

Skript zur Fortbildung

Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik

am Mathematischen Forschungsinstitut Oberwolfach, 5.–9. November 2012.

Stefan Teufel

Mathematisches Institut der Universität Tübingen

22. November 2012

Inhaltsverzeichnis

1	Klassische Mechanik von Punktteilchen	4
1.1	Newtonsche Mechanik	4
1.2	Hamiltonsche Mechanik	5
2	Wellenfunktion und Schrödingergleichung	7
2.1	Die Wellenfunktion	7
2.2	Die Schrödingergleichung	8
2.3	Die Kontinuitätsgleichung	13
3	Fouriertransformation und die freie Schrödingergleichung	14
3.1	Die Fouriertransformation	15
3.2	Lösungstheorie der freien Schrödingergleichung	17
3.3	Langzeitasymptotik der freien Schrödingergleichung	19
4	Der Messformalismus der Quantenmechanik	21
4.1	Die üblichen Axiome der Quantenmechanik	22
4.2	Modellierung eines idealisierten Experiments	25
4.3	Schrödingers Katze und das Messproblem	28
4.4	Dekohärenz	31
4.5	Das Doppelspaltexperiment	32
5	Ergänzungen	34
5.1	Zur Bohmschen Mechanik	34
5.2	Zur quantenmechanischen Beschreibung von Photonen	38
5.3	Nichtlokalität	39

6 Spin (Autor: Dustin Lazarovici)	44
6.1 Die Pauli-Gleichung	47
6.2 Der Stern-Gerlach-Versuch	48
6.3 Eine zweite Spin-Messung	50
6.4 N Teilchen mit Spin	52
7 Atomaufbau und Quantenmechanik (Autor: Jonas Lampart)	54
7.1 Die Struktur des Wasserstoffproblems	54
7.2 Hamiltonoperatoren für Atome	56
7.3 Die Hartree-Fock Näherung	60
7.4 Das Orbitalmodell	62
8 Die Gruppen $SO(3)$, $SU(2)$ und ihre Darstellungen (Autor: Jonas Lampart)	66
9 Lösungsvorschläge zu einigen Übungsaufgaben	68

Vorbemerkungen: Kapitel 1 bis 4 enthalten den Stoff der ersten beiden Tage einer einwöchigen Fortbildung für Mathematik- und Physiklehrer zu den mathematischen Grundlagen der Quantenmechanik. Der Schwerpunkt liegt auf einer klaren Darstellung der Struktur der Theorie, und zwar sowohl der mathematischen als auch der physikalischen Aspekte. Es werden aber weder konkrete physikalische Beispiele gerechnet, noch werden die mathematischen Grundlagen aus der Funktionalanalysis systematisch entwickelt. Zu diesen Themen gibt es eine ganze Reihe von Standardwerken und ich kann beispielsweise das Physik-Lehrbuch zur Quantenmechanik von Franz Schwabl [1] und die Standardreihe zu den mathematischen Methoden der Quantenmechanik von Michael Reed und Barry Simon [2] empfehlen.

Thema des dritten Tages der Fortbildung waren die Bohmsche Mechanik und die Rolle des Zufalls in der Quantenmechanik. Dazu hat Prof. Detlef Dürr von der LMU München vorgetragen. Ich habe im Skript in Abschnitt 5.1 nur einige Bemerkungen und Referenzen zur Bohmschen Mechanik gesammelt. Am Donnerstag hat Herr Dustin Lazarovici (LMU München) zu den Themen Symmetrie, Spin, EPR-Bell und Nichtlokalität vorgetragen. Am Freitag hat Herr Jonas Lampart (Uni Tübingen) eine Einführung in die quantenmechanische Beschreibung von Atomen gegeben. Im Nachgang haben Herr Lazarovici und Herr Lampart Teile ihrer Beiträge zur Fortbildung jeweils in den Kapiteln 6 bzw. 7 und 8 zusammengefasst.

Damit sollte klar sein, dass dieses Skript weder eine in sich abgeschlossene Abhandlung zum Thema *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik* darstellt, noch eine vollständige Wiedergabe der in der Fortbildung behandelten Themen beinhaltet. Vielmehr soll es den Teilnehmern als Gedächtnisstütze dienen und möglichen anderen am Thema Interessierten als Anregung.

Herrn Dürr, Herrn Lampart und Herrn Lazarovici möchte ich an dieser Stelle ganz herzlich für ihre Beiträge zur Fortbildung und zu diesem Skript danken. Den Teilnehmern danke ich für ihr großes Interesse, die vielen Anregungen und Rückmeldungen und die insgesamt hervorragende Stimmung während der Woche in Oberwolfach. Auch den Mitarbeitern des Forschungsinstituts in Oberwolfach sei an dieser Stelle für die reibungslose Organisation und das gute Essen gedankt. Herrn Stefan Haag danke ich schließlich fürs Korrekturlesen dieses Skripts.

