodass aus  $\text{tr } \rho < \infty$  auch  $\text{tr } P = \dim P\mathcal{H} < \infty$  folgt. Da  $\rho$  mit der Darstellung vertauscht, tut dies auch  $P$ . Also haben wir einen endlich dimensional invarianten Teilraum gefunden. Hierbei könnte auch  $P = \mathbb{1}$  sein, aber nicht  $P = 0$ .

Daraus folgt zunächst: *Jede irreduzible Darstellung einer kompakten Gruppe ist endlich dimensional*, denn eine irreduzible Darstellung enthält ja keine echten Teildarstellungen, muss also selbst endlich dimensional sein. Man kann das auch noch etwas direkter sehen. In einer irreduziblen Darstellung gilt ja  $M(A) = m(A)\mathbb{1}$  mit  $m(A) \in \mathbb{C}$ . Außerdem ist  $\text{tr}(A) = \text{tr}(M(A)) = m(A) \text{tr } \mathbb{1} = m(A)d$ . Das ergibt die nützliche Formel

$$M(A) = \frac{1}{d} \text{tr}(A) \mathbb{1} . \quad (12.9)$$

Außerdem folgt: *Jede Darstellung einer kompakten Gruppe ist vollständig reduzibel.* Dazu betrachten wir einen maximalen vollständig reduziblen Unterraum  $\mathcal{H}_{\max} \subset \mathcal{H}$  und nehmen im Sinne eines Widerspruchsbeweises an, dass  $\mathcal{H}_{\max} \neq \mathcal{H}$ . Wegen der Maximalität kann das Orthogonalkomplement  $\mathcal{H}_{\max}^\perp$  keine irreduziblen Teilräume mehr enthalten. Andererseits enthält aber die Darstellung auf  $\mathcal{H}_{\max}^\perp$  eine endlich dimensionale Teildarstellung. Jede endlich dimensionale Darstellung einer beliebigen Gruppe ist vollständig reduzibel, weil in einem endlich dimensional Raum der Prozess, jede reduzible Teildarstellung zu reduzieren, zu immer kleineren Dimensionen führt und daher abbrechen muss. Damit müsste es in  $\mathcal{H}_{\max}^\perp$  doch eine irreduzible Teildarstellung geben. Damit ist die Aussage gezeigt.

Wir müssen also nun noch die irreduziblen Darstellungen bestimmen. Dafür ist sehr nützlich, dass es eine einfach zu beschreibende Darstellung gibt, deren Ausreduktion ganz  $\text{Irrep}(G)$  liefert. Dies ist die sogenannte **rechtsreguläre Darstellung** mit dem Hilbertraum  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(G) = \mathcal{L}^2(G, dg)$  und den Darstellern  $(R_g\psi)(h) = \psi(hg)$ . Sie ist unitär wegen der Invarianz des Haar-Maßes. Sei nun  $V : U^{(\alpha)} \rightarrow R$  ein Verkettungsoperator. Dann ist  $V|\alpha, j\rangle = \Psi_j$  eine Funktion auf  $G$ . Die Verkettungseigenschaft sagt uns, dass

$$\Psi_j(hg) = (VU_g^{(\alpha)}|\alpha, j\rangle)(h) = \sum_k \Psi_k(h) \langle\alpha, k|U_g^{(\alpha)}|\alpha, j\rangle . \quad (12.10)$$

Wenn wir hier  $h = e$  setzen, erhalten wir also bis auf noch unbestimmte aber eben beliebige Koeffizienten  $\Psi_k(e)$  eine explizite Formel für  $V : U^{(\alpha)} \rightarrow R$ . Da  $R$  vollständig reduzibel ist, müssen also die Matrixelement-Funktionen

$$\Phi_{kj}^\alpha(g) = \sqrt{d_\alpha} \langle\alpha, k|U_g^{(\alpha)}|\alpha, j\rangle \quad (12.11)$$

den ganzen Raum aufspannen. Das **Peter-Weyl-Theorem** besagt, dass sie auch genau

eine Orthonormalbasis von  $\mathcal{L}^2(G)$  sind. Das ist leicht nachzurechnen:

$$\langle \Phi_{jk}^\alpha | \Phi_{ab}^\beta \rangle = \sqrt{d_\alpha d_\beta} \int dG \langle \alpha, k | U_g^{(\alpha)*} | \alpha, j \rangle \langle \beta, a | U_g^{(\beta)} | \beta, b \rangle . \quad (12.12)$$

Hier wird aus dem Operator  $|\alpha, j\rangle\langle\beta, a| : \mathcal{H}_\beta \rightarrow \mathcal{H}_\alpha$  durch Mittelung ein Verkettungsoperator  $A$  erzeugt. Für  $\alpha \neq \beta$  sagt uns dann das Schursche Lemma, dass dieser Verkettungsoperator Null ist und also das Skalarprodukt verschwindet. Wir brauchen also nur noch den Fall  $\alpha = \beta$  zu betrachten. Dann ist der Verkettungsoperator nach (12.9) gleich  $M(|\alpha, j\rangle\langle\alpha, a|) = d_\alpha^{-1} \delta_{aj} \mathbb{1}$ . Eingesetzt ergibt dies also das Skalarprodukt  $\delta_{\alpha\beta} \delta_{aj} \delta_{bk}$ , wie behauptet.

Mit minimalen Varianten gilt das Gesagte auch für die **linksreguläre Darstellung**. Die lebt ebenfalls auf  $\mathcal{L}^2(G)$  und hat die unitären Darstellern  $(L_g \psi)(h) = \psi(g^{-1}h)$ . Offenbar vertauschen sie, das heißt für alle  $g, h$  gilt  $[L_g, R_h] = 0$ . Wir können sie daher gemeinsam in irreduzible Darstellungen zerlegen. Dies gibt eine unitären Äquivalenz

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^2(G) &\cong \bigoplus_{\alpha} \mathcal{H}_\alpha \otimes \mathcal{H}_\alpha \\ R_g &\cong \bigoplus_{\alpha} \mathbb{1} \otimes U_g^{(\alpha)} \\ L_g &\cong \bigoplus_{\alpha} \overline{U_g^{(\alpha)}} \otimes \mathbb{1} . \end{aligned} \quad (12.13)$$

Dabei wird die durch  $\cong$  angedeutete unitäre Isomorphie durch den Operator gegeben, der  $\Phi_{kj}^\alpha$  mit  $|k\rangle \otimes |j\rangle$  im  $\alpha$ -ten Summanden identifiziert. Damit wird ausgedrückt, dass  $R_g$  “auf den rechten Index von  $\Phi_{kj}^\alpha$  wirkt” und  $L_g$  auf den linken. Die komplex konjugierte Darstellung  $\bar{U}$  ist definiert durch  $\langle k | \bar{U}_g | j \rangle = \overline{\langle k | U_g | j \rangle}$ . Dieser Begriff hängt im Allgemeinen von der gewählten Basis ab. Hier ist natürlich die zu Beginn festgesetzte Basis  $|\alpha, j\rangle$  zu wählen.

Ein Operator, der mit  $R_G$  vertauscht ist also nun von der Form  $A \cong \bigoplus_{\alpha} (A_\alpha \otimes \mathbb{1})$ . Andererseits können wir das aber auch direkter sagen. Nehmen wir erst einmal an, dass  $A$  durch einen Integralkern gegeben ist, also

$$(A\Psi)(g) = \int dh \, a(g, h) \Psi(h) . \quad (12.14)$$

Dann wird aus  $[R_k, A] = 0$  gerade die Bedingung  $a(gk, h) = a(g, hk^{-1})$ . Wir können das verwenden um eine Variable des Integralkerns loszuwerden und  $a(g, h) = a(e, hg^{-1}) =: f_A(gh^{-1})$  zu setzen. Der Operator ist als von der Form  $(A\Psi)(g) = \int dh \, f_A(gh^{-1}) \Psi(h)$ . Einen solchen Ausdruck nennt man, wie schon in  $\mathbb{R}^n$  eine **Faltung**<sup>3</sup>, notiert als  $A\Psi = f_A * \Psi$ . Wir können sie auch schreiben als  $A = \int dh \, f_A(h) L_h$ . Alle Operatoren in  $R'_G$  lassen sich also durch Linearkombinationen von  $L_G$  approximieren. Interessant sind nun diejenigen Operatoren, die mit *beiden* Darstellungen vertauschen.  $[L_g, A] = 0$  bedeutet für  $f_A$  die Identität  $f_A(gh) = f_A(hg)$ . Man nennt ein  $f_A : G \rightarrow \mathbb{C}$  mit dieser

---

<sup>3</sup>Engl.: convolution

Eigenschaft auch eine **invariante Funktion**. Offenbar ist diese Bedingung äquivalent zu  $f(hgh^{-1}) = f(g)$ , das heißt  $f$  ist auf **Konjugationsklassen**  $[g] = \{hgh^{-1} | h \in G\}$  konstant. Wiederum äquivalent dazu ist, das  $f * g = g * f$  für alle  $g$ .

Andererseits ist ein Operator, der mit  $L_G$  und  $R_G$  vertauscht nach (12.13) eine Linearkombination der Projektoren  $P_\alpha$  auf die Summanden dieser Zerlegung. Suchen wir also eine Funktion  $f_\alpha$ , sodass  $f_\alpha * \Psi = P_\alpha \Psi$  ist. Es muss eine invariante Funktion sein, die mit  $U^{(\alpha)}$  assoziiert ist und da bieten sich die Funktionen

$$\chi_\alpha(g) = \text{tr } U_g^{(\alpha)} \quad (12.15)$$

an, die man den **Charakter** der Darstellung  $U^{(\alpha)}$  nennt. Die Spureigenschaft  $\text{tr } AB = \text{tr } BA$  sorgt gerade für die Invarianz dieser Funktion. Da wir die Charaktere als Faltungsoperatoren einsetzen wollen, ist die interessante Größe

$$(\chi_\alpha * \chi_\beta)(g) = \sum_{jk} \int dh \langle \alpha, j | U_g^{(\alpha)} U_{h^{-1}}^{(\alpha)} | \alpha, j \rangle \langle \beta, k | U_h^{(\beta)} | \beta, k \rangle . \quad (12.16)$$

Auch hier wird in der Mitte wieder ein Verkettungsoperator durch Integration (12.8) gebildet, den wir mit (12.9) auswerten können. Das ergibt Null für  $\alpha \neq \beta$  und  $d_\alpha^{-1} \chi_\alpha(g)$  sonst. Zusammenfassend also

$$\chi_\alpha * \chi_\beta = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{d_\alpha} \chi_\alpha . \quad (12.17)$$

Damit ist  $P_\alpha \Psi = d_\alpha \chi_\alpha * \psi = d_\alpha \int dg \chi_\alpha$  oder als Operatorgleichung  $P_\alpha = d_\alpha \int dg \chi_\alpha(g) L_g$ . Diese Form ist nun auch in einer beliebigen Darstellung  $U$  nützlich. Für jedes  $\alpha \in \text{Irrep}(G)$  definieren wir dann den Projektor

$$P_\alpha(U) = d_\alpha \int dg \chi_\alpha(g) U_g . \quad (12.18)$$

Dies ist dann wieder der Projektor auf die Summe aller irreduziblen Teildarstellungen von  $U$ , die isomorph zu  $U^{(\alpha)}$  sind. Da die entsprechende Gleichung für die Charaktere in  $\mathcal{L}^2(G)$  gilt, ist allgemein  $\sum_\alpha P_\alpha(U) = \mathbb{1}$ . Die Vielfachheit der Darstellung  $U^{(\alpha)}$  in  $U$  folgt dann aus  $\text{tr } P_\alpha(U) = n_\alpha(U) d_\alpha$ , also

$$n_\alpha(U) = \int dg \chi_\alpha(g) \text{tr } U_g . \quad (12.19)$$

Insbesondere gilt nur für irreduzible Darstellungen  $\int dg |\text{tr}(U_g)|^2 = 1$ .

Für die Darstellungen endlicher Gruppen, also Gruppen mit endlicher Anzahl  $\#G$  von Elementen, folgen ein paar nützliche Dimensionsbilanzen. Zunächst ist das Haarmaß hier  $\int dg f(g) = \frac{1}{\#G} \sum_g f(g)$  und  $\mathcal{L}^2(G)$  ist  $\#G$ -dimensional. Aus der Zerlegung (12.13) sehen wir

$$\#G = \sum_\alpha d_\alpha^2 . \quad (12.20)$$

Ferner ist die Anzahl  $K$  der Konjugationsklassen gleich der Dimension des Raumes invarianter Funktionen, in dem die Charaktere gerade eine Basis bilden. Also ist auch

$\#\text{Irrep}(G) = K$ . Wir können dann eine  $K \times K$ -Matrix aufstellen, die sogenannte **Charaktertafel**, deren Spalten gerade zu je einer Konjugationsklasse  $[g]$  gehören. Die Zeilen gehören zu den irreduziblen Darstellungen und der  $(\alpha, [g])$ -Eintrag ist  $\chi_\alpha(g)$ , was ja nur von der Klasse abhängen kann.

### 12.1.3 Projektive Darstellungen

Wir kommen jetzt auf die Tatsache zurück, dass die unitären Operatoren, die eine Symmetrie darstellen, nur bis auf einen Phasenfaktor definiert sind, dass wir also eigentlich die Darstellungsrelation

$$U_{g_1 g_2} = \zeta(g_1, g_2) U_{g_1} U_{g_2} \quad (12.21)$$

untersuchen müssen, mit einem zunächst unbestimmten Phasenfaktor  $\zeta : G \times G \rightarrow \mathbb{C}$ . Es gibt nun einen einfachen Trick, um doch wieder auf eine “normale” Gruppendarstellung zurückzukommen. Dazu nehmen wir einen willkürlichen Phasenfaktor zur Gruppe hinzu, betrachten also für eine Darstellung die Gruppe der unitären Operatoren  $\lambda U_g$ , wobei die Gruppenelemente nun parametrisiert sind durch Paare  $(\lambda, g)$ , mit einer Multiplikationsregel, die von der Funktion  $\zeta$  abhängt, also  $(\lambda, g)(\lambda', g') = (\lambda\lambda'\zeta(g, g')^{-1}, gg')$ . Nennen wir die so entstandene Gruppe  $\hat{G}$ . Dann gibt es offenbar eine homomorphe Projektion  $\eta : \hat{G} \rightarrow G$ . Deren Kern besteht gerade aus den Phasen  $(\lambda, e)$ , also sämtlich aus Elementen, die mit ganz  $\hat{G}$  vertauschen. Deshalb nennt man  $\hat{G}$  eine **zentrale Erweiterung** von  $G$  um die Phasengruppe. Für eine irreduzible Darstellung von  $\hat{G}$  werden die Phasen dann automatisch auf Vielfache der Eins abgebildet. Solche Darstellungen sind also in bijektiver Korrespondenz zu den irreduziblen Strahldarstellungen von  $G$  mit Faktor  $\zeta$ .