1 Klassische Mechanik von Punktteilchen

1.1 Newtonsche Mechanik

Der **Ortsraum** wird durch den dreidimensionalen euklidischen Raum \mathbb{R}^3 modelliert,

$$\text{Ortsraum} \cong \mathbb{R}^3.$$

Die Ortskurve oder Trajektorie $Q(t)$ eines Teilchens ist eine glatte durch die Zeit parametrisierte Kurve

$$Q : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3, t \mapsto Q(t).$$

Die Geschwindigkeit und die Beschleunigung zum Zeitpunkt $t \in \mathbb{R}$ sind die Vektoren

$$\dot{Q}(t) := \frac{d}{dt}Q(t) \quad \text{und} \quad \ddot{Q}(t) := \frac{d^2}{dt^2}Q(t).$$

Die möglichen Ortskurven für ein **einzelnes Teilchen** im äußeren Kraftfeld

$$F : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3 \quad (\text{oder} \quad F : \mathbb{R}^6 \rightarrow \mathbb{R}^3)$$

werden durch die Newtonsche Gleichung

$$m \ddot{Q}(t) = F(Q(t)) \quad \left(\text{oder} \quad F(Q(t), \dot{Q}(t)) \right) \quad (1)$$

bestimmt. Gleichung (1) ist eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung. Unter geeigneten Annahmen an F hat sie zu beliebigen Anfangsdaten $(Q(0), \dot{Q}(0)) = (Q_0, V_0)$ eindeutige globale Lösungen.

Um die Bewegung von $N \geq 2$ wechselwirkenden Teilchen zu beschreiben, fasst man die Orte $Q_1, \dots, Q_N \in \mathbb{R}^3$ zu einem Punkt

$$Q = (Q_1, \dots, Q_N) \in \mathbb{R}^{3N} \quad \text{im} \quad \mathbf{\text{Konfigurationsraum}} \quad \mathbb{R}^{3N}$$

von N Teilchen zusammen. Das Kraftfeld ist nun ein Vektorfeld auf dem Konfigurationsraum, $F : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{R}^{3N}$, und man schreibt die Newtonschen Gleichungen für die N Teilchen kompakt in der Form

$$\left. \begin{array}{l} m_1 \ddot{Q}_1(t) = F_1(Q_1(t), \dots, Q_N(t)) \\ \vdots \\ m_N \ddot{Q}_N(t) = F_N(Q_1(t), \dots, Q_N(t)) \end{array} \right\} \Leftrightarrow M \ddot{Q}(t) = F(Q(t)).$$

Die Newtonsche Gleichung liefert nun mögliche Trajektorien $Q(t)$ im Konfigurationsraum \mathbb{R}^{3N} . Eine einzelne solche Trajektorie $Q(t)$ im Konfigurationsraum enthält die Ortskurven $Q_j(t)$, $j = 1, \dots, N$, aller N Teilchen.

1 Beispiel. Newtonsche Gravitation

Für N gravitierende Teilchen hat das Kraftfeld $F : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{R}^{3N}$ die Form

$$F_j(q_1, \dots, q_N) = \sum_{i \neq j} m_i m_j \frac{q_i - q_j}{|q_i - q_j|^3} = -\nabla_{q_j} V(q_1, \dots, q_N)$$

bzw. kurz

$$F(q) = -\nabla V(q),$$

wobei das Gravitationspotential V gegeben ist durch

$$V : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{R}, \quad q \mapsto V(q) = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{i \neq k} \frac{m_i m_k}{|q_i - q_k|}.$$

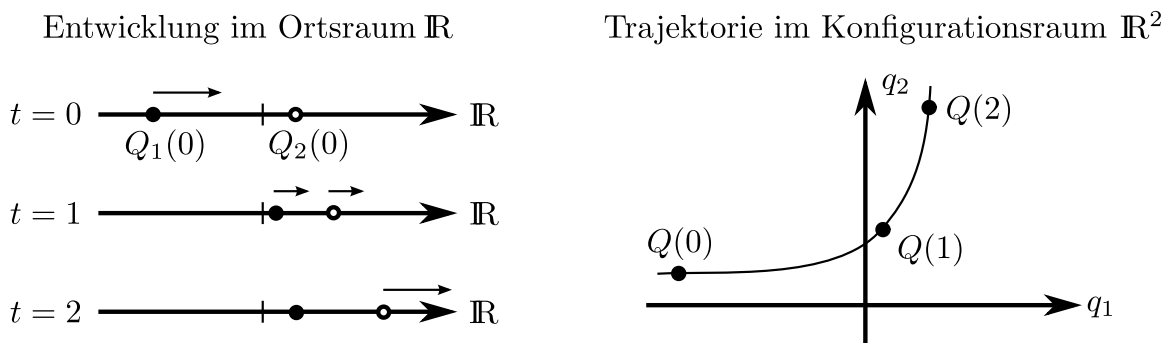
Zur Notation sei bemerkt, dass wir die Koordinaten im Konfigurationsraum mit kleinen Buchstaben $q = (q_1, \dots, q_n)$ bezeichnen, während wir für die tatsächlichen Orte der Teilchen und ihre Bahnkurven große Buchstaben $Q(t) = (Q_1(t), \dots, Q_N(t))$ verwenden.

2 Bemerkung. Zur Interpretation

Eine „Interpretation“ der Newtonschen Mechanik wird normalerweise nicht für nötig erachtet und das aus gutem Grund. Hat man zu gegebenen Anfangsdaten (Q_0, V_0) Lösungen der Gleichung gefunden (sei es analytisch, näherungsweise oder numerisch), so ist klar, was diese physikalisch bedeuten. Sie beschreiben die Ortskurven der Teilchen, z.B. Planeten oder Billardkugeln, und es ist zumindest im Prinzip klar, wie ein Vergleich der Bahnen $Q : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{3N}$ aus dem mathematischen Modell mit den empirisch beobachteten Bahnen auszusehen hat. Man sagt auch, die klassische Mechanik hat eine primitive Ontologie.

3 Beispiel. Darstellung eines einfachen Streuprozesses im Konfigurationsraum

Um ein Gefühl für das Konzept des Konfigurationsraums zu bekommen, skizzieren wir die Streuung zweier sich abstoßender Teilchen, die jeweils im Ortsraum \mathbb{R}^1 leben:



1.2 Hamiltonsche Mechanik

Man kann ganz allgemein jede gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung auf dem \mathbb{R}^n in eine Gleichung erster Ordnung auf dem \mathbb{R}^{2n} umschreiben, indem man die Geschwindigkeiten als Variablen hinzunimmt. Im Fall der Newtonschen Mechanik geht man daher vom

Konfigurationsraum \mathbb{R}^{3N} über zum

Phasenraum \mathbb{R}^{6N} mit $(q, p) = (q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) \in \mathbb{R}^{6N}$.

Statt der Geschwindigkeiten verwendet man aus strukturellen Gründen die Impulse $p_j = m_j v_j$.

Die **Hamiltonfunktion**

$$H : \mathbb{R}^{6N} \rightarrow \mathbb{R}, \quad (q, p) \mapsto H(q, p) = \frac{1}{2} |M^{-1/2} p|^2 + V(q) = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2m_j} |p_j|^2 + V(q)$$

ist eine reellwertige Funktion auf dem Phasenraum, deren symplektischer Gradient ein Vektorfeld auf dem Phasenraum erzeugt. Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen sind genau die Differentialgleichung erster Ordnung zu diesem Vektorfeld,

$$\text{(Ham)} \quad \left. \begin{aligned} \dot{Q}(t) &= \frac{\partial H}{\partial p}(Q(t), P(t)) = M^{-1} P(t) \\ \dot{P}(t) &= -\frac{\partial H}{\partial q}(Q(t), P(t)) = -\nabla V(Q(t)) \end{aligned} \right\} \text{ oder kurz } \dot{Z}(t) = I \nabla H(Z(t))$$

mit $z = (q, p)$ und $I = \begin{pmatrix} 0 & \text{id} \\ -\text{id} & 0 \end{pmatrix}$. Die Lösungen von (Ham) erfüllen offenbar die Newtonsche Gleichung und umgekehrt:

$$M \frac{d}{dt} \dot{Q}(t) = \frac{d}{dt} P(t) = -\nabla V(Q(t)).$$

Die Hamiltonschen Gleichungen sind eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung. Die Wahl der Anfangsdaten $Z(0) = (Q(0), P(0))$ legt die Lösung $Z(t) = (Q(t), P(t))$ für alle Zeiten fest.

Die physikalische Vorstellung ist nun folgende: Die Physik eines Systems aus N Teilchen wird durch Angabe der Hamiltonfunktion (auch Energiefunktion) vollständig beschrieben. Die verschiedenen Lösungen der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen entsprechen genau den möglichen Realisierungen des Systems.

Auch hier ist die „Interpretation“ unproblematisch. Jede Lösung enthält insbesondere auch die Orte aller Teilchen zu allen Zeiten und damit weiß man Alles was es über „Teilchen“ zu wissen gibt. Allerdings sind die genauen Orte aller Teilchen manchmal deutlich mehr als man eigentlich wissen möchte. Deshalb führt man vergrößernde Funktionen auf dem Phasenraum ein, deren Werte einen besonders interessieren. Diese Funktionen nennt man dann auch „physikalische Größen“ oder „physikalische Observable“. Beispiele sind

$$\begin{aligned} \text{Gesamtenergie} &\cong E : \mathbb{R}^{6N} \rightarrow \mathbb{R}, \quad (q, p) \mapsto E(q, p) = H(q, p), \\ \text{Massenschwerpunkt} &\cong S : \mathbb{R}^{6N} \rightarrow \mathbb{R}^3, \quad (q, p) \mapsto S(q, p) = \frac{1}{\sum_{j=1}^N m_j} \sum_{j=1}^N m_j q_j, \\ \text{Gesamtimpuls} &\cong \Pi : \mathbb{R}^{6N} \rightarrow \mathbb{R}^3, \quad (q, p) \mapsto \Pi(q, p) = \sum_{j=1}^N p_j, \\ \text{Mittlere kinetische Energie} &\cong T : \mathbb{R}^{6N} \rightarrow \mathbb{R}, \quad (q, p) \mapsto T(q, p) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{|p_j|^2}{2m_j}. \end{aligned}$$

Diese Größen spielen aus verschiedenen Gründen oft eine besondere Rolle. Beispielsweise ist die Gesamtenergie in autonomen Systemen (d.h. H hängt nicht von der Zeit ab) erhalten: Es gilt für jede Lösung $Z(t)$ der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen, dass

$$H(Z(t)) = H(Z(0)) \quad \text{für alle } t \in \mathbb{R}.$$

Ist H invariant unter Translationen des Raumes, d.h.

$$H(q_1 + a, q_2 + a, \dots, q_N + a, p) = H(q, p) \quad \text{für alle } a \in \mathbb{R}^3,$$

so ist der Gesamtimpuls Π erhalten. Die mittlere kinetische Energie wiederum ist in großen Systemen mit sehr vielen Teilchen eine der sehr leicht zugänglichen Größen: Sie entspricht in der statistischen Physik (bis auf einen konstanten Faktor) der Temperatur eines Systems.