Wenn man den Faktor trivial abändert, also etwa  $U'(g) \mapsto \lambda(g)U(g)$  setzt mit  $|\lambda(g)| = 1$ , ändern sich die Phasen in

$$\zeta'(g_1, g_2) \mapsto \zeta(g_1, g_2) \frac{\lambda(g_1)\lambda(g_2)}{\lambda(g_1 g_2)}. \quad (12.22)$$

Die entsprechend umgeschriebene Gruppe  $\hat{G}'$  ist offenbar isomorph zu  $\hat{G}$  und auch die Darstellungen lassen sich jeweils trivial umrechnen. Wenn wir also Strahldarstellungen von  $G$  suchen, reicht es, die möglichen Faktoren bis auf Äquivalenz  $\zeta \simeq \zeta'$  zu untersuchen. Wir können also alle Vereinfachungen benutzen, die man durch geeignete Wahl von  $\lambda(g)$  erreichen kann.

Dazu gehört zunächst die Ausnutzung der Stetigkeit. Offenbar kann man durch Wahl eines unstetigen Faktors  $\lambda(g)$  die Stetigkeit der Funktion  $g \mapsto U'(g)$  zerstören. Wir müssen also zuerst die passende Stetigkeitsaussage für projektive Darstellungen klären. Nun haben wir projektive Darstellungen ja nur betrachtet, weil sie bei der Untersuchung von Automorphismen des Zustandsraums gebraucht werden. Dementsprechend sollte die richtige Stetigkeitsforderung sich direkt auf messbare Größen beziehen. Wir fordern also von einer “stetigen projektiven Darstellung”:

$$g \mapsto \text{tr}(T_g(\rho)A) \quad \text{ist stetig} \quad (12.23)$$



für alle Spurklasseoperatoren  $\rho$  und beschränkten Operatoren  $A$ . Daraus folgt (mit  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$  und  $A = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ ) die Stetigkeit aller Funktionen  $g \mapsto |\langle\varphi, U_g\psi\rangle|^2$ . Wir wählen also einen beliebigen Einheitsvektor  $\varphi \in \mathcal{H}$  für den es also eine Nachbarschaft  $N \in \mathcal{N}$  gibt, auf der  $\langle\varphi, U(g)\varphi\rangle \neq 0$ . Dort setzen wir  $\lambda(g) = |\langle\varphi, U(g)\varphi\rangle|/\langle\varphi, U(g)\varphi\rangle$ , sodass  $\langle\varphi, U_g\psi\rangle > 0$ . Betrachten wir dann für beliebige Vektoren den Ausdruck

$$\langle\psi_1, U(g)\psi_2\rangle\langle\varphi, U(g)^*\varphi\rangle.$$

Er ist ein Matrixelement der stetigen Funktion  $T_g(|\psi_2\rangle\langle\varphi|)$ , ist also stetig. Da wir den zweiten Faktor durch Phasenwahl stetig gemacht haben, muss es also auch der erste Faktor sein. Das heißt: In der Nähe der Eins können wir die Faktoren so wählen, dass  $g \mapsto U_g$  und damit der Faktor  $\zeta$  stetig wird. Wir können eine stetige Phasenwahl in der Nähe der Eins durch Multiplikation auch an andere Punkte transportieren und man kann leicht sehen das daraus ein Atlas von  $\widehat{G}$  mit stetigen Kartenwechseln wird. Dabei ist die Dimension des kartierenden  $\mathbb{R}^n$  gerade um 1 größer als für  $G$ .

Von der Stetigkeit müssen wir nun zur Differenzierbarkeit kommen. Die Turbo-Version dieses Arguments [Kir76, §14.3] ist die Berufung auf den Satz von Gleason-Montgomery-Zippin. Danach ist  $\widehat{G}$  bereits eine Lie-Gruppe, das heißt es gibt einen geglätteten Atlas mit differenzierbaren Kartenwechseln. Elementarer [Bar54] glättet man zuerst die Faktoren entlang einparametriger Untergruppen. Damit liegt jeder Erzeuger bis auf ein Vielfaches der  $\mathbb{1}$  fest und muss dann noch die Differenzierbarkeit zwischen diesen einparametrigen Gruppen herstellen. Die Details übergehen wir. Damit wird die Analyse der möglichen Faktoren in der Nähe der Eins vollständig in die Bemerkung zusammengefasst, dass wir nun nicht mehr nur eine zentrale Erweiterung der Gruppe  $G$  suchen, sondern eine zentrale Erweiterung, die selbst eine *Lie-Gruppe* ist. Dies ist wiederum zu erledigen durch die Erweiterung der Lie-Algebra  $\mathfrak{g}$  um einen weiteren, zentralen Unterraum  $\mathbb{R}\mathbb{1}$ . Die Notation für das zusätzliche Element  $\mathbb{1}$  wurde gewählt, weil es bei einer irreduziblen Darstellung der Lie-Algebra tatsächlich anzeigt, welche Vielfachen des Operators  $\mathbb{1}$  zu den Erzeugern hinzukommen. Wir suchen also eine Lie-Algebra  $\widehat{\mathfrak{g}} = \mathfrak{g} \oplus \mathbb{R}\mathbb{1}$ .

Weil  $\mathbb{1}$  ein zentrales Element ist, gilt in der Erweiterung  $[\xi, \mathbb{1}] = 0$ . Außerdem, muss, wenn alle Vielfachen  $\lambda\mathbb{1}$  Null gesetzt werden, wieder die alte Lie-Algebra herauskommen. Das Einzige, was also bleibt ist die Wahl einer antisymmetrischen Bilinearform  $f : \mathfrak{g} \times \mathfrak{g} \rightarrow \mathbb{R}$ , sodass in der zentralen Erweiterung  $\widehat{\mathfrak{g}} = \mathfrak{g} \oplus \mathbb{R}\mathbb{1}$  gilt:

$$[\xi_1 + \lambda_1\mathbb{1}, \xi_2 + \lambda_2\mathbb{1}] = [\xi_1, \xi_2] + f(\xi_1, \xi_2)\mathbb{1}. \quad (12.24)$$

Damit dies wieder eine Lie-Algebra wird, muss die Jacobi-Identität gelten. Dies ist äquivalent zum Verschwinden der vollständig antisymmetrischen [Ü!] trilinearen Form

$$df(\xi_1, \xi_2, \xi_3) := f([\xi_1, \xi_2], \xi_3) + f([\xi_2, \xi_3], \xi_1) + f([\xi_3, \xi_1], \xi_2). \quad (12.25)$$

Eine triviale Veränderung des Faktors ist eine “Nullpunktverschiebung”  $\xi \mapsto \xi + g(\xi)\mathbb{1}$  der Erzeuger, mit einem linearen Funktional  $g : \mathfrak{g} \rightarrow \mathbb{R}$ . Auch dies führt in (12.24) zu einer Funktion  $f$ , nämlich

$$f(\xi_1, \xi_2) = -dg(\xi_1, \xi_2) = -g([\xi_1, \xi_2]). \quad (12.26)$$

Der Quotientenraum aller bilinearen Funktionen  $f$  mit  $df = 0$  modulo Funktionen der Form  $f = dg$ , meist geschrieben als  $H^2(\mathfrak{g}, \mathbb{R})$  und als zweidimensionaler Kohomologie-Raum von  $\mathfrak{g}$  bezeichnet, klassifiziert also nun die möglichen infinitesimalen Faktoren.

Zwei extreme Spezialfälle sind für uns von Interesse: Zum einen, wenn  $G$  eine abelsche Gruppe ist, dann ist  $[\xi_1, \xi_2] = 0$  für alle  $\xi_1, \xi_2 \in \mathfrak{g}$ , daher ist für beliebige  $f, g$  auch  $dg = 0$  und  $df = 0$ . Daher besteht  $H^2$  einfach aus allen antisymmetrischen Bilinearformen auf  $\mathfrak{g}$ .

Der andere Spezialfall sind die sogenannten **halbeinfachen** Lie-Algebren. Dies bedeutet, dass es keinen echten Unterraum  $\mathfrak{h} \subset \mathfrak{g}$  gibt, sodass  $[\mathfrak{g}, \mathfrak{h}] \subset \mathfrak{h}$  und  $[\mathfrak{h}, \mathfrak{h}] = 0$ . Für solche Lie-Algebren ist  $H^2(\mathfrak{g}, \mathbb{R}) = 0$ , das heißt: Lokal kann der Faktor  $\zeta$  trivial gewählt werden.

Damit kommen wir zu folgendem Verfahren für die Aufgabe: “Finde alle irreduziblen projektiven Darstellung der zusammenhängenden Lie-Gruppe  $G$ ”: [►Discuss discrete symmetries?]

1. Berechne  $H^2(\mathfrak{g}, \mathbb{R})$  für die Lie algebra  $\mathfrak{g}$  der Gruppe.
2. Zu jedem lokalen Faktor  $f \in H^2(\mathfrak{g}, \mathbb{R})$ , betrachte nun die erweiterte Lie-Algebra  $\tilde{\mathfrak{g}} = \mathfrak{g} \oplus \mathbb{R}1$ , und die dazu gehörige einfach zusammenhängende Lie-Gruppe  $\tilde{G}$ .
3. Bestimme die irreduziblen Darstellungen von  $\tilde{G}$ , bzw, der erweiterten Lie-Algebra.

Dies sind dann schon die gesuchten Darstellungen, denn wegen der Irreduzibilität wird ja das zentrale Element  $1 \in \tilde{\mathfrak{g}}$  durch ein Vielfaches der Eins dargestellt. Bis auf gerade diese Faktoren erhalten wir also eine projektive Darstellung der Überlagerungsgruppe. Von einer solchen Darstellung wiederum hatten wir gesehen, dass es ebenfalls

## 12.2 Kovariante Observable: der projektionswertige Fall

Wir betrachten Observable deren Messwerte in einem Raum  $X$  liegen, auf dem eine Gruppe  $G$  wirkt. Allgemein ist eine **Gruppenwirkung** eine Abbildung  $G \times X \rightarrow X$ , die einem Paar  $(g, x)$  ein  $gx$  geschriebenes Element zuordnet, sodass  $g_1(g_2x) = (g_1g_2)x$  und  $ex = x$ , wobei  $e \in G$  das neutrale Element ist. Wenn nun eine unitäre (möglicherweise projektive) Darstellung  $U : G \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$  auf einem Hilbertraum gegeben ist, können wir nach Observablen  $F$  auf  $X$  fragen, sodass für alle  $g \in G$

$$U_g F(A) U_g^* = F(gA) , \quad (12.27)$$

wobei  $A \subset X$  eine beliebige messbare Menge und  $gA = \{gx \mid x \in A\}$ . Nehmen wir zum Beispiel für  $X$  den Ortsraum und für  $G$  die Gruppe der Verschiebungen. Dann

drückt diese Bedingung aus, dass eine Verschiebung der Präparation mit einer solchen Transformation (oder die inverse Verschiebung des Messapparats) einfach eine entsprechende Verschiebung der gemessenen Verteilung bewirkt. Die normale Ortsobservable, die wir schon viel verwendet haben, erfüllt diese Bedingung natürlich. Die Frage, die wir uns in diesem Abschnitt stellen, ist, inwieweit diese Observable schon durch die Transformationsbedingung (12.27) bestimmt ist.

Wir wollen in diesem Abschnitt zwei vereinfachende Annahmen machen. Erstens betrachten wir hier nur Fälle, in denen der Raum aus einem einzigen Orbit der Gruppenwirkung besteht, das heißt, dass zu je zwei Punkten  $x, y \in X$  eine Transformation  $g \in G$  existiert, sodass  $y = gx$ . Damit sind alle Punkte “bis auf eine Gruppenoperation äquivalent” und man spricht von einem **homogenen Raum**. Wir können dann einen “Ursprung”  $\bar{x} \in X$  wählen und das Gruppenelement  $g$  selbst als Koordinate für den Punkt  $g\bar{x}$  verwenden. Dies ist allerdings vieldeutig, den schon der Ursprung  $\bar{x}$  hätte schon als mögliche Koordinaten alle Elemente der **Standuntergruppe**

$$H = \{h \in G \mid h\bar{x} = \bar{x}\} . \quad (12.28)$$

Dies ist aber auch die einzige Vieldeutigkeit, den  $g_1x = g_2x$  impliziert ja  $g_1^{-1}g_2 \in H$ . Wir können das auch schreiben als  $g_1H = g_2H$ . Das heißt, die Punkte von  $X$  entsprechen genau den Rechtsnebenklassen von  $H \subset G$ , was wir auch als  $X = G/H$  schreiben. Natürlich war die Wahl des Ursprungs willkürlich. Hätten wir statt dessen den Punkt  $g\bar{x}$  ausgewählt, hätten wir als Standuntergruppe die zu  $H$  konjugierte Gruppe  $gHg^{-1}$  erhalten.

Die zweite Vereinfachung, die wir in diesem Abschnitt machen wollen, ist, dass  $F$  projektionswertig ist, also dass jeder Operator  $F(A)$  ein Projektor ist. Dann vertauschen alle  $F(A)$  und wir können sie gemeinsam diagonalisieren. Das heißt, wir können einen Integrationsraum finden, in dem sie alle zu Multiplikationsoperatoren werden. Wir drücken dies aus, in dem wir den Hilbertraum als  $\mathcal{H} = \int^{\oplus} dx \mathcal{H}_x$  schreiben, was bedeutet, dass Wellenfunktionen  $\psi \in \mathcal{H}$  Funktionen auf  $X$  sind, mit Funktionswerten  $\psi(x) \in \mathcal{H}_x$  und dem Skalarprodukt

$$\langle \varphi, \psi \rangle = \int dx \langle \varphi(x), \psi(x) \rangle_{\mathcal{H}_x} . \quad (12.29)$$

Dabei ist “ $dx$ ” ein Maß auf  $X$ , dass im einfachsten Fall invariant gewählt werden kann. Das heißt  $\int dx f(g^{-1}x) = \int dx f(x)$  für beliebige Funktionen  $f$  und  $g \in G$ . Es reicht aber auch ein “**quasi-invariantes Maß**” für das bei der Substitution  $x \mapsto gx$  eine Funktionaldeterminante auftritt, also eine messbare Funktion von  $x$ , notiert als  $dgx/dx$ , sodass  $\int dx f(x) = \int dx (dgx/dx) f(gx)$ . Die allgemeinen Bedingungen für die Existenz eines solchen Maßes, sowie die genauen Messbarkeitsvoraussetzungen an  $\psi$  übergehen wir hier.