Es sei nochmals betont, dass beispielsweise Energie und Impuls als Erhaltungsgrößen sehr hilfreich sind, sowohl beim Lösen der Bewegungsgleichungen, als auch beim qualitativen Verständnis der Dynamik. Sie sind aber (in der klassischen Mechanik) keine unabhängigen physikalischen Größen sondern Funktionen der Orte. Ihre besondere Rolle kommt erst durch die spezielle Form der Bewegungsgleichungen zustande.

Übungsaufgabe 1: Zeigen Sie die obigen Aussagen über die Erhaltung der Energie und des Gesamtimpulses mit Hilfe der Hamiltonschen Gleichungen

$$\dot{Q}(t) = \frac{\partial H}{\partial p}(Q(t), P(t)), \quad \dot{P}(t) = -\frac{\partial H}{\partial q}(Q(t), P(t)).$$

2 Wellenfunktion und Schrödingergleichung

2.1 Die Wellenfunktion

In der Quantenmechanik wird ein System aus N Teilchen nicht mehr durch eine Kurve $Q(t)$ im Konfigurationsraum, also durch die Ortskurven $Q_1(t), \dots, Q_N(t)$ aller Teilchen beschrieben, sondern durch die sogenannte **Wellenfunktion** $\psi(t)$. Die Wellenfunktion $\psi(t)$ ist für jeden festen Zeitpunkt $t \in \mathbb{R}$ eine komplexwertige Funktion auf dem Konfigurationsraum, also

$$\psi(t) : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{C} \quad \text{bzw.} \quad \psi : \mathbb{R}_t \times \mathbb{R}_q^{3N} \rightarrow \mathbb{C}.$$

Es ist allerdings nicht mehr offensichtlich, was das mathematische Objekt ψ mit unserer Erfahrungswelt zu tun hat. Jetzt brauchen wir eine Vorschrift, welche die Größe ψ aus unserem mathematischen Modell mit den zu beschreibenden Phänomenen in Zusammenhang bringt.

Bornsche statistische Regel: *Das Betragsquadrat $|\psi(t, q)|^2$ der Wellenfunktion ist die Dichte einer Wahrscheinlichkeitsverteilung auf dem Konfigurationsraum:*

Hat ein System zum Zeitpunkt t die Wellenfunktion $\psi(t, x)$, so ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich die Teilchenorte $(Q_1(t), \dots, Q_N(t))$ in einem Gebiet $\Lambda \subset \mathbb{R}^{3N}$ des Konfigurationsraums befinden, gegeben durch

$$P((Q_1(t), \dots, Q_N(t)) \in \Lambda) = \mathbb{P}^{\psi(t)}(\Lambda) := \int_{\Lambda} |\psi(q_1, \dots, q_N)|^2 dq^{3N}.$$

Die Wellenfunktion ψ liefert also die gemeinsame Verteilung der Teilchenorte.

Damit diese Interpretation Sinn macht, muss

$$\int_{\mathbb{R}^{3N}} |\psi(t, q_1, \dots, q_N)|^2 dq^{3N} = 1 \quad \text{für alle } t \in \mathbb{R}$$

gelten.

Einschub zu komplexen Zahlen: Den Körper der komplexen Zahlen $\mathbb{C} = \{(x, y) | x, y \in \mathbb{R}\}$ stellt man sich am besten als Zahlenebene vor. Die Addition von komplexen Zahlen entspricht der Addition von Vektoren im \mathbb{R}^2 , die Multiplikation diskutieren wir weiter unten. Statt $z = (x, y)$ schreibt man üblicherweise $z = x + iy$ im Sinne von $z = (x, 0) + (0, y) = 1x + iy$, wobei $i = (0, 1)$ die imaginäre Einheit heißt. Für $z = x + iy \in \mathbb{C}$ heißt $x = \text{Re}(z)$ der Realteil von z , $y = \text{Im}(z)$ der Imaginärteil von z und $r = |z| = \sqrt{x^2 + y^2}$ der Betrag von z . Die Multiplikation von komplexen Zahlen ergibt sich aus den Regeln der Multiplikation reeller Zahlen zusammen mit der Vorschrift $i^2 = -1$:

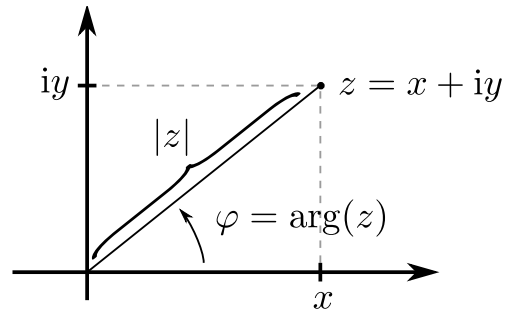
$$z_1 z_2 = (x_1 + iy_1)(x_2 + iy_2) = (x_1 x_2 - y_1 y_2) + i(x_1 y_2 + y_1 x_2).$$

In Polardarstellung schreibt man auch

$$z = r e^{i\varphi} \quad \text{wobei } r \in [0, \infty) \text{ und } \varphi \in \mathbb{R}.$$

Das Argument $\varphi = \arg(z)$ ist für $z \neq 0$ nur modulo 2π eindeutig bestimmt, denn es gilt $e^{i2\pi} = 1$ und somit

$$e^{i(\varphi+2\pi)} = e^{i\varphi} e^{i2\pi} = e^{i\varphi}.$$



Geometrisch entspricht die Multiplikation komplexer Zahlen einer Drehstreckung:

$$r_1 e^{i\varphi_1} r_2 e^{i\varphi_2} = r_1 r_2 e^{i(\varphi_1 + \varphi_2)}.$$

Die Beträge werden multipliziert (Streckung) und die Winkel addiert (Drehung). Die Multiplikation mit i entspricht beispielsweise einer Drehung um $\pi/2$ im positiven Sinne.