Die Observable besteht nun aus Multiplikationsoperatoren, nämlich  $(F(A)\psi)(x) = \chi_A(x)\psi(x)$ . Aus der Kovarianzbedingung folgt ferner eine Einschränkung an die Darstellung  $U$ : Wenn  $\psi$  nur nahe bei einem Punkt  $x$  von Null verschieden ist, also  $F(B_x)\psi =$

$\psi$  für eine kleine Kugel  $B_x$  um  $x$ , dann gilt nach (12.27)  $F(gB_x)U_g\psi = U_g\psi$ , das heißt,  $U_g\psi$  ist nur in der Nähe von  $gx$  von Null verschieden und  $(U_g\psi)(gx)$  hängt nur von  $\psi(x)$  ab. Dies erzwingt folgende Form für die Darstellung  $U$ :

$$(U_g\psi)(x) = \sqrt{\frac{dg^{-1}x}{dx}} \mathcal{D}(g, x)\psi(g^{-1}x) , \quad (12.30)$$

wobei  $\mathcal{D}(g, x) : \mathcal{H}_{g^{-1}x} \rightarrow \mathcal{H}_x$  ein unitärer Operator ist. Diese Bedingung garantiert dann gerade die Unitarität von  $U_g$ . Die unitären Operatoren müssen noch eine Bedingung erfüllen, um weiterhin die Darstellungsrelation der  $U_g$  zu garantieren:

$$\mathcal{D}(g_1g_2, x) = \mathcal{D}(g_1, x)\mathcal{D}(g_2, g_1^{-1}x) . \quad (12.31)$$

Diese Relation kann man in zwei Schritten vollständig lösen. Der erste Schritt ist die Betrachtung dieser Relation für  $x = \bar{x}$  und  $g_1, g_2 \in H$ . Dann ist (12.31) einfach die Darstellungsrelation für die Standuntergruppe  $H$ . Wir halten also fest, dass  $V_h = \mathcal{D}(h, \bar{x})$  eine unitäre Darstellung von  $H$  ist. Als nächstes wählen wir irgend eine Koordinatisierung von  $X$  durch  $G$ , also eine Abbildung  $\gamma : X \rightarrow G$ , sodass  $\gamma(x)\bar{x} = x$ . (Hier gibt es in manchen Fällen technische Probleme, denn wir möchten, dass diese Abbildung zumindest messbar ist. In den betrachteten Spezialfällen ist das aber einfach zu bewerkstelligen). Damit verbunden gibt es also nun ein System von unitären Operatoren  $T_x = \mathcal{D}(\gamma(x), x) : \mathcal{H}_{\bar{x}} \rightarrow \mathcal{H}_x$ , die dazu dienen, die Räume  $\mathcal{H}_x$  mit dem Raum  $\mathcal{H}_{\bar{x}}$  zu identifizieren. Mit der Relation (12.31) können wir dann alle  $\mathcal{D}(g, x)$  durch die Transferoperatoren  $T_x$  und die Darstellung  $V_h$  ausdrücken. Die Details sind fummelig, aber geradlinig durchzurechnen. Wir können die  $T_x$  noch loswerden, indem wir statt  $\mathcal{H}_x$  direkt  $\mathcal{H}_{\bar{x}}$  verwenden. Wir erhalten dann eine zu  $U_g$  unitär äquivalente Darstellung, bei der außerdem  $F$  nicht verändert wird. Damit bleibt als einzige relevante Information die Darstellung der Untergruppe  $H$  zu wählen. Sowohl  $F$  als auch  $U$  sind damit dadurch (bis auf unitäre Isomorphie) eindeutig bestimmt. Man nennt  $U$  die durch  $V$  **induzierte Darstellung**. Mackey, der diese in der Algebra schon lange (seit Frobenius und Schur) gängige Konstruktion auf den Fall lokal kompakter Gruppen verallgemeinert hat, nannte das Paar  $(U, F)$  ein **System der Imprimitivität**.

Wir haben also eine vollständige Klassifikation der kovarianten projektionswertigen Observablen erreicht und es wird Zeit sich einige Beispiele anzusehen. Betrachten wir zunächst  $X = \mathbb{R}^n$  und  $G = \mathbb{R}^n$  die darauf wirkende Translationsgruppe. Dann ist offenbar  $H = \{0\}$  und die Darstellung  $V$  trivial. Wir bekommen also  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n; \mathcal{H}_0)$ , dem Raum der  $\mathcal{H}_0$ -wertigen Funktionen. Dabei haben wir schon alle "Fasern"  $\mathcal{H}_x$  des Direktintegrals miteinander identifiziert, wie die obige Konstruktion es verlangt. Die Darstellung  $U$  wirkt also durch Translation nur im ersten Faktor:  $U_y\psi(x) = \psi(x - y)$ .  $F$  ist die Ortsobservable. Aus den Erzeugern der Translationen erhalten wir wieder die Impulsoperatoren und damit die kanonischen Vertauschungsrelationen.

Wir können dies etwas verfeinern, indem wir Kovarianz nicht nur bezüglich der Translationen, sondern auch bezüglich der Drehungen verlangen. Dann ist  $G$  die Euklidische Gruppe und wenn wir als Referenzpunkt wieder  $\bar{x} = 0$  wählen, besteht  $H$

genau aus den Drehungen. Wir müssen also nur eine Darstellung der Drehgruppe angeben. Dann wirken  $F$  und die Translationen wie vorher und die Drehungen durch  $(U_R\psi)(x) = V_R\psi(R^{-1}x)$ . Wenn wir hier eine irreduzible Darstellung mit Spin  $j$  wählen erhalten wir also die Beschreibung von Ort, Impuls und Drehungen für Teilchen mit Spin  $j$  gratis.

Die Irreduzibilität der Darstellung  $V$  ist übrigens äquivalent zur Irreduzibilität des Systems  $(F, U)$ : Sei  $Z \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  ein Operator, der mit allen  $F(A)$  und  $U_g$  vertauscht. Aus der ersten Bedingung folgt, dass  $Z$  faserweise wirkt, das heißt  $(Z\psi)(x) = Z_x\psi(x)$  mit Operatoren  $Z(x) \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_x)$ . Aus der Vertauschung mit  $U_g$  folgt wie man  $Z(g\bar{x})$  aus  $Z(\bar{x})$  berechnen kann, sodass  $Z(\bar{x})$  den ganzen Operator  $Z$  bestimmt. Schließlich muss  $Z(\bar{x})$  mit  $V_H$  vertauschen. Wenn also  $V_H$  irreduzibel ist, bleibt auch für  $Z$  nur ein Vielfaches der  $\mathbb{1}$ .

Das Beispiel des Spins legt auch nahe, dass das Konzept der induzierten Darstellungen auch auf projektive Darstellungen erweiterbar ist (wir wollen ja schließlich auch Teilchen mit halbzahligem Spin betrachten). Diese Erweiterung ist gradlinig möglich und wir verzichten hier auf die Details.

Aus der hier vorgestellten Theorie ergeben sich aber auch negative Beispiele, also Beispiele in denen eine projektionswertige kovariante Observable *nicht* existiert. Ein prominentes Beispiel ist die Ankunftszeitmessung. Hier wäre also  $X = \mathbb{R}$  die Zeitachse und  $U_t$  die Zeit-Translation. Wenn es eine projektionswertige Zeitobservable gäbe, müsste das Spektrum des Erzeugers der entsprechenden Verschiebung das Spektrum des Standard-Impulsoperators sein, also rein kontinuierlich und ganz  $\mathbb{R}$ . Das ist aber bei fast keinem physikalisch interessanten Hamiltonoperator der Fall: Die meisten sind nach unten beschränkt und haben auch diskrete Eigenwerte und Lücken im Spektrum. Dieses Argument stammt von Pauli, in einer Fußnote des Handbuchartikels von 19xx und hat die Suche nach Zeitobservablen nachhaltig behindert. Wie wir sehen werden ist das Problem eben nicht die Idee der Ankunftszeitmessung sondern die Bedingung der Projektionswertigkeit.

Für spätere Zwecke führen wir noch eine elegantere Konstruktion der induzierten Darstellung an, die auf die hässlichen Koordinatisierungsabbildungen  $\gamma : X \rightarrow G$  verzichtet. In der Tat ist an denen hässlich, dass sie die natürliche Symmetrie des Problems zerstören. Die elegante Variante geht ebenfalls von einer unitären Darstellung  $V : H \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{K})$  aus. Wellenfunktionen der induzierten Darstellung werden als Funktionen  $\psi : G \rightarrow \mathcal{K}$  aufgefasst, die einer zusätzlichen, der sogenannten **Äquivarianzbedingung** genügen:

$$V_h\psi(gh) = \psi(g) . \quad (12.32)$$

Man sieht den Zusammenhang mit der vorherigen Konstruktion: Wenn  $\psi(g)$  für ein  $g$  mit  $g\bar{x} = x$  bekannt ist, dann mit der Äquivarianz auch für alle  $g$  mit dieser Eigenschaft. Es würde also ausreichen  $\psi(\gamma(x))$  anzugeben. In der neuen Konstruktion wird eine solche Vertreterwahl nicht gebraucht. Die Äquivarianz und die Unitarität von  $V$  sorgen dafür, dass die Skalarprodukte  $\langle \psi(g), \varphi(g) \rangle$  von  $g$  nur über  $x = g\bar{x}$  abhängen. Wir können das Skalarprodukt wieder durch ein Integral über  $X$  definieren. Multipli-

kation mit Funktionen von  $F(g\bar{x})$  zerstört die Äquivarianz nicht, was die Observable  $F$  problemlos definierbar macht. Die Darstellung  $U$  schließlich ist bis auf geeignete Funktionaldeterminanten  $(U_g\psi)(g') = \psi(g^{-1}g')$ , was ebenfalls äquivariante in äquivariante Funktionen abbildet.

## 12.3 Charakterisierung von Teilchen

Die Theorie der induzierten Darstellungen ist auch ein wichtiges Hilfsmittel der Darstellungstheorie. Wir verwenden dies hier zur Charakterisierung der raumzeitlichen Freiheitsgrade relativistischer und nicht-relativistischer Teilchen. Die Symmetrie ist durch die entsprechende Raumzeit-Symmetriegruppe gegeben, also Galilei oder Poincaré-Gruppe. Der “elementare” Charakter des Teilchens wird dadurch ausgedrückt durch die Forderung dass die Darstellung der Symmetriegruppe irreduzibel sein soll. Etwas überzogen ausgedrückt: Ein Elementarteilchen “ist” eine irreduzible Darstellung der Galilei/Poincaré-Gruppe. Jedenfalls bekommen wir aus dieser Idee zwei wesentliche Parameter: Masse und Spin, bzw. für masselose relativistische Teilchen die Helizität als Spin-Ersatz.

### 12.3.1 Darstellung affiner Gruppen

Eine allgemeine Technik gibt es für die Darstellungen die einen Translationsanteil haben, sagen wir  $\mathbb{R}^n$  und eine Untergruppe von Linearen Transformationen, die also auf einem Raum wie  $x \mapsto Ax + a$  wirken, wobei die Matrix  $A$  und der Vektor  $a$  zusammen das Gruppenelement  $(A, a)$  charakterisieren. Die Translationsuntergruppe  $T$  ist dann ein abelscher Normalteiler und die gesamte Gruppe ein sogenanntes semidirektes Produkt  $G = T \rtimes G_0$ , wobei  $G_0$  der homogene Teil, also die Gruppe der Matrizen  $A$  ist.

Wir beginnen mit der Darstellung der Translationen  $T \cong \mathbb{R}^n$ . Da dies eine abelsche Gruppe ist, sind die Darsteller vertauschbare normale Operatoren, die wir gemeinsam diagonalisieren können. Dies führt zu einem Spektralmaß, nennen wir es  $F$ , auf dem Impulsraum, d.h., wir können die Translationen schreiben als

$$T_a = \int F(dp) e^{ip \cdot a}, \quad (12.33)$$

wobei im Exponenten das Skalarprodukt zwischen Verschiebung  $a$  und dem Impulsvektor  $p$  auftaucht. Etwas abstrakter ist dies die kanonische Bilinear form zwischen dem Verschiebungsraum und seinem Dualraum, eben dem Impulsraum. Als nächstes betrachten wir die Darsteller  $U_A$  der homogenen Transformationen. Wegen  $(A, 0)(\mathbb{1}, a)(A, 0)^{-1} = (\mathbb{1}, Aa)$  gilt  $U_A T_a U_A^* = T_{Aa}$ . Wir können dies direkt als Transformationseigenschaft von  $F$  formulieren:

$$U_A F(M) U_A^* = F((A^T)^{-1} M). \quad (12.34)$$

Hier ist  $\hat{A} = (A^T)^{-1}$  die Darstellung von  $G_0$  auf dem Impulsraum. Da Transposition und Inversion beide die Reihenfolge umkehren gilt wieder  $\widehat{A_1 A_2} = \widehat{A_1} \widehat{A_2}$ . Dies ist aber gerade wieder die Kovarianzbedingung (12.27) und da  $F$  das Spektralmaß einer Gruppe ist, haben wir eine projektionswertige kovariante Observable zu konstruieren [4.43]. Die dort noch gemachte Voraussetzung, nämlich dass der Parameterraum  $X$  ein homogener Raum ist, ist hier zunächst noch nicht erfüllt: Die Darsteller  $\hat{A}$  bilden nicht unbedingt je zwei Elemente ineinander ab: Es gibt im Allgemeinen mehrere Orbits  $\{\hat{A}p \mid A \in G_0\}$ . Andererseits suchen wir ja irreduzible Darstellungen und dies führt dazu, dass doch nur ein Orbit vorkommen kann: Betrachten wir dazu eine Funktion  $f$  angeben, die auf Orbits konstant ist, also  $f(\hat{A}p) = f(p)$ . Dann vertauscht der Operator  $\int F(dp)f(p)$  mit der Gruppendarstellung, muss also ein Vielfaches der  $\mathbb{1}$  sein. Dies widerspricht der Möglichkeit, dass  $F$  auf zwei verschiedenen Orbits von Null verschieden ist, denn eine invariante Funktion  $f$  die auf diesen Orbits verschiedene Werte annimmt würde einen von  $\lambda \mathbb{1}$  verschiedenen Operator ergeben. Wir können also annehmen, dass  $F$  nur auf einem einzigen Orbit konzentriert ist. Wählen wir also einen Referenzpunkt  $\bar{p}$  auf diesem Orbit und bestimmen wir die Standuntergruppe  $H$ , die in diesem Kontext auch gern die **kleine Gruppe** genannt wird. Wir brauchen nun noch eine Darstellung von  $H$  und dies liefert  $U_A$  als induzierte Darstellung. Wir hatten auch schon gesehen, dass das Paar  $(F, U)$  und damit die Darstellung der gesamten Gruppe  $G$  gerade dann irreduzibel wird, wenn die gewählte Darstellung der kleinen Gruppe irreduzibel ist. Damit ist das Rezept zum Auffinden aller irreduziblen Darstellungen von  $G$  komplett:

- Finde die Orbits der Darstellung  $A \mapsto \hat{A}$  von  $G_0$  auf dem Impulsraum.
- Wähle zu jedem Orbit einen Ursprung  $\bar{p}$  und bestimme die kleine Gruppe  $H$ .
- Wähle eine irreduzible Darstellung von  $H$ .
- Bilde die Darstellung von  $G_0$  als induzierte Darstellung.