Schließlich definiert man die komplexe Konjugation als die Abbildung $z = x + iy \mapsto \bar{z} := x - iy$ oder in Polardarstellung $z = e^{i\varphi} \mapsto \bar{z} = e^{-i\varphi}$.

2.2 Die Schrödingergleichung

Die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion wird durch die Schrödingergleichung bestimmt:

$$(SG) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, q) = - \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_j} \Delta_{q_j} \psi(t, q) + V(q) \psi(t, q) =: (\hat{H}\psi)(t, q).$$

Die Schrödingergleichung ist eine lineare partielle Differentialgleichung. Der sogenannte **Hamiltonoperator**

$$\hat{H} = - \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_j} \Delta_{q_j} + V(q)$$

enthält den Laplaceoperator Δ , einen Differentialoperator zweiter Ordnung und die Multiplikation mit dem reellen Potential $V(q)$.

Einschub zum Laplaceoperator: Es bezeichnet Δ_{q_j} den dreidimensionalen Laplaceoperator bezüglich der Koordinaten des j -ten Teilchens. Der Laplaceoperator auf hinreichend glatten Funktionen $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ ist definiert durch

$$\Delta f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}, \quad x \mapsto (\Delta f)(x) := \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}(x).$$

Man beachte, dass x_i in $x = (x_1, \dots, x_n)$ die i -te Komponente von $x \in \mathbb{R}^n$ bezeichnet, also $x_i \in \mathbb{R}$, während in der Konfigurationsraumschreibweise q_j in $q = (q_1, \dots, q_N)$ den Ort $q_j \in \mathbb{R}^3$ des j -ten Teilchens bezeichnet. Im Falle $n = 1$ ist Δ einfach die zweite Ableitung,

$$(\Delta f)(x) = \frac{d^2 f}{dx^2}(x) = f''(x).$$

Geometrisch ist $f''(x)$ bekanntlich die Krümmung des Funktionsgraphen an der Stelle x . In höheren Dimensionen ist $(\Delta f)(x)$ dann die Summe der Krümmungen entlang der Koordinatenrichtungen, also bis auf einen Faktor die „mittlere Krümmung“.

Um zumindest ein wenig Intuition für die Rolle des Laplaceoperators in der Gleichung zu bekommen, betrachten wir kurz einige physikalische Gleichungen, die den Laplaceoperator enthalten, in einer Dimension:

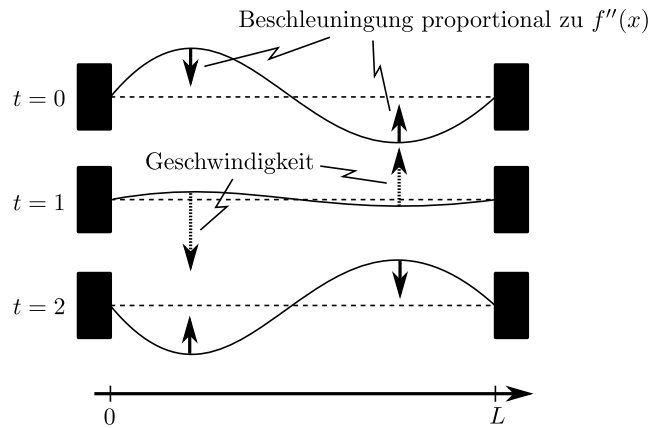
Die Wellengleichung: Die Gleichung für die Auslenkung $f(t, x) \in \mathbb{R}$ einer schwingende Saite der Länge L ist die Wellengleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} f(t, x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(t, x)$$

mit Randbedingung

$$f(t, 0) = f(t, L) = 0.$$

Die Beschleunigung der Saite am Ort x ist also proportional zur Krümmung an dieser Stelle. Deshalb schwingt die Saite, siehe Bild.



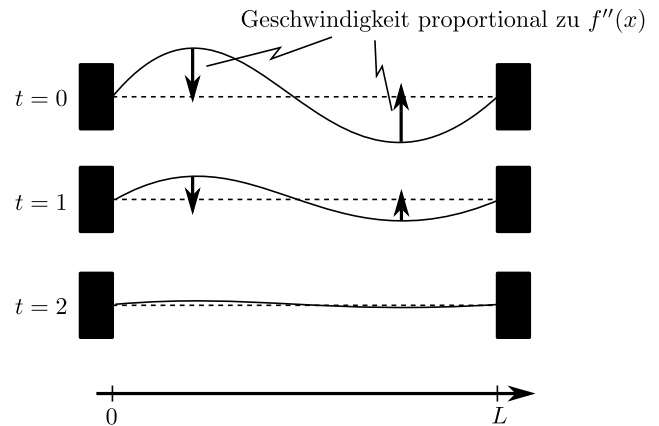
Die Wärmeleitungsgleichung: Die Gleichung für die Temperatur $f(t, x)$ in einem Draht der Länge L , dessen Temperatur an den Enden auf 0 gehalten wird, ist die Wärmeleitungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(t, x)$$

mit Randbedingung

$$f(t, 0) = f(t, L) = 0.$$

Die „Geschwindigkeit“, also die Rate, mit der sich die Temperatur am Ort x ändert, ist jetzt proportional zur Krümmung an dieser Stelle. Deshalb strebt die Temperaturverteilung dem konstanten Wert $f(x) = 0$ entgegen.