Bevor wir an den uns hauptsächlich interessierenden Fall, die Poincaré-Gruppe gehen, illustrieren wir dies noch mit einigen einfachen Beispielen.

*Beispiel: Die Darstellungen der  $ax+b$ -Gruppe.*

Dies ist die Gruppe aller Transformationen  $x \in \mathbb{R} \mapsto ax + b$ , wobei  $b \in \mathbb{R}$  und  $a \neq 0$ . Etwas vornehmer:  $G$  ist die Gruppe der affinen Transformationen in einer Dimension. Auch im Impulsraum wirken die Streckungen (bzw. Spiegelungen) ebenso wie im Ortsraum durch Multiplikation mit  $a$ . Es gibt also zwei Orbits:  $p = 0$  und  $p \neq 0$  mit Ursprung  $\bar{p} = 1$ . Im ersten Fall werden die Translationen trivial dargestellt und die kleine Gruppe ist die homogene Gruppe selbst. Die ist aber abelsch und hat nur eindimensionale irreduzible Darstellungen. Insgesamt kommen wir also auf  $U_{(a,b)} = \text{sign}(a)^s \exp(ir \log |a|) \mathbb{1}$ , mit  $s = 0, 1$  und  $r \in \mathbb{R}$ . Im zweiten Fall haben wir genau einen Orbit und die kleine Gruppe ist trivial. Also gibt es von diesem Typ genau eine irreduzible Darstellung. Der Darstellungsraum ist  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dp)$  mit  $(U_{(a,b)}\psi)(p) = \exp(ipa)\psi(p)$ . Wenn man die Spiegelungen nicht mitnimmt (also

	Ursprung	$p_\mu p^\mu$	$\text{sign } p_0$	H	
0	$(0, 0, 0, 0)$	0		$\text{SL}(2, \mathbb{C})$	
1	$(m, 0, 0, 0)$	$m^2$	+1	$\text{SU}(2)$	
2	$(1, 0, 0, 1)$	0	+1	$\text{E}(2)$	
3	$(0, 0, 0, w)$	$-w^2$		$\text{SL}(2, \mathbb{R})$	
4	$(-m, 0, 0, 0)$	$m^2$	-1	$\text{SU}(2)$	
5	$(-1, 0, 0, 1)$	0	-1	$\text{E}(2)$	

**Tabelle 12.1:** Orbits für die Darstellung der Poincaré-Gruppe. Das Diagramm zeigt jeweils den Schnitt mit der 0 – 3-Ebene.

$a > 0$  fordert), gibt es zwei Darstellungen, mit  $p > 0$  und  $p < 0$ , entsprechend den beiden Orbits.  $\diamond$

Beispiel: *Die Darstellungen der Euklidischen Gruppe in  $\mathbb{R}^3$ .*

Wieder gibt es den Orbit  $p = 0$ , für den einfach eine Darstellung der Drehungen über bleibt. Ansonsten wählen wir  $\bar{p} = (0, 0, R)$ . Die kleine Gruppe besteht also aus den Drehungen um die 3-Achse.  $\diamond$

### 12.3.2 Darstellungen der Poincaré-Gruppe

Wir betrachten hier nur die Zusammenhangskomponente der Eins dieser Gruppe, lassen also erst einmal Raumspiegelungen und Zeitspiegelung außer Betracht. Da die Poincaré-Gruppe halbeinfach ist, ist  $H^2(G) = \{0\}$  und die Analyse der lokalen Faktoren trivial. Um alle irreduziblen projektiven Darstellungen zu bekommen, brauchen wir also nur die Darstellungen der Überlagerungsgruppe zu bilden. Dies ist das semidirekte Produkt  $\mathbb{R}^4 \rtimes \text{SL}(2, \mathbb{C})$ , wobei  $\text{SL}(2, \mathbb{C})$  die Gruppe der komplexen  $2 \times 2$ -Matrizen mit Determinante 1 ist. Die Wirkung der homogenen Transformationen auf die Translationen ist gegeben durch  $X \mapsto UXU^*$ , wobei wir  $x = (x_0, x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^4$  mit der hermiteschen  $2 \times 2$ -Matrix  $\sum_{\mu=0}^3 x_\mu \sigma_\mu$  identifizieren. Die zweifache Überlagerung der Poincaré-Gruppe besteht also hier darin, dass die Elemente  $(a, U)$  und  $(a, -U)$  die gleiche Raumzeit-Transformation darstellen. Der gleiche Übergang zur zweifachen Überlagerung geschieht natürlich auch im Impulsraum, den wir analog auch durch die hermiteschen  $2 \times 2$ -Matrizen darstellen. Damit können wir die Liste der Orbits zusammenstellen:

Die Berechnung der kleinen Gruppe  $H$  im Fall 2 erfordert eine kleine Überlegung.



der lichtartige Referenzvektor entspricht der Matrix  $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ , also dem Projektor auf den ersten Basisvektor  $e_1$ . Wir suchen Matrizen  $S$  mit Determinante 1, sodass

$$S^* \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (12.35)$$

also insbesondere  $S^*e_1 = e_1/\langle e_1, Se_1 \rangle$  und  $\langle e_1, Se_2 \rangle = 0$ . Dies beschreibt gerade die Matrizen der Form

$$S = \begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 \\ z & e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \quad (12.36)$$

mit  $\varphi \in \mathbb{R}$  und  $z \in \mathbb{C}$ . Die Gruppe enthält also die zweidimensionale Translationsgruppe  $\mathbb{C} \equiv \mathbb{R}^2$  und die darauf wirkenden Drehungen, sodass  $H \cong \mathbb{R}^2 \rtimes U(1) = E(2)$  die Euklidische Gruppe in zwei Dimensionen ist.

Im Fall 3 sieht man leicht, dass  $H$  von den Drehungen um die 3-Achse und den Schüben in 1 und 2-Richtung erzeugt ist. Dies ist also gerade die Lorentz-Gruppe für die räumlichen Richtungen 1,2. Als Matrix-Gruppe ist es leichter, die 2-Richtung als invariant zu nehmen. Da  $\sigma_2$  als einzige Pauli-Matrix ein  $i$  enthält, ist die Lorentzgruppe der Richtungen 0,1,3 gerade gegeben, indem man alle Matrizen reell wählt. Wir erhalten also  $H \cong \text{SL}(2, \mathbb{R})$ .

Physikalisch werden hier nur die Fälle 1 und 2 zur Beschreibung von Teilchen verwendet. Warum wirft man die anderen weg? Bei Fall 0 ist das einfach: Ein Teilchen, bei dem raumzeitliche Translationen gar keinen Unterschied machen, verdient den Namen nicht. Ein gemeinsamer Grund bei den übrigen Fällen ist die Positivität der Energie. Für ein isoliertes Teilchen macht das Vorzeichen der Energie keinen wesentlichen Unterschied. Durch eine globale Komplexkonjugation kann man die Fälle  $1 \leftrightarrow 4$  und  $2 \leftrightarrow 5$  ineinander überführen. Einen Unterschied macht es erst, wenn ich Teilchen mit positiver Energie mit Teilchen negativer Energie in Wechselwirkung bringe: Dann könnten die beiden sich gegenseitig trotz Energieerhaltung beschleunigen. Man verlangt deshalb als ein zentrales Axiom der Quantenfeldtheorie die Positivität der Energie. Soweit die Teilchendarstellung als Einteilchen-Sektor einer solchen Theorie auffassbar sein soll, muss auch hier die Energie positiv sein. Dies ist nun genau für die Fälle 0, 1 und 2 erfüllt. Eine Sonderrolle spielt der Fall 3, die sogenannten Tachyonen. Klassisch entsprechen sie raumartigen Weltlinien, taugen also zur Ermordung von Urahren und anderen Zeitparadoxa. Quantenmechanisch sind diese Kausalitätsargumente nicht so offensichtlich und erfordern erst einmal eine Klärung dessen, wie Signallaufzeiten in einer Einteilchen-Quantenmechanik definiert werden könnten. Eine Aussage ist immerhin möglich: Wie auch immer man die Ortsobservable für ein solches System definieren möchte (für Vorschläge siehe ...) ist der Ort für große Zeiten einfach durch die Gruppengeschwindigkeit gegeben [4.1.2], also durch  $\nabla\omega(\vec{p})$ . Für Tachyonen ist nun  $\omega(\vec{p}) = \sqrt{\vec{p}^2 - w^2}$  was erst ab einem Minimalimpuls definiert ist, aber dann überall Gradienten mit Betrag  $\geq 1 = c$  hat. Wie man's dreht und wendet sind diese Teilchen also tatsächlich zu schnell für die relativistische Welt.

### 12.3.3 Darstellungen der Galilei-Gruppe

Dies ist die Gruppe, die aus Raumzeit-Translationen, Drehungen und Schüben gebildet wird. Der homogene Teil  $G_0$  besteht aus den Matrizen

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ v_1 & R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ v_1 & R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ v_1 & R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{pmatrix}. \quad (12.37)$$

Man rechnet leicht nach, dass die räumlichen Translationen und die Schübe vertauschen. Die Gruppe ist nicht halb-einfach, deshalb müssen wir auch mit nicht-trivialen lokalen Phasen bei der projektiven Darstellung rechnen. Es gibt drei Gruppen von Erzeugern in  $\mathfrak{g}$ : die Drehimpulse, nennen wir sie  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ , die Schub-Erzeuger  $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3$  und die räumlichen Impulse  $\pi_1, \dots, \pi_3$  und, etwas isoliert, der Erzeuger  $\pi_0$  der Zeittranslationen. Wir nehmen also eine antisymmetrische Form  $f$  auf der zehndimensionalen Lie-Algebra  $\mathfrak{g}$  an und müssen die allgemeinste Lösung der 1000 Gleichungen  $df = 0$  nach (12.26) finden (Nach Ausnutzung der Antisymmetrie sind es nur noch 120, mit 10 frei wählbaren Parametern).

Wir nutzen als erstes, dass sich die “Vektoroperatoren”  $\vec{\lambda}, \vec{\kappa}, \vec{\pi}$  unter Drehungen wie Vektoren transformieren. Für  $\zeta = \lambda, \kappa, \pi$  ergibt das jeweils die Vertauschungsrelation  $[\lambda_i, \zeta_j] = \sum_{\ell} \varepsilon_{ij\ell} \zeta_{\ell}$ . Werten wir damit den Ausdruck  $df(\lambda_i, \lambda_j, \zeta_k) = 0$  nach (12.26) für  $(i, j, k) = (1, 2, 2)$  aus:

$$f(\lambda_3, \zeta_2) + 0 + f(-\zeta_3, \lambda_2) = 0, \quad (12.38)$$

und natürlich alle zyklischen Permutationen dazu. Da  $f$  selbst antisymmetrisch ist schließen wir daraus, dass die  $3 \times 3$ -Matrix  $m_{ij} = f(\lambda_i, \zeta_j)$  antisymmetrisch ist, also von der Form

$$f(\lambda_i, \zeta_j) = \sum_{\ell} \varepsilon_{ij\ell} c_{\ell} = -dg_c([\lambda_i, \zeta_j]), \quad (12.39)$$

für geeignete Zahlen  $c_{\ell}$  die durch  $g_c(\zeta_{\ell}) = -m_{\ell}$  ein lineares Funktional auf  $\mathfrak{g}$  definieren. Wenn wir also  $f$  um diese triviale Phase modifizieren, können wir erreichen, dass  $f(\lambda_i, \zeta_j) = 0$  für  $\zeta = \lambda, \kappa, \pi$ . Für jeden der Vektoroperatoren können wir außerdem noch die  $\zeta$ - $\zeta$ -Elemente bestimmen und zwar durch Auswertung von

$$0 = df(\lambda_1, \zeta_1, \zeta_2) = f([\lambda_1, \zeta_1], \zeta_2) + f([\zeta_1, \zeta_2], \lambda_1) + f([\zeta_2, \lambda_1], \zeta_1) = 0 + 0 - f(\zeta_3, \zeta_1), \quad (12.40)$$

so  $f(\zeta_i, \zeta_j) \equiv 0$ . Damit bleibt nur noch die Matrix  $m_{ij} = f(\pi_i, \kappa_j)$  festzulegen, wobei wir  $[\pi_i, \kappa_j] = 0$  verwenden:

$$0 = df(\lambda_1, \pi_1, \kappa_2) = -f(\kappa_3, \pi_1) \quad (12.41)$$

$$0 = df(\lambda_1, \pi_2, \kappa_3) = f(\pi_3, \kappa_3) + f(\kappa_2, \pi_2). \quad (12.42)$$

Aus der ersten Gleichung bekommen wir, dass die Matrix  $f(\kappa_i, \pi_j)$  diagonal ist und aus der zweiten, dass sie diagonal ist. Die einzigen nicht verschwindenden Phasen sind also in den kanonischen Vertauschungsrelationen

$$[\kappa_i, \pi_j] = f(\kappa_i, \pi_j) \mathbb{1} = m \delta_{ij} \mathbb{1} \quad (12.43)$$

der zentral erweiterten Lie-Algebra enthalten. Wir müssen allerdings noch den bisher außer Acht gelassenen Erzeuger  $\pi_0$  der Zeittranslationen betrachten. Es gilt ja  $[\pi_0, \lambda_i] = [\pi_0, \pi_i] = 0$  und  $[\pi_0, \kappa_i] = \pi_i$ . Damit wird

$$0 = df \lambda_2, \lambda_3, \pi_0 = f(\lambda_1, \pi_0) \quad (12.44)$$

$$0 = df \lambda_2, \kappa_3, \pi_0 = f(\kappa_1, \pi_0) \quad (12.45)$$

$$0 = df \lambda_2, \pi_3, \pi_0 = f(\pi_1, \pi_0) , \quad (12.46)$$

womit (12.43) weiterhin die einzig nicht-verschwindenden Werte von  $f$  charakterisiert. Es bleibt also bei einem einzigen freien Parameter  $m$ .

Ein spezieller Wert ist  $m = 0$ . In diesem Fall vertauschen die Schübe und die raumzeitlichen Translationen. Wir stellen also die Gruppe  $\mathbb{R}^7 \rtimes \text{SU}(2)$  dar, wobei  $\text{SU}(2)$  in gleicher Weise auf die ersten und die letzten drei Komponenten wirkt. Die Orbits sind offenbar parametrisiert durch zwei "Impuls"-Beträge, das Skalarprodukt zwischen den Impulsen und die Energie. Abgesehen von entarteten Fällen ist also die Standuntergruppe eine Untergruppe der Drehgruppe, die zwei nicht-parallele Vektoren invariant lässt, also trivial. Physikalisch sind diese Darstellungen, in denen der Hamiltonoperator ein Vielfaches der Eins ist, nicht interessant.