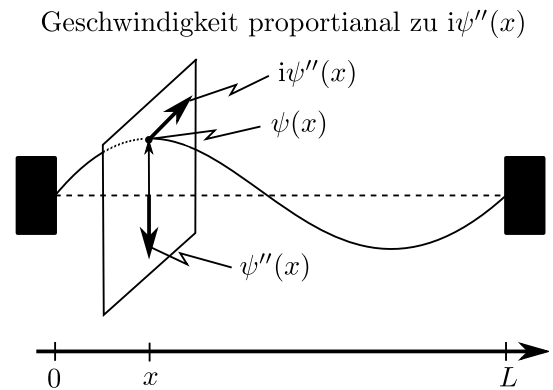
Die Schrödingergleichung: Die Schrödingergleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = i \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(t, x)$$

mit Randbedingung

$$\psi(t, 0) = \psi(t, L) = 0$$

beschreibt ein Teilchen in einer Dimension in einem Kasten. Sie enthält wie die Wärmeleitungsgleichung nur eine Zeitableitung, führt aber wegen des Faktors i dennoch zu „Wellenverhalten“ der Lösungen. Denn ψ



ist nun komplexwertig, was wir uns geometrisch auch als \mathbb{R}^2 -wertig vorstellen können. Die komplexe Ebene ist am Punkt x in der Zeichnung orthogonal zur einen Raumrichtung angedeutet. Und die Rate mit der sich $\psi(x)$ ändert ist zwar betragsmäßig proportional zur Krümmung, wegen des Faktors i aber orthogonal zu $\psi''(x)$ und im Bild auch orthogonal zu $\psi(x)$. Im Allgemeinen ändern sich deshalb sowohl das Argument als auch der Betrag von $\psi(t, x)$ zeitlich.

Nun zurück zur Schrödingergleichung (SG) für die Wellenfunktion eines Systems aus N Teilchen. Der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = - \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_j} \Delta_{q_j} + V(q)$$

hat seinen Namen wegen der Ähnlichkeit zur klassischen Hamiltonfunktion

$$H(q, p) = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2m_j} |p_j|^2 + V(q).$$

Manchmal spricht man davon, dass $\hat{H} = H(q, -i\hbar\nabla_q)$ die Quantisierung der klassischen Hamiltonfunktion ist, wobei man die Impulsvariablen nun durch den Impulsoperator $\hat{p} = -i\hbar\nabla_q$

ersetzt hat. Konzeptionell ist die Quantisierung einer klassischen Theorie aber ein rein formaler Akt, da ja die Quantenmechanik die (momentan) fundamentale physikalische Theorie ist, aus der die klassische Mechanik in geeigneten Grenzfällen folgen sollte.

Wir besprechen zunächst einige grundlegende strukturelle Eigenschaften der Schrödingergleichung. Die Linearität der Schrödingergleichung legt es nahe, ψ als Vektor in einem geeigneten Vektorraum von komplexwertigen Funktionen aufzufassen. Die Interpretation von $|\psi(t, \cdot)|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte erfordert weiterhin

$$\int_{\mathbb{R}^{3N}} |\psi(t, q)|^2 dq^{3N} = 1 \quad \text{für alle } t \in \mathbb{R}. \quad (2)$$

Daher ist der natürliche Raum für die Lösungstheorie der Schrödingergleichung der Vektorraum der quadratintegrierbaren Funktionen

$$L^2(\mathbb{R}^n) := \left\{ f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C} \mid f \text{ ist messbar und } \int |f(x)|^2 dx^n < \infty \right\} / \text{Gleichheit fast überall.}$$

Man beachte, dass die Vektorraumeigenschaft nicht offensichtlich ist.

Auf dem Raum $L^2(\mathbb{R}^n)$ ist ein Skalarprodukt

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : L^2 \times L^2 \rightarrow \mathbb{C}, \quad \langle f, g \rangle := \int \overline{f(x)} g(x) dx^n$$

definiert, welches wiederum eine Norm induziert,

$$\|f\|_{L^2} := \sqrt{\langle f, f \rangle} = \sqrt{\int |f(x)|^2 dx^n}.$$

Normierte Vektorräume, deren Norm auf diese Weise durch ein Skalarprodukt gegeben ist, nennt man Prä-Hilberträume. Sind sie auch noch vollständig in dieser Norm, so heißen sie **Hilberträume**. Da $L^2(\mathbb{R}^n)$ bezüglich der oben definierten Norm vollständig ist, handelt es sich bei $L^2(\mathbb{R}^n)$ um einen Hilbertraum.