Zum Auffinden der irreduziblen Darstellungen der erweiterten Gruppe beginnen wir wieder mit der Diagonalisierung der Translationen und somit mit einem Spektralmaß im 4-dimensionalen Impulsraum. Die Darsteller der  $\pi_i$  werden so zur Multiplikation mit dem Parameter  $p_i$ . Alle anderen Erzeuger  $\xi$  haben mit den Impulsen Vertauschungsrelationen der Form  $[\xi, \pi_j] = a_0(\xi)\mathbb{1} + \sum_i a_i(\xi) \pi_i$ , was einer gewöhnlichen Differentialgleichung für die Transformation des Impulses entlang der durch  $\xi$  erzeugten Untergruppe entspricht. Für Drehungen ( $\xi = \lambda_j$ ) kommt wieder eine Drehung im Impulsraum bei festem  $p_0$  heraus. Interessanter sind die Schübe, denn hier geht der neu gewonnene Parameter  $m$  ein. Wir bekommen  $[\kappa_1, \pi_k] = m\delta_{1k}\mathbb{1} + \delta_{0,k}\pi_1$ , was der Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \frac{dp_k(v)}{dv} &= m\delta_{1k} + \delta_{0k}p_1 \quad \text{mit der Lösung} \\ p_1(v) &= p_1(0) + mv \end{aligned} \quad (12.47)$$

$$\begin{aligned} p_k(v) &= p_k(0) \quad \text{für } k = 2, 3 \\ p_0(v) &= p_0(0) + vp_1(0) + \frac{mv^2}{2} \end{aligned} \quad (12.48)$$

entspricht. Spätestens hier wird sichtbar, dass unsere Bezeichnung " $m$ " für den Parameter der zentralen Erweiterung gut gewählt war und gerade all die üblichen Relationen zwischen Geschwindigkeiten und Orten gelten. Offenbar kann der räumliche Impuls durch Schübe nach (12.47) beliebig verändert werden. Als Ursprung der Orbits reicht es daher, die Punkte  $(E_0, 0, 0, 0)$  zu wählen. Man sieht dann leicht, dass für jeden Orbit gilt:

$$p_0 = E_0 + \frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) . \quad (12.49)$$

Die kleine Gruppe  $H$  zu jedem Orbit ist offenbar wieder  $\text{SU}(2)$  und wir müssen eine irreduzible Darstellung dieser Gruppe wählen, also einen Wert des Spins  $s$ .

Zusammenfassend: Die irreduziblen projektive Darstellungen der Galilei-Gruppe sind parametrisiert durch Masse  $m \in \mathbb{R}$ ,  $m \neq 0$  und Spin  $s \in \frac{1}{2}\mathbb{N}$ , zuzüglich einer etwas komplizierten, aber physikalisch irrelevanten Serie von Darstellungen mit  $m = 0$ .

## 12.4 Kovariante Observable: POVMs

Betrachten wir also nun den allgemeineren Fall von kovarianter Observablen, nun ohne Voraussetzung der Projektionswertigkeit. Wir gehen also wieder von einem Raum  $X$  aus, auf dem eine Symmetriegruppe  $G$  wirkt (in der Regel  $X = G/H$ ) und einer (projektiven) unitären Darstellung der Gruppe  $G$  auf einem Hilbertraum. Wir suchen also ein  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ -wertiges positives Maß  $F$  auf  $X$ , das der Kovarianzbedingung (12.27) genügt. Im Gegensatz zu Abschnitt 12.2 darf jetzt aber  $F(A)$  ein beliebiger Operator  $0 \leq F(A) \leq \mathbb{1}$  sein, nicht notwendig ein Projektor.

Wir beginnen mit einer einfachen Konstruktion, die solche Observable liefert.

### 12.4.1 Observable mit Dichte

Häufig kann man ein Maß als Produkt einer Dichte mit einem anderen Maß darstellen, also  $\nu = \rho \mu$ , was als  $\nu(A) = \int_{x \in A} \mu(dx) \rho(x)$  zu lesen ist. Eine solche Dichte, die man auch Radon-Nikodym-Ableitung von  $\nu$  bzgl.  $\mu$  nennt und suggestiv als  $\rho(x) = \frac{\nu(dx)}{\mu(dx)}$  schreiben kann, existiert gerade dann, wenn die  $\nu$ -Nullmengen auch  $\mu$ -Nullmengen sind. Wir interessieren uns hier für den Fall, dass  $\nu$  ein operatorwertiges Maß und  $\mu$  ein skalares Maß auf  $X$  ist, das wir wieder als quasi-invariant voraussetzen. Wir suchen also nach operatorwertigen Maßen der Form

$$F(A) = \int_{x \in A} dx F_x, \quad (12.50)$$

wobei  $F_x \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ ,  $F_x \geq 0$  ist. Welche Bedingungen müssen die Operatoren  $F_x$  nun erfüllen, damit  $F$  eine kovariante Observable wird? Man rechnet leicht nach, dass dafür gerade die Bedingung

$$U_g F_x U_g^* = \frac{d(gx)}{dx} F_{gx} \quad (12.51)$$

gebraucht wird, wobei der skalare Faktor für ein invariantes Maß auf  $X$  wegfällt. Dies bedeutet aber, dass nur die Dichte  $F_{\bar{x}}$  an einem Ursprung  $\bar{x} \in X$  gewählt werden muss, um die gesamte Observable zu definieren. Als Konsistenzbedingung, also damit  $F_{g\bar{x}}$  nur von  $x = g\bar{x}$  abhängt und nicht auch von  $g$  brauchen wir dass  $[U_H, F_{\bar{x}}] = 0$ , also  $F_{\bar{x}}$  mit der Standuntergruppe von  $\bar{x}$  vertauscht. Abgesehen von der Positivität brauchen wir dann noch die Normierungsbedingung  $F(X) = \mathbb{1}$ . Ob diese Bedingung überhaupt für einen positiven Operator erfüllbar ist, ist nicht immer leicht zu sehen. Wir betrachten hier zwei Spezialfälle.

Beispiel: Irreps Kompakte Gruppen.

Für kompakte Gruppen  $H \subset G$  gibt es immer ein normiertes invariantes Maß auf  $X = G/H$ , das gegeben ist durch  $\int dx f(x) = \int dg f(g\bar{x})$  mit dem Haarmaß  $dg$  auf  $G$ . Für einen beliebigen Operator  $M$  definiert also entsprechend  $F[f] = \int dg U_g M U_g^* f(g\bar{x})$  ein operatorwertiges Maß, hier geschrieben als Integral für Funktionen  $f : X \rightarrow \mathbb{C}$ . Die Dichte ist dann einfach  $F_{\bar{x}} = \int_H dh U_h M U_h^*$ . Wobei wir hier die Haar-Integration zerlegt haben in  $dg = dx dh$ , also erst Ausintegration über  $H$  und dann das Integral über die “übrigen” Variablen  $X$ . Hauptsächlich interessiert hier die Normierungsbedingung: Wir bekommen die Forderung

$$\widehat{M} = \int dg U_g M U_g^* = \mathbb{1} . \quad (12.52)$$

Das Integral selbst existiert, weil das Haarmaß ja endlich ist und der Integrand nach Annahme beschränkt. Es ergibt offenbar einen Operator  $\widehat{M}$ , der mit der Gruppendarstellung vertauscht. Wenn die Darstellung irreduzibel ist, ist das ein Vielfaches der Eins und die Bedingung ist erfüllt, sobald dafür der richtige Wert 1 herauskommt. Das lässt sich aber überprüfen, ohne das Integral auszuführen, indem man auf beiden Seiten der Gleichung die Spur nimmt: Wir brauchen gerade, dass  $\text{tr } M = \dim \mathcal{H}$ . Mit anderen Worten: Die Operatoren  $M$  die im irreduziblen Fall eine kovariante Observable liefern, sind genau die Operatoren der Form  $M = (\dim \mathcal{H})\rho$ , wobei  $\rho$  ein Dichteoperator ist (positiv mit Spur 1). Diesen nimmt man am besten noch als vertauschend mit  $H$ , da ja bei der Bildung der Observablen sowieso über  $H$  integriert wird. Übrigens bekommt man so dann auch alle kovarianten Observablen.

Ein Prototyp solcher Observablen ist eine **Richtungsobservable** für einen Spin  $s$ , die als Ergebnis einen Einheitsvektor liefert und bezüglich Drehungen ( $\text{SO}(3)$  resp.  $\text{SU}(2)$ ) invariant ist. Wenn man als Ursprung den Nordpol wählt, brauchen wir also Dichtematrizen, die mit Drehungen um die 3-Achse vertauschen. Für eine möglichst scharfe Observable wählt man hier den reinen Zustand, für den die 3-Komponente des Drehimpulses den maximalen Wert  $m = s$  hat.  $\diamond$

## 12.4.2 Naimark-Dilatation

Eine Methode, ein positiv-operatorwertiges Maß zu erzeugen, ist ein projektionswertiges Maß  $\widehat{F}$  auf einen Teilraum einzuschränken. Sei also  $\widehat{F}$  ein solches Maß auf einem Parameterraum  $X$ , mit Werten in  $\mathcal{B}(\widehat{\mathcal{H}})$  und  $\mathcal{H} \subset \widehat{\mathcal{H}}$  ein Teilraum. Für Zustände  $|\psi\rangle\langle\psi|$  mit  $\psi \in \mathcal{H}$  definiert dies immer noch eine Wahrscheinlichkeitsmaß  $\mu(A) = \langle\psi|\widehat{F}(A)|\psi\rangle$ . Wenn wir uns nur für den Raum  $\mathcal{H}$  interessieren können wir alle solchen Wahrscheinlichkeiten auch mit dem operatorwertigen Maß  $F(A) = P\widehat{F}(A)P$  berechnen, wobei  $P : \widehat{\mathcal{H}} \rightarrow \mathcal{H}$  der Projektor auf den Teilraum  $\mathcal{H}$  ist. Positivität und Maßeigenschaft werden direkt von  $\widehat{F}$  and  $F$  vererbt. Die Projektionswertigkeit geht aber verloren, wenn  $P$  nicht gerade zufällig mit den  $\widehat{F}(A)$  vertauscht. Die Aussage des Naimarkschen Dilatationssatzes ist die Umkehrung: Jedes POVM kann man sich so entstanden denken.

Entscheidend ist für uns auch die zugehörige Eindeutigkeitsaussage:  $\widehat{\mathcal{H}}$  und  $\widehat{F}$  sind durch  $F$  im Wesentlichen eindeutig bestimmt.

Für diese Aussage ist gleichgültig, ob  $\mathcal{H} \subset \widehat{\mathcal{H}}$  als Mengeninklusion gilt oder ob  $\mathcal{H}$  nur isometrisch in  $\widehat{\mathcal{H}}$  eingebettet ist. Diese zweite Auffassung ist etwas flexibler und wir benutzen sie im Folgenden. Wir suchen also zu einer gegebenen Observable  $F$  auf dem Parameterraum  $X$  mit Werten in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  entsprechende Objekte  $\widehat{F}$  mit Werten in den Projektoren auf  $\widehat{\mathcal{H}}$  und eine Isometrie  $V : \mathcal{H} \rightarrow \widehat{\mathcal{H}}$  sodass für messbare  $A \subset X$  gilt:

$$F(A) = V^* \widehat{F}(A) V . \quad (12.53)$$

Man nennt jedes Tripel  $(\widehat{\mathcal{H}}, \widehat{F}, V)$ , das dieser Gleichung genügt, eine **Dilatation** von  $F$ . Wenn  $\widehat{\mathcal{H}}$  nicht “unnötig groß” ist, also von den Vektoren der Form  $\widehat{F}(A)V\psi$  erzeugt wird, nennen wir die Dilatation minimal. Der **Satz von Naimark** [?] besagt, dass es zu jeder Observablen eine Dilatation gibt und dass sie im minimalen Fall eindeutig ist bis auf eine unitäre Transformation.

Der Kern des Beweises ist die Beobachtung, dass wir die Skalarprodukte der Vektoren  $\widehat{F}(A)V\psi$  schon aus den gegebenen Stücken berechnen können:

$$\begin{aligned} \langle \widehat{F}(A_1)V\psi_1, \widehat{F}(A_2)V\psi_2 \rangle &= \langle V\psi_1 | \widehat{F}(A_1 \cap A_2) | V\psi_2 \rangle \\ &= \langle \psi_1 | F(A_1 \cap A_2) | \psi_2 \rangle . \end{aligned} \quad (12.54)$$

Damit ist die Eindeutigkeit bereits geklärt. Denn wenn es zwei verschiedene  $(\widehat{\mathcal{H}}_i, \widehat{F}_i, V_i)$ ,  $i = 1, 2$  mit den gesuchten Eigenschaften ist, dann ist durch

$$U \sum_i \widehat{F}_1(A_i) V_1 \psi_i = \sum_i \widehat{F}_2(A_i) V_2 \psi_i \quad (12.55)$$

ein Operator definiert. Für beliebige solche Linearkombinationen  $\Phi, \Psi$  gilt  $\langle U\Phi, U\Psi \rangle = \langle \Phi, \Psi \rangle$ . Daher ist die Abbildung auch wohl definiert, das heißt zwei augenscheinlich verschiedene Darstellungen des gleichen Vektors ergeben auch das gleiche Bild. Das ist aber klar, weil  $\|\sum_i \Psi_i\|^2 = 0$  in  $\widehat{\mathcal{H}}_1$  die entsprechende Relation in  $\widehat{\mathcal{H}}_2$  nach sich zieht. Genauso sieht man das  $U$  beschränkt ist, also eine stetige Fortsetzung auf Limiten hat und damit nach Annahme auf ganz  $\widehat{\mathcal{H}}_1$  definiert ist.  $U^*U = 1$  ist nach dem gesagten eh klar und da wir bei Vertauschung der Rollen von 1 und 2 den inversen Operator bekommen ist  $U$  auch unitär. Per Definition gelten auch die Relationen  $UV_1 = V_2$  und  $U\widehat{F}_1(A) = \widehat{F}_2(A)U$ .

Für den Beweis der Existenz ist die entscheidende Beobachtung, dass das durch (12.54) definierte Skalarprodukt für beliebiges  $F$  positiv semidefinit ist [Ü!]. Wir können also erstmal den Raum der formalen Linearkombinationen von Vektoren “ $v(A, \psi)$ ” bilden und für diese durch den Ausdruck (12.54) ein Skalarprodukt definieren. Semidefinitheit bedeutet jetzt, dass für beliebige Linearkombinationen  $\Phi$  gilt:  $N(\Phi)^2 = \langle \Phi, \Phi \rangle \geq 0$ . Damit ist  $N$  eine Halbnorm, das heißt, dass es alle Eigenschaften einer Norm hat außer der einen, nur auf dem Nullvektor zu verschwinden. Das reicht aber, um eine Vervollständigung zu konstruieren, also Cauchyfolgen zu definieren und äquivalente (solche mit asymptotisch verschwindendem Normabstand) zu identifizieren. Diese

Vervollständigung ist dann ein Hilbertraum  $\widehat{\mathcal{H}}$ . Ferner ist  $V\psi$  die Klasse der konstanten Folge  $v(X, \psi)$  und  $\widehat{F}(A)$  entsteht aus der Abbildung  $v(B, \psi) \mapsto v(A \cap B, \psi)$ .

Beide Beweisteile folgen einem allgemeinen Muster von Sätzen die man eben Dilatationssätze nennt: Dabei wird ein Hilbertraum gesucht, der durch eine Menge von speziellen Vektoren erzeugt werden soll, deren Skalarprodukte man vorgibt. Das geht, dann auch eindeutig, sobald alle endlichen Teilmatrizen der vorgegebenen Skalarprodukte-Matrix positiv semidefinit sind.

Wir wenden dies nun auf den Fall kovarianter Observable an. Dazu schreiben wir die Kovarianzbedingung in der Form

$$U_g^* V^* \widehat{F}(gA) V U_g = F(A) . \quad (12.56)$$

Das heißt aber gerade, dass wir eine neue Dilatation von  $F$  gefunden haben, bei der  $V$  durch  $V U_g$  ersetzt ist und  $\widehat{F}(gA)$ . Wegen der Eindeutigkeit der Dilatation muss es also einen eindeutig bestimmten unitären Operator  $\widehat{U}_g : \widehat{H} \rightarrow \widehat{H}$  geben, sodass  $V U_g = \widehat{U}_g V$  und  $\widehat{F}(gA) = \widehat{U}_g \widehat{F}(A) \widehat{U}_g^*$ . Offensichtlich ist  $\widehat{U}$  eine Darstellung der gleichen Gruppe und wenn es sich bei  $U$  um eine projektive Darstellung gehandelt haben sollte, ist  $\widehat{U}$  eine projektive Darstellung mit den gleichen Faktoren. Ferner ist  $\widehat{F}$  bezüglich dieser Darstellung kovariant, sodass  $(\widehat{F}, \widehat{U})$  ein Imprimitivitäts-System bilden. Und schließlich ist  $V$  ein Verkettungsoperator zwischen den beiden Darstellungen.

Damit haben wir ein systematisches Verfahren zur Konstruktion von kovarianten Observablen für eine gegebene Darstellung  $U$  und einen homogenen Raum  $X = G/H$ . Wir müssen nur entscheiden, ob und wie die gegebene Darstellung  $U$  von  $G$  als Unterdarstellung einer von induzierten Darstellung durch eine Darstellung von  $H$  aufgefasst werden kann. Die Isometrie  $V$ , die  $U$  als Unterdarstellung ausweist, zusammen mit der projektionswertigen kovarianten Observable  $\widehat{F}$  aus der Induktionskonstruktion liefert dann nach (12.53) die gesuchte Observable und alle kovarianten Observablen entstehen so.

Bevor wir zu einigen Beispielen kommen ist es hilfreich, eine weitere Anwendung der des Dilatationssatzes anzusehen, die die Unschärfe von allgemeinen Observablen auf einem  $\mathbb{R}^n$  betreffen. Für allgemeine Observable ist ja aus den Koordinaten-Erwartungswert-Operatoren  $F[x_\alpha]$  die Observable  $F$  nicht rekonstruierbar und meist nicht einmal die zweiten Momente  $F[x_\alpha x_\beta]$ , die natürlich im Projektionswertigen Fall einfach  $F[x_\alpha]F[x_\beta]$  wären. Die zweiten Momente treten natürlich auch bei der Berechnung der Varianz der Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\text{tr } \rho F(\cdot)$  auf, die die Messung mit  $F$  an einem festen Zustand  $\rho$  ergibt. Wir bekommen (erst einmal vereinfachend für  $n = 1$ ) zwei Beiträge zur Kovarianzmatrix:

$$\text{tr } \rho F[x^2] - (\text{tr } \rho F[x])^2 = \text{tr } \rho (F[x^2] - F[x]^2) + \text{tr } \rho F[x]^2 - (\text{tr } \rho F[x])^2 . \quad (12.57)$$

Im zweiten Term taucht der Operator  $F[x]$  in der gleichen Weise auf wie Orts-oder Impulsoperator in den Varianzen aus Abschnitt ???. Gerade wenn  $\rho$  in einem Eigenraum dieses Operators konzentriert ist, also  $F[x]\rho = f\rho$  für ein  $f \in \mathbb{R}$  verschwindet

dieser Term. Er beschreibt also den Beitrag des Zustands zur Varianz, wenigstens in dem Sinn, dass man vor allem den Zustand geeignet wählen muss, um ihn klein zu machen. Dies geht beim ersten Term nicht: Dieser Beitrag verschwindet für projektionswertige Observable und lässt sich als Beitrag der Observable  $F$  zur Gesamtvarianz verstehen. Diese Interpretation macht allerdings nur Sinn, wenn beide Beiträge positiv sind. In der Tat folgt dies einfach aus dem Naimarkschen Satz. Wenn wir erst einmal die typischerweise unbeschränkte Natur des Operators  $F[x]$  ignorieren haben wir

$$F[x^2] - F[x]^2 = V^* \hat{F}[x] (\mathbb{1} - VV^*) \hat{F}[x] V \geq 0 . \quad (12.58)$$

Dies bleibt auch bei sorgfältigerer Formulierung und in Dimension  $n \geq 1$  richtig. Dafür schreiben wir  $x^2 = \sum_{\alpha} x_{\alpha}^2$  und definieren die Menge

$$\mathcal{D}(F) = \{ \psi \in \mathcal{H} \mid \int x^2 \langle \psi | F(dx) \psi \rangle < \infty \} . \quad (12.59)$$

Für  $\psi \in \mathcal{D}(F)$  existieren also alle zweiten Momente. Dies impliziert auch die Existenz von  $F[x_{\alpha}] \psi$  als normkonvergentes Integral im Hilbertraum und als Analogon von (12.58) die Positivität

$$\int x^2 \langle \psi | F(dx) \psi \rangle - \sum_{\alpha} \| F[x_{\alpha}] \psi \|^2 \geq 0 . \quad (12.60)$$

Nach der Schwarzschen Ungleichung ist  $\mathcal{D}(F)$  ein (meist nicht abgeschlossener) Unterraum.

### 12.4.3 <sup>◦</sup>Ortsobservable für relativistische Teilchen

### 12.4.4 <sup>◦</sup>Phasenraum-Observable

### 12.4.5 <sup>◦</sup>Kovariante Zeitobservable und Auffangschirme



# Kapitel 13

## Irreversible Dynamik und Messprozess

Alle Zeitentwicklungen, die wir bisher angesehen haben waren reversibel (hatten ein inverses) und daher nach dem Satz von Wigner unitär. Nicht-reversible Entwicklungen kommen in der klassischen Physik häufig vor, zum Beispiel wann immer Reibung im Spiel ist. Oft tauchen irreversible Entwicklungen auch als effektive Beschreibungen auf, selbst wenn die zu Grunde liegende Dynamik reversibel ist. In der Quantenmechanik gibt es einen zusätzlichen Grund, solche Entwicklungen anzuschauen: Jeder Messprozess, der uns irgend etwas über das System sagt, ist notwendigerweise irreversibel. Dabei betrachten wir jetzt ein verfeinertes Mess-Szenario, in dem wir den Zustand des Systems nach der Messung mitverfolgen. Wenn der Zustand nach der Messung (ohne Berücksichtigung der Messergebnisse oder Selektion danach) der gleiche ist wie vorher oder mit einer dynamischen Transformation wieder restauriert werden kann, dann kann die Messung nichts über den Zustand aussagen. Diese grundlegende Tatsache werden wir als erstes zeigen und dabei gleichzeitig die allgemeinsten für die Quanten-Informationsverarbeitung tauglichen Transformationen oder “Kanäle” kennenlernen. Zu jeder solchen Transformation können wir angeben, welcher Informationsgewinn damit verträglich wäre. Ist die Gesamt-Zustandsänderung klein (wenig Störung) dann kann die Messung auch kaum Information liefern. Dies wird uns ermöglichen, eine Beschreibung für fortlaufende Beobachtung von Quantensystemen zu geben. Ein Beispiel dafür wäre ein Ion in einer Falle, das über lange Zeit beobachtet und mit Lasern traktiert werden kann.

### 13.1 <sup>o</sup>Vollständig positive Operationen

Wir betrachten nun Transformationen zwischen zwei (möglicherweise verschiedenen) Quantensystemen, die in den Hilberträumen  $\mathcal{H}_A$  und  $\mathcal{H}_B$  beschrieben werden. Die betrachtete Operation nimmt System der Sorte  $\mathcal{H}_A$ , etwa präpariert nach der Dich-

tematrix  $\rho_A$  und verwandelt sie in ein System der Sorte  $\mathcal{H}_B$ , auf das wir nun einen Detektor  $F_B$  anwenden können. Zusätzlich kann bei diesem Prozess ein klassisches Bit ausgegeben werden (siehe Abb. ??).

### 13.1.1 $\circ$ Stinespring-Dilatation

### 13.1.2 $\circ$ Wiederholte Messungen

## 13.2 Ankunftszeit-Observable

## 13.3 $\circ$ Vollständig positive Zeitentwicklungen

# Kapitel 14

## Quanten- Informationstheorie

14.1    °Aufgaben und Ressourcen

14.2    °Verschränkung

14.3    °Kompression und Kodierung

14.4    °Kryptographie

14.5    °Quantenrechner



# Hinweise zu den Aufgaben

sodasschapters/qm01ex sodasschapters/qm02ex sodasschapters/qm04ex sodasschap-  
ters/qm05ex sodasschapters/qm06ex sodasschapters/qm07ex sodasschapters/qm08ex



# Lernhinweise

## Welches Lehrbuch?

Ein rundum zu empfehlendes Lehrbuch der Quantenmechanik gibt es muss erst noch geschrieben werden. Die meisten Bücher haben erhebliche Schwächen in Fragen der Interpretation. Man redet als seien Wellenfunktionen eine Eigenschaft einzelner Systeme, ohne dies aber zu thematisieren. Messungen gehen nach dem Projektionspostulat. Ansonsten gilt das Motto “Shut up and calculate”. Quantenmechanik-Lehrbücher, für die man das nicht sagen kann sind [Per05, Lud78, Bal98].

Eine zweite Schwäche ist oft der mathematische Apparat. Natürlich wäre es unsinnig, von einem allgemeinen Physik-Lehrbuch volle mathematische Strenge zu erwarten. Schlimm wird es nur, wenn die Autoren ihre Unkenntnis in irreführende Erklärungen ummünzen, oder für bekannte Tatsachen, die in andern Büchern auch ordentlich abgeleitet werden, aberwitzige ad hoc Begründungen geben (abschreckende Beispiele in [CTDL]). Auch in der heuristischen theoretischen Physik (“heuristisch” im Gegensatz zu “mathematisch”) kann man mit seinem Handwerkszeug mehr oder weniger sorgfältig umgehen. Der Unterschied kann aber kaum vermittelt werden, wenn schon Lehrbücher mit “Argumenten” operieren, die höchstens der Überredung, nicht der Überzeugung dienen. In dieser Hinsicht sorgfältiger sind zum Beispiel [GP90, Sch00, Thi77]

Neben den Klassikern [Dir30, vN32, Pau33, Hei58, Foc31] gibt es eine Reihe von weit verbreiteten Lehrbüchern, aus denen mittlerweile schon Generationen von Physikern gelernt haben. Dazu gehören beispielsweise: [LL79, Sch68, Boh51, Blo72, Mes91]. Gängige, etwas neuere Lehrbücher sind [Dav72, Gra69, Mer61, Gas81], ferner [CTDL, Sch88, Nol92, Sch00, Eng06, Gri12]. All diese Lehrbücher sind im wesentlichen vollständig in dem Rahmen, der durch eine einführende Vorlesung abgesteckt ist. Ich werde also niemandem davon abraten, dem der Stil eines dieser Bücher zusagt, und der damit gut arbeiten kann. Wer wirklich theoretische Physik lernen möchte, sollte aber Bücher wie [CTDL, Nol92, SW93, Fli05] meiden, über die man auch wirklich kaum etwas Positiveres sagen kann, als dass irgendwie alles Nötige (mehr oder weniger richtig) drinsteht.





# Literaturverzeichnis

- [AM76] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Harcourt College Publishers, Fort Worth, 1976.  
Standardwerk zur Festkörpertheorie.
- [Arn78] V.I. Arnold. *Mathematical methods of classical mechanics*. Springer, New York, 1978.  
Ein hervorragendes Buch über klassische Mechanik.
- [Bal98] L.E. Ballentine. *Quantum mechanics*. World Scientific, Singapore, 1998.  
Gute Stoffauswahl, und guter Kompromiss für das mathematische Niveau. (Leider ein etwas irreführendes mathematisches Einführungskapitel, das Sätze zitiert, die sich auf den später erst eingeführten Hilbertraum beziehen.) Auch in Interpretationsfragen viel klarer als der übliche Brei. Eines der ersten Lehrbücher mit einem Abschnitt über Bellsche Ungleichungen, auch wenn er dabei dem Unsinn eines gewissen Henry Stapp aufsitzt.
- [Bar54] V. Bargmann. On unitary ray representations of continuous groups. *Ann. Math.*, 59:1–46, 1954.
- [Bau85] H. Baumgärtel. *Analytic perturbation theory for matrices and operators*. Birkhäuser, Basel, 1985.
- [Bau90] H. Bauer. *Wahrscheinlichkeitstheorie*. de Gruyter, Berlin, 1990.
- [Bay71] G. Baym. *Lectures on quantum mechanics*. Benjamin, New York, 1971.  
Steigt auch mit Polarisation von Photonen ein.
- [BDG<sup>+</sup>] K. Berndl, D. Dürr, S. Goldstein, G. Peruzzi, and N. Zanghì. On the global existence of Bohmian mechanics. *Commun.Math.Phys.*, 173.
- [BE69] M. Born and A. Einstein. *Briefwechsel 1916-1955*. Nymphenburger, München, 1969.  
Absolut lesenswert. Tragisch, wie die beiden in späteren Jahren in Interpretationsdingen aneinander vorbeireden.
- [BHJ62] M. Born, W. Heisenberg, and P. Jordan. *Zur Begründung der Matrizenmechanik*. Battenberg Verlag, Stuttgart, 1962.