Den Hamiltonoperator \hat{H} würden wir nun gerne als eine lineare Abbildung von L^2 in sich selbst auffassen. Allerdings folgt aus $f \in L^2$ nicht $\Delta f \in L^2$, wie man sich an einfachen Beispielen leicht klarmacht. Daher schränkt man \hat{H} auf einen dichten Unterraum $D(\hat{H}) \subset L^2(\mathbb{R}^n)$, den sogenannten Definitionsbereich, ein und

$$\hat{H} : D(\hat{H}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$$

ist eine lineare Abbildung zwischen Vektorräumen. Die Schrödingergleichung wird dann zu einer „gewöhnlichen“ Differentialgleichung für die $D(\hat{H})$ -wertige Funktion $\psi : \mathbb{R}_t \rightarrow D(\hat{H})$,

$$i \frac{d}{dt} \psi(t) = \hat{H} \psi(t). \quad (3)$$

(Ab jetzt setzen wir aus Gründen der Übersichtlichkeit $\hbar = m = 1$.) Wäre $L^2(\mathbb{R}^n)$ endlichdimensional, so könnte man \hat{H} nach Wahl einer Basis als Matrix schreiben und die Lösung von (3) wäre durch

$$\psi(t) = e^{-i\hat{H}t} \psi(0)$$

mit $e^{-i\hat{H}t} := \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-i\hat{H}t)^j}{j!}$ gegeben.

Tatsächlich kann man dem Ausdruck $e^{-i\hat{H}t}$ auch im Falle des Hamiltonoperators Sinn geben (mit erheblichem technischen Aufwand), falls dieser selbstadjungiert ist, d.h. zumindest formal

$$\langle \psi, \hat{H}\phi \rangle =: \langle \hat{H}^*\psi, \phi \rangle = \langle \hat{H}\psi, \phi \rangle \quad \text{für alle } \phi \in D(\hat{H}), \psi \in D(\hat{H}^*). \quad (4)$$

Die erste Gleichung definiert hier den adjungierten Operator und die zweite Gleichung zusammen mit $D(\hat{H}) = D(\hat{H}^*)$ drückt die Selbstadjungiertheit $\hat{H} = \hat{H}^*$ aus. Wir werden später darauf zurückkommen, wollen aber zunächst anhand einer im Moment formalen Rechnung zeigen, warum die jetzt eingeführte Sichtweise auf die Schrödingergleichung sehr nützlich ist. Die physikalische Interpretation erfordert (2). Aus der Form (3) der Schrödingergleichung folgt aber sofort, dass sich das Integral über $|\psi(t)|^2$ unter der Zeitentwicklung nicht ändert,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int |\psi(t, x)|^2 dx &= \frac{d}{dt} \|\psi(t)\|^2 = \frac{d}{dt} \langle \psi(t), \psi(t) \rangle = \frac{d}{dt} \langle e^{-i\hat{H}t}\psi(0), e^{-i\hat{H}t}\psi(0) \rangle \\ &= \langle -i\hat{H}\psi(t), \psi(t) \rangle + \langle \psi(t), -i\hat{H}\psi(t) \rangle \\ &= i \left(\langle \hat{H}\psi(t), \psi(t) \rangle - \langle \psi(t), \hat{H}\psi(t) \rangle \right) \\ &\stackrel{(4)}{=} i \left(\langle \psi(t), \hat{H}\psi(t) \rangle - \langle \psi(t), \hat{H}\psi(t) \rangle \right) \\ &= 0, \end{aligned}$$

und wir somit die Normierung lediglich zum Zeitpunkt 0 fordern müssen. Wir haben hier verwendet, dass das Skalarprodukt im ersten Argument anti-linear und im zweiten Argument linear ist, d.h. insbesondere $\langle z\psi, \phi \rangle = \bar{z}\langle \psi, \phi \rangle$ und $\langle \psi, z\phi \rangle = z\langle \psi, \phi \rangle$ für $z \in \mathbb{C}$ gilt.

4 Bemerkung. Eine lineare Bijektion $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ auf einem Hilbertraum \mathcal{H} die isometrisch ist, also

$$\|U\psi\| = \|\psi\| \quad \text{für alle } \psi \in \mathcal{H}$$

erfüllt, heißt unitär. Der Lösungsoperator $e^{-i\hat{H}t} : L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ der Schrödingergleichung ist also für alle $t \in \mathbb{R}$ unitär.

Wir wollen noch nachrechnen, dass

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\Delta_x + V(x) \quad \text{auf } D(\hat{H}) \subset L^2(\mathbb{R}^n)$$

wirklich selbstadjungiert ist. Für den Laplaceoperator finden wir mit zweimaliger partieller Integration

$$\begin{aligned} \langle \psi, \Delta\phi \rangle &= \int_{\mathbb{R}^n} \overline{\psi(x)} \Delta\phi(x) dx^n = \int dx_1 \cdots \int dx_n \overline{\psi(x_1, \dots, x_n)} \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \phi(x_1, \dots, x_n) \\ &= -\sum_{j=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\psi(x_1, \dots, x_n)} \frac{\partial}{\partial x_j} \phi(x_1, \dots, x_n) \\ &= \sum_{j=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \overline{\psi(x_1, \dots, x_n)} \phi(x_1, \dots, x_n) \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \overline{\Delta\psi(x)} \phi(x) dx^n = \langle \Delta\psi, \phi \rangle, \end{aligned}$$

wobei wir angenommen haben, dass die Randterme beim partiellen Integrieren verschwinden. Streng genommen zeigt die Rechnung lediglich, dass der Operator Δ auf der Menge derjenigen Funktionen, für welche die partielle Integration so funktioniert, symmetrisch ist. Das soll uns aber für den Moment genügen. Für den Multiplikationsoperator V ergibt sich direkt

$$\langle \psi, V\phi \rangle = \int \overline{\psi(x)} V(x)\phi(x) dx = \int \overline{V(x)\psi(x)} \phi(x) dx = \langle V\psi, \phi \rangle,$$

da für reellwertige Funktionen $\overline{V(x)} = V(x)$ gilt.