- Reihe: Dokumente der Naturwissenschaft, Bd.1. Nachdruck der Originalarbeiten von 1926.
- [Bil95] P. Billingsley. *Probability and Measure*. Wiley, New York, 1995.
- [BL81] L.C. Biedenharn and J.D. Louck. *Angular momentum in quantum physics*. Addison-Wesley,, 1981.
- [BLM91] P. Busch, P.J. Lahti, and P. Mittelstaedt. *The quantum theory of measurement*. Springer, Berlin, 1991.  
Enthält viel gutes Material: einerseits mathematisches Rüstzeug, und andererseits Handreichungen, wie man manche konkreten Experimente nun zu beschreiben habe. Leider wird ein zentraler Begriff der Kölner Schule (die “Objektivierung”) auch durch dieses Buch nicht so klar, daß ich seine Brauchbarkeit eingesehen hätte.
- [Blo72] D.I. Blochnizew. *Grundlagen der Quantenmechanik*. Verlag Harri Deutsch, Frankfurt, 1972.
- [BLW14] Paul Busch, Pekka Lahti, and Reinhard F. Werner. Measurement uncertainty relations. *J. Math.Phys.*, 55:042111, 2014.
- [Boh28] Niels Bohr. The quantum postulate and the recent development of atomic theory. *Nature (Suppl.)*, 121:580–590, 1928.
- [Boh51] D. Bohm. *Quantum Theory*. Prentice-Hall, New York, 1951.  
Solides Lehrbuch in Kopenhagener Tradition. Geschrieben kurz bevor der Autor “abtrünnig” wurde, und seine Theorie verborgener Variablen aufstellte.
- [Bor62] M. Born. *Zur statistischen Deutung der Quantentheorie*. Battenberg Verlag, Stuttgart, 1962.  
Reihe: Dokumente der Naturwissenschaft, Bd.1: Nachdruck der Bornschen Originalarbeiten von 1926.
- [BR81] O. Bratteli and D.W. Robinson. *Operator algebras and quantum statistical mechanics (2 volumes)*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1979/1981.  
Unverzichtbares Lehrbuch für die operatoralgebraische Sicht der Quantenmechanik.
- [BV09] G. Bacciagaluppi and A. Valentini. *Quantum Theory at the Crossroads: Reconsidering the 1927 Solvay Conference*. Cambridge UP, 2009. Auch bei arXiv:quant-ph/0609184.
- [BW59] M. Born and E. Wolf. *Principles of optics*. Pergamon Press, Oxford, 1959.
- [CRS<sup>+</sup>01] M. A. Cirone, K. Rzażewski, W. P. Schleich, F. Straub, and J. A. Wheeler. Quantum anticentrifugal force. *Phys. Rev. A*, 65:022101, 2001.

- [CTDL] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Quantum mechanics (2 volumes)*.  
Dick, aber gefällig portioniert. Brauchbar für durchgerechnete Beispiele, aber Erklärungen zu allgemeineren begrifflichen oder mathematischen Aspekten gehen oft daneben.
- [Dav72] A.S. Davydov. *Quantenmechanik*. Dt.Verl.d.Wiss., Berlin, 1972.
- [Dav76] E.B. Davies. *Quantum theory of open systems*. Academic Press, 1976.  
Brian Davies ist ein Mathematiker, der sich (unter anderem) von Ludwig (siehe [Lud85]) anregen ließ, nicht-ideale Messungen unter Einschluß des Zustandes nach der Messung allgemein zu beschreiben. Das führte zum Begriff des “Instruments”, der in diesem Buch geprägt wurde. Ein weiterer Schwerpunkt ist die Ableitung irreversibler quantenmechanischer Zeitentwicklungen für Systeme in schwacher Wechselwirkung mit einem Wärmebad.
- [Dav80] E.B. Davies. *One parameter semigroups*. Academic Press, London, 1980.
- [Dir30] P.A.M. Dirac. *The principles of quantum mechanics*. Clarendon Press, Oxford, 1930.  
Klassiker. Die Bra-Ket Notation stammt hierher.
- [DM74] H. Dym and H.P. McKean. *Fourier series and integrals*. Acad.Press, New York, 1974.  
Hervorragendes Buch zum Thema.
- [Edm64] A.R. Edmonds. *Drehimpulse in der Quantenmechanik*. B.I. Hochschultaschenbücher, Mannheim, 1964.  
Gilt als Standardreferenz, wenn man zum Beispiel eine Konvention für Vorzeichen an Clebsch-Gordan-Koeffizienten und oder  $6j$ -Symbole braucht, und nicht alles selbst noch mal hinpinseln will.
- [Eng96] B.-G. Englert. Fringe visibility and which-way information: An inequality. *Phys. Rev. Lett.*, 77:2154–2157, 1996.
- [Eng06] B.-G. Englert. *Lectures on quantum mechanics (3 vols)*. World Scientific, Singapore, 2006.
- [EPR35] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Phys. Rev.*, 47:777–780, 1935.
- [Fay14] Jan Faye. Copenhagen interpretation of quantum mechanics. In Edward N. Zalta, editor, *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*. Fall 2014 edition, 2014.
- [Fin86] A. Fine. *The shaky game*. U Chicago Press, Chicago, 1986.

- [Fli05] T. Fließbach. *Quantenmechanik*. Elsevier/Spektrum, Heidelberg, 2005.
- [FMS14] Christopher A. Fuchs, N. David Mermin, and Rüdiger Schack. An introduction to QBism with an application to the locality of quantum mechanics. *Am. J. Phys.*, 82:749–754, 2014.
- [Foc31] V.A. Fock. *Fundamentals of quantum theory*. 1931.  
Russische Erstausgabe von 1931. Obwohl das Vorwort der posthumen Auflage von 1976 betont, Fock habe stets größten Wert auf den “korrekten materialistischen Standpunkt” gelegt, findet sich im Text nichts von dem einschlägigen dogmatischen Gewäsch. (Siehe dagegen [Blo72]).
- [Fra05] M. Frayn. *Kopenhagen- Stück in zwei Akten, mit Kommentaren*. Wallstein Verlag, Göttingen, 2005.  
Dieses Theaterstück setzt sich mit dem Besuch von Heisenberg 1941 bei Bohr in Kopenhagen auseinander, und vor allem mit der Unmöglichkeit nachträglich zu einer eindeutigen Version der Ereignisse zu kommen. Diese Ausgabe enthält neben der Übersetzung des Stückes ein Nachwort des Autors und Kommentare verschiedener Wissenschaftshistoriker. Insgesamt ein großartiges Lehrstück.
- [Gas81] S. Gasiorowicz. *Quantenphysik*. Oldenbourg, München, 1981.  
Hat ein kommentiertes Literaturverzeichnis.
- [GP90] A. Galindo and P. Pascual. *Quantum Mechancis (2 vols.)*. Springer, Berlin, 1990.  
Relativ gründlich gearbeitetes Lehrbuch, das auch auf mathematischen Details eingeht.
- [GR80] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik. *Table of integrals, series, and products*. Academic Press, 1980.
- [Gra69] G. Grawert. *Quantenmechanik*. Vieweg, Braunschweig, 1969.  
Konventionelles Lehrbuch mit Betonung der Streutheorie.
- [Gri12] D. Griffiths. *Quantenmechanik*. Pearson, München, 2012.  
Zelebriert für meinen Geschmack etwas zu sehr seine Unlust mathematische Sachverhalte darzustellen, oder ein Argument zu geben, wo man auch einfach den “üblichen Ansatz” machen kann. Dafür in der Stoffauswahl der betrachteten physikalischen Systeme reichhaltig und in ansprechendem Layout.
- [Gro70] S. Großmann. *Funktionalanalysis im Hinblick auf Anwendungen in der Physik (2 Bde.)*. Akademische Verlagsgesellschaft, Frankfurt, 1970.  
Knappe, aber lesbare Darstellung der wichtigsten Punkte.
- [Háj12] Alan Hájek. Interpretations of probability. In Edward N. Zalta, editor, *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*. Winter 2012 edition, 2012.

- [Ham64] M. Hamermesh. *Group theory and its applications to physical problems*. Addison-Wesley, Reading, 1964.
- [Hei25] W. Heisenberg. Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. *Zeitschr. Phys.*, 33:879–893, 1925.
- [Hei27] W. Heisenberg. über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik. *Zeitschr. Phys.*, 43:172–198, 1927.
- [Hei58] W. Heisenberg. *Physikalische Prinzipien der Quantentheorie*. BI Verlag, Mannheim, 1958.  
(Erstausgabe: 1930) Sehr typisch für die halbklassischen Diskussionen jener Zeit.
- [Hei73] W. Heisenberg. *Der Teil und das Ganze*. dtv-Taschenbuch 903, München, 1973.  
Heisenberg ist ein großer Selbstdarsteller. Nicht ganz ohne narzistische Peinlichkeiten. Leider sind Zitate, die mit den Worten “Dann könnte ich gesagt haben. . .” eingeleitet werden als historische Quellen kaum tauglich.
- [Hol82] A. S. Holevo. *Probabilistic and statistical aspects of quantum theory*. North-Holland, Amsterdam, 1982.
- [How04] D.A. Howard. Who invented the Copenhagen Interpretation? A study in mythology. *Philosophy of Science*, 71:669–682, 2004.
- [Hud74] R. Hudson. When is the Wigner quasi-probability density non-negative. *Rep.Math.Phys.*, 6:249–252, 1974.  
Antwort der Titelfrage: Genau für Gaußpakete. Eine der schönsten Anwendungen der Funktionentheorie in der Quantenmechanik.
- [Kac66] M. Kac. Can you hear the shape of a drum? *Amer. Math. Monthly*, 73:1–23, 1966.
- [Kat84] T. Kato. *Perturbation theory of linear operators*. Springer Verlag, 1966/1984.  
Das klassische Buch zur Störungstheorie.
- [Ken27] E. H. Kennard. Zur Quantenmechanik einfacher Bewegungstypen. *Zeitsch. Phys.*, 44:326–352, 1927.
- [Kir76] A. A. Kirillov. *Elements of the theory of representations*. Springer, Berlin, 1976.
- [KM] B. Kümmerer and H. Maassen. Elements of quantum probability. Tagungsband-Artikel mit geplanter Erweiterung zu einem Buch. In 1995 hatte ich geschrieben: “erscheint hoffentlich 1996”. Die Autoren versichern mir, dass das Projekt noch nicht tot ist.

- [KN91] Y.S. Kim and M.E. Noz. *Phase space picture of quantum mechanics: group theoretical approach*. World Scientific, Singapore, 1991.
- [KRSW12] Jukka Kiukas, Andreas Ruschhaupt, Piet O. Schmidt, and Reinhard F. Werner. Exact energy-time uncertainty relation for arrival time by absorption. *J. Phys. A*, 45:185301, 2012.
- [KSW08] Dennis Kretschmann, Dirk Schlingemann, and Reinhard F. Werner. The information-disturbance tradeoff and the continuity of Stinespring’s representation. *IEEE Trans. Inform. Theory*, 54:1708–1717, 2008.
- [LL79] L.D. Landau and E.M. Lifschitz. *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band III*. Akademie-Verlag, Berlin, 1979.  
Die Bücher des genialen Landau und seines Schülers (“Kein Wort von Landau, kein Gedanke von Lifschitz”) enthalten in den Augen vieler Theoretiker alles, was man an Rechentechniken braucht. Die Genialität liegt darin, auch mit mathematisch windigen Argumenten noch zum physikalisch richtigen Ergebnis zu kommen. Das Wort “Hilbertraum” kommt nicht einmal vor. Weniger geniale Nachfolger landen damit aber auch schon mal auf dem Bauch. Auf jeden Fall ein Buch von Format, das genau studiert werden will.
- [Lud78] G. Ludwig. *Einführung in die Grundlagen der Theoretischen Physik, Bd.3*. Vieweg, Braunschweig, 1978.  
Ludwig (mein Doktorvater) war ein anerkannter Experte für die Grundlagen der Quantentheorie. Dieses ist eins der wenigen Lehrbücher mit einer durchdachten Behandlung der Grundlagenfragen. Leider leidet es an einer Wucherung der Querverweise, und an der Mathematisierung einiger Bereiche (besonders in Kapitel XIII), die man auch sprachlich hätte abhandeln können. Beides beeinträchtigt die Lesbarkeit. Insgesamt eher geeignet für einen zweiten Durchgang.
- [Lud85] G. Ludwig. *Foundations of quantum mechanics (2 Bde.)*. Springer, Berlin, 1983/1985.
- [Luk70] E. Lukacs. *Characteristic functions*. Griffin, London, 1970.
- [Mad26] E. Madelung. Eine anschauliche deutung der gleichung von schrödinger. *Naturwissenschaften*, 14(45):1004–1004, 1926.
- [Mer61] E. Merzbacher. *Quantum mechanics*. Wiley, New York, 1961.
- [Mes91] A. Messiah. *Quantenmechanik (2 Bde.)*. de Gruyter, Berlin, 1991.  
Der Verlag hat vor ein paar Jahren bei mir angefragt, ob ich nicht eine Neuauflage dieses Klassikers übernehmen möchte. Bei der Gelegenheit habe ich mir das Buch noch mal genauer angeschaut und bin zu dem Ergebnis gekommen, dass ich das nicht tun sollte: Es ist in seiner Art ein gut geschriebenes Buch mit viel physikalischer Diskussion. Es auf modernen

Stand zu bringen hätte aber weiträumiges Umschreiben bedeutet und es wäre wohl kaum etwas Druckenswertes dabei herausgekommen.

- [NC00] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge UP, Cambridge, 2000.
- [Nel] Edward Nelson. Zitat aus einem Vortrag in Princeton. Von Reed und Simon, die dabei waren, zitiert als Motto für Kapitel X.7 in [RS80].
- [New82] R.G. Newton. *Scattering theory of waves and particles*. Springer, New York, 1982.  
Ziemlich umfangreiches Werk zur Streutheorie, hauptsächlich zur sogenannten stationären Theorie.
- [Nol92] W. Nolting. *Grundkurs: Theoretische Physik, Bd 5*. Zimmermann-Neufang, Ulmen, 1992.  
Ausdrücklich für den ersten Durchgang gedacht, und bietet auch kaum etwas für einen zweiten. Die Lösungen der Übungsaufgaben sind nur skizziert, und fast ganz ohne Text. Wer hier abschreibt (ohne die Erläuterungen einzufügen), bekommt Punktabzug.
- [Pau33] W. Pauli. Die allgemeinen prinzipien der wellenmechanik. In S. Flügge, editor, *Handbuch der Physik, Bd.V/1*, Berlin, 1933. Springer.
- [Per05] A. Peres. *Quantum Theory: Concepts and Methods*. Kluwer, New York, 2005.  
In vielem klarer als die sonstige Lehrbuchliteratur. Überwiegend lesenswert und mit kommentierten Literaturverzeichnissen zu jedem Thema.
- [Phe66] R. R. Phelps. *Lectures on Choquet's Theorem*. van Nostrand, Princeton, 1966.
- [Rob29] H. P. Robertson. The uncertainty principle. *Phys. Rev.*, 34:163–64, 1929.
- [Rol03] H. Rollnik. *Quantentheorie (2 Bde.)*. Springer, Berlin, 2003.  
Der zweite Band ließ lange auf sich warten. (Kein Spin, Keine Fermi/Bose Statistik). Gut gelungen die Abschnitte über Differentialgleichungen mit regulären Singularitäten, und über Streutheorie.
- [RS80] M. Reed and B. Simon. *Methods in modern mathematical physics (4 volumes)*. Academic Press, 1972-1980.  
Eines der besten Lehrbücher über Funktionalanalysis in Hinblick auf die Quantenmechanik.
- [Sch26] E. Schrödinger. Quantisierung als eigenwertproblem i,ii. *Annalen der Physik*, 79:361–376; 489–521, 1926.  
Seine Auseinandersetzung mit [EPR35].

- [Sch35] E. Schrödinger. Die gegenwärtige situation in der quantenmechanik. *Die Naturwissenschaften*, 23:807–812; 823–828; 844–849, 1935.  
Schrödingers Durchbruch. Ein Krimi.
- [Sch68] L.I. Schiff. *Quantum mechanics*. McGraw-Hill, New York, 1968.  
Eines der Standardlehrbücher des amerikanischen Marktes. Breit angelegte Stoffauswahl.
- [Sch88] F. Schwabl. *Quantenmechanik*. Springer, Heidelberg, 1988.  
Abgesehen von den üblichen Einschränkungen nicht schlecht. Mit einem Kapitel über supersymmetrische Quantenmechanik.
- [Sch00] F. Scheck. *Theoretische Physik 2- Nichtrelativistische Quantentheorie*. Springer, Berlin, 2000.  
Teil eines kompletten Theorie-Grundkurses. Mathematisch klar. Viele explizite Rechnungen, ausdrücklich um die Verwendung im Selbststudium zu erleichtern.
- [Sch06] E. Scholz. The introduction of groups into quantum theory. arXiv:math.HO/0409571, 2006.
- [Sim05] B. Simon. *Trace Ideals and their Applications (2nd Edition)*. Am. Math. Soc., Providence, 2005.
- [Sta72] H.P. Stapp. The copenhagen interpretation. *Am. J. Phys*, 40:1098–1116, 1972.
- [SW93] M. Schubert and G. Weber. *Quantentheorie*. Spektrum Verlag, Heidelberg, 1993.  
Vielleicht als Formelsammlung brauchbar: es werden viele Gebiete angesprochen, aber (an mehreren getesteten Stellen) nur dürftige ad hoc Begründungen geliefert.
- [Tes12] G. Teschl. *Ordinary differential Equations and Dynamical systems*. AMS, Providence, 2012.
- [Thi77] W. Thirring. *Lehrbuch der mathematischen Physik, Bd. 3*. Springer, Berlin, 1977.  
In Wien lief der gesamte Theorie-Zyklus zweimal. Dies hier sind die Lehrbücher für den zweiten Durchlauf. Hoch kondensierter Stoff. Die Übungsaufgaben haben teilweise das Format von Forschungsarbeiten.
- [vM28] R. von Mises. *Wahrscheinlichkeit, Statistik und Wahrheit*. Julius Springer, Berlin, 1928.
- [vN] J. von Neumann.
- [vN31] J. von Neumann. Die Eindeutigkeit der Schrödingerschen Operatoren. *Math. Ann.*, 104:570–578, 1931.



- [vN32] J. von Neumann. *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Springer, Berlin, 1932.  
Dieses Buch war sehr einflußreich, im Guten (tiefes Verständnis der Hilbertraum-Struktur) wie im Schlechten (eine völlig überidealisierte Theorie des Meßprozesses).
- [Wag85] S. Wagon. *The Banach-Tarski Paradox*. Cambridge UP, 1985.
- [Wer84] R. Werner. Quantum harmonic analysis on phase space. *J.Math.Phys.*, 25:1404–1411, 1984.  
Den hier entwickelten Kalkül halte ich immer noch für einen der besten Wege, Phasenraumtechniken für die Quantenmechanik nutzbar zu machen. Leider voller Tippfehler.
- [Wer04] R. F. Werner. The uncertainty relation for joint measurement of position and momentum. *Quant. Inform. Comput.*, 4:546–562, 2004.
- [WF19] Reinhard F. Werner and Terry Farrelly. Uncertainty from heisenberg till today. *Found. Phys.*, 2019.
- [Wig32] E. P. Wigner. On the quantum correction for thermodynamic equilibrium. *Phys. Rev.*, 40:749–759, 1932.
- [Wu86] T.-Y. Wu. *Quantum mechanics*. World Scientific, Singapore, 1986.  
Lesenswert vor allem die Darstellung der frühen Entwicklung der Quantenmechanik.

# Index

- Äquivarianz, 261
- Überlagerungsgruppe, 249
- einparametrischen unitären Gruppen, 119
- Abschluss, 61
- adjungierte Operator, 49
- affine symplektische Gruppe, 143
- Aharonov-Bohm, 142
- alternierende Darstellung, 172
- antisymmetrischen Vektoren, 173
- antiunitärer Operator, 118
- asymptotische Reihe, 198
- ausreduzieren, 252
- Austauschwechselwirkung, 189
- Banach-Tarski-Paradoxon, 40
- Bandstruktur, 139
- Basis, 48
- Bell-Korrelation, 216
- Bell-Ungleichungen, 216
- Bellsches Telefon, 218
- Bertrandsches Theorem, 133
- beschränkt, 49
- Besetzungszahlen, 178
- Bloch-Kugel, 17
- Born-Oppenheimer, 168
- Bosonen, 174
- Bra-Ket Notation, 50
- Bravais-Gitter, 135
- Brillouin-Zone, 138
- Charakter, 173, 255
- charakteristische Funktion, 68
- Charaktertafel, 256
- chemischen Potential, 186
- Clebsch-Gordan-Koeffizienten, 165
- Darstellung
  - einer Gruppe, 118
- Defektindizes, 112
- Defektraum, 111
- Definitionsbereich, 60
- Dekohärenz, 231
- Detektor, 24
- diagonalisieren, 53
- Dichtematrix, 16, 23
- Dilatation, 270
- Dimension
  - Hilbertraum, 48
  - konvexe Menge, 63
  - Lineare Algebra, 49
- diskrete Wahrscheinlichkeitsmaße, 38
- Doppelspalt, 12
- Doppelspalt-Experiment, 240
- duale Gitter, 137
- eichinvariant, 141
- Eichtheorien, 139
- Eichtransformation, 140
- Eigenwert, 56
- einfach zusammenhängend, 248
- Einsoperator, 49
- Elementarereignisraum, 36
- empirisch äquivalent, 241
- Empirische Korrektheit, 221
- entwickelt, 48
- Erwartungswert, 21
- Erwartungswert-treuer, 42
- Erzeuger, 120
- Erzeugungsoperator, 179
- Extremalpunkt, 63
- Führungsgleichung, 239
- faktorielle  $k$ -te Moment, 191
- Faltung in einer Gruppe, 254
- Fermionen, 174

- Flip-Operator, 171
- Fockraum, 176
- Fourier-Reihen, 137
- Fourier-Transformation, 64
- Fourier-Weyl Transformation, 148
- Fundamentalebene, 136
- Funktionalkalkül, 54
- Galilei-Gruppe, 118
- gemeinsame Verteilung, 39
- Geschwindigkeitsoperator, 89
- Geschwindigkeitsoperatoren, 141
- Gitterschwingungen, 147
- goldene Jahre, 10
- Graph, 61
- großkanonische Gesamtheit, 186
- Grundzustandsenergie, 100
- Gruppe, 118
  - topologische , 246
- Gruppenwirkung, 258
- gyromagnetische Faktor, 167
- Häufigkeitsinterpretation, 34
- Haarmaß, 246
- Hamiltonoperator, 19, 25
- harmonisch gebundenen Systemen, 146
- Hartree-Fock, 168
- Hartree-Fock Verfahren, 189
- Heisenbergbild, 25
- Hermite-Polynome, 96
- hermitesch, 23
- homogenen Raum, 259
- Imprimitivität, 260
- Impulsobservable, 65
- Impulsoperator, 20
- Indikatorfunktionen, 37
- indirekte Messung, 28
- induzierte Darstellung, 260
- Intensitätsmaß, 185
- Interpretation, 227
- invariante Funktion, 255
- irreduzibel, 251
- irreduzibles, 126
- Kalibrierfehler, 81
- Kalibrierung, 81
- kanonischen Antivertauschungsrelationen (CAR), 180
- kanonischen Vertauschungsrelationen (CCR), 180
- Ketbra, 51
- Klassikalität, 221
- kleine Gruppe, 263
- kohärenten Vektor, 177
- Kollaps der Wellenfkt, 236
- Kollaps der Wellenfunktion, 234
- kommunikationsfrei, 215
- Kommutante, 251
- Konfidenzintervall, 43
- Konjugationsklassen, 255
- konkave Funktion, 64
- konvexe Funktion, 63
- konvexe Hülle, 63
- konvexe Menge, 62
- Kopenhagener Interpretation, 232
- Korrelationen, 161
- Korrelationsfunktionen, 192
- Korrespondenzregel, 11
- kovarianten Phasenraum-Observablen, 84
- Krein-Raum, 112
- Kugelflächenfunktionen, 125
- Laborsprache, 229
- Laplace-Transformierten, 206
- Lebesgue-Maß, 247
- Lebesguemaß, 37
- Leiteroperator, 95
- Lenz-Runge Vektor, 133
- Lie-Algebra, 247
  - halbeinfach, 258
- Lie-Gruppe, 247
- linksreguläre Darstellung, 254
- lokal kompakte, 246
- Lokalität, 221
- Maß, 37
- magnetische Substitution, 139
- Marginalverteilung, 39, 161
- Matrixelemente, 50
- maximal abelsch, 54

- maximal symmetrisch, 113
- maximal verschränkter Zustand, 163
- Maxwell-Gleichungen, 13
- messbare, 41
- Messproblem, 231
- Messung, 23, 36
- Messung erster Art, 29
- metaplektische Darstellung, 143
- minimale statistische Interpretation, 227
- Mittelwert, 38
- modulare Funktion, 246
- Momente, 38
- momentenerzeugende Funktion, 68
- Multiplizität, 173
  
- Nichtlokalität der QM, 222
- Norm, 44, 49
- normal, 60
  
- Observable, 24, 55
  - verallgemeinerte, 27
- Operator, 23
- operator-monotone Funktion, 59
- Orthonormierungsverfahren, 48
- orthogonal, 45
  
- Parallelogramm-Gleichung, 69
- Parastatistik, 175
- Paritätsoperator, 98
- partielle Isometrie, 113
- partielle Spur, 161
- Pauli-Gleichung, 167
- Pauli-Prinzip, 178
- Peter-Weyl-Theorem, 253
- Pingpongball-Test, 218
- Plancherel-Formel, 65
- Poincaré-Kugel, 17
- Poissonschen Punktprozess, 185
- Polarisations-Identität, 57
- Polytop, 63, 215
- positiver Operator, 23
- Präparation, 23, 36
- Produktfunktionen, 156
- Projektionspostulat, 29
- projektionswertige Observable, 24
- Projektor, 46
  
- Punktmaß, 37
  
- quadratische Hamiltonfunktion, 143
- Quantencomputer, 231
- Quanteninformationstheorie, 27
- Quantenlogik, 28
- Quantenoptik, 135
- quasi-invariantes Maß, 259
- quasifreien Zustand, 185
- Quasiwahrscheinlichkeit, 149
- Quaternionen, 151
  
- Randbedingungen, 91
- Rayleigh-Ritz-Ungleichung, 101
- rechtsreguläre Darstellung, 253
- reduzibel, 251
  - vollständig, 252
- reduzierte Dichtematrix, 160
- Reflexionskoeffizienten, 107
- reguläre Singularität, 130
- Resolvente, 56, 199
- Resolventengleichung, 199
- Resonanz, 108
- Richtungsobservable, 269
- Riemann-Lebesgue Lemma, 65
  
- S-Matrix, 106
- Satz von Naimark, 270
- Satz von Stone und von Neumann, 120
- Schätzer, 42
- Schmidt-Zerlegung, 163
- Schnitt, 237
- Schrödingerbild, 25
- Schrödingergleichung, 18
- Schrödingers Katze, 230
- Schursches Lemma, 251
- Schwarzsche Ungleichung, 44
- Seite (konvexe Menge), 63
- selbstadjungiert, 60
- selbstadjungierte Erweiterung, 113
- Separationsansatz, 92
- Skalarprodukt, 44
- Slater-Determinante, 188
- spektrale Konzentration, 198
- Spektralmaße, 55
- Spektralsatz, 54

- Spektrum, 55
  - kontinuierlich, 56
  - Punkt-, 56
  - singulär stetig, 56
- Spin-Statistik-Theorem, 175
- Spur, 52
- Spurklasse, 52
- Standuntergruppe, 259
- statistisch unabhängig, 160
- stetigen Darstellung, 250
- Stichprobenraum, 36
- Stochastische Mechanik, 239
- Stokes-Parameter, 17
- Strahldarstellung, 119
- Streuoperator, 106
- Streurandbedingung, 107
- Streutheorie, 106
- Sturm-Liouville, 102
- subjektiven Wahrscheinlichkeitsinterpretation, 35
- Superauswahlregeln, 174
- Supergraph, 64
- symmetrisch, 61
- symmetrischen Vektoren, 173
- symplektische Form, 119
- symplektische Fouriertransformation, 148
- symplektische Normalformenproblem, 146
- symplektischen Form, 144
- Teilchen mit Spin, 167
- Teilchenzahl-Operators, 176
- Tensorprodukt, 157
- Tensorprodukt-Darstellung, 165
- Transferoperatoren, 103
- Transmissionskoeffizienten, 107
- triviale Darstellung, 172
- Tsirelson-Ungleichungen, 216
- Tunneleffekt, 109
- Umgebungen der Eins, 246
- unitär, 47
- Universalität der QM, 230
- ununterscheidbar, 172
- Vakuum-Vektor, 176
- Varianz, 38
- Vektorbündel, 140
- Vektoroperatoren, 122
- verborgene Variablen, 211
- Verfahren, 22
- Verkettungsoperator, 251
- vermiedene Kreuzung, 202
- Vernichtungsoperator, 180
- verschränkt, 163
- viele Teilchen, 167
- Vielfachheit, 252
- volle Zählstatistik, 184
- Vollständigkeit, 45
- von Neumannsche Eindeutigkeitssatz, 145
- Voronoi-Konstruktion, 137
- Wahrheit, tiefe, 10
- Wahrscheinlichkeits-Strom, 239
- Wechselwirkung, 166
- wesentlich selbstadjungiert, 62, 113
- Weyl-Dualität, 174
- Weyl-Operatoren, 83, 119
- Wigner
  - Funktion, 148
  - Satz von, 118
  - Seitz-Zelle, 137
- Wigner-Funktion, 90
- Wirkungsquantum, 11
- Wronski-Determinante, 102
- Wurzel eines Operators, 58
- Zählmaß, 183
- Zeitentwicklungsoperator, 20, 25
- zeitgeordnete Exponentialfunktion, 205
- Zeitumkehr, 151
- zentrale Erweiterung, 256
- zufällige Entartung, 133
- Zufallsexperimente, 34
- Zufallsvariable, 36
- zusammenhängend, 248
- Zusammenhangskomponente, 248
- Zustand, 16, 23
  - reiner, 18, 23, 75
- Zustandsraum, 17
- zweite Quantisierung, 176
- Zyklotronfrequenz, 142