2.3 Die Kontinuitätsgleichung

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(t, x)|^2$ zu einer Lösung $\psi(t) = e^{-i\hat{H}t}\psi(0)$ der Schrödingergleichung ist im Allgemeinen nicht zeitlich konstant. Sie „springt“ aber auch nicht umher, sondern ändert sich stetig und fließt in gewisser Weise durch den Konfigurationsraum. Genauer gesagt kann man die Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit auf eine lokale Kontinuitätsgleichung für einen geeigneten Wahrscheinlichkeitsstrom zurückführen. Das Stromvektorfeld j^ψ zu einer (differenzierbaren) Wellenfunktion ψ definiert man durch

$$j^\psi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad x \mapsto j^\psi(x) := \text{Im} \left(\overline{\psi(x)} \nabla_x \psi(x) \right)$$

und die Wahrscheinlichkeitsdichte ρ^ψ wie gehabt durch

$$\rho^\psi : \mathbb{R}^n \rightarrow [0, \infty), \quad x \mapsto \rho^\psi(x) := |\psi(x)|^2.$$

Für jede hinreichend differenzierbare Lösung $\psi(t) = e^{-i\hat{H}t}\psi(0)$ der Schrödingergleichung erfüllen dann $\rho(t, x) := \rho^{\psi(t)}(x)$ und $j(t, x) := j^{\psi(t)}(x)$ die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t, x) + \text{div} j(t, x) = 0. \tag{5}$$

Die Divergenz eines Vektorfeldes $v : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ ist durch

$$\text{div} v : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \quad x \mapsto \text{div} v(x) := \sum_{j=1}^n \frac{\partial v_j}{\partial x_j}(x)$$

gegeben. Mit dem Gaußschen Satz liefert die Integration von (5) über ein beschränktes Gebiet $\Lambda \subset \mathbb{R}^n$ mit glattem Rand $\partial\Lambda$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Lambda} \rho(t, x) dx = - \int_{\Lambda} \text{div} j(t, x) dx \stackrel{\text{Gauß}}{=} - \int_{\partial\Lambda} j(t, x) \cdot dS,$$

wobei das Integral auf der rechten Seite den nach außen gerichteten Fluss des Vektorfeldes $j(t, x)$ durch den Rand von Λ bezeichnet. Das heißt, die zeitliche Änderung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit in einem Gebiet Λ des Konfigurationsraums ist durch den Wahrscheinlichkeitsstrom durch den Rand des Gebietes bestimmt.

Schreibt man die Wellenfunktion in Polarkoordinaten

$$\psi(t, x) = \sqrt{\rho^{\psi(t)}(x)} e^{iS(t, x)},$$

wobei man für differenzierbares ψ zumindest in Umgebungen von Punkten mit $\rho^{\psi(t)}(x) \neq 0$ auch die reellwertige Phasenfunktion $S(t, x)$ differenzierbar wählen kann, so hat das Stromvektorfeld die sehr einfache Form

$$j^{\psi(t)}(x) = \operatorname{Im} \left(\overline{\psi(x)} \nabla_x \psi(x) \right) = \rho^{\psi(t)}(x) \nabla S(t, x).$$

Die Dichte $\rho^{\psi(t)}$ strömt also entlang des Geschwindigkeitsfeldes $\nabla S(t, x)$, gegeben durch den Gradienten der Phase von $\psi(t)$.

Übungsaufgabe 2: Zeigen Sie (5) für jede hinreichend differenzierbare Lösung der Schrödingergleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = -\frac{1}{2} \Delta_x \psi(t, x) + V(x) \psi(t, x).$$

Beachten Sie dazu, dass $\rho^{\psi}(x) = \overline{\psi(x)} \psi(x)$ und $j^{\psi}(x) = \frac{1}{2i} \left(\overline{\psi(x)} \nabla_x \psi(x) - \psi(x) \overline{\nabla_x \psi(x)} \right)$.

3 Fouriertransformation und die freie Schrödingergleichung

Für die freie Schrödingergleichung, d.h. die Schrödingergleichung ohne Potential, kann man die Lösungen explizit mit Hilfe der Fouriertransformation bestimmen. Das wollen wir im Folgenden etwas ausführen.

Wir suchen Lösungen $\psi : \mathbb{R}_t \times \mathbb{R}_x^n \rightarrow \mathbb{C}$ der Gleichung

$$i \partial_t \psi(t, x) = -\frac{1}{2} \Delta_x \psi(t, x).$$

Spezielle Lösungen erhält man durch einen Separationsansatz: Man sucht zunächst Lösungen der stationären Gleichung

$$-\frac{1}{2} \Delta_x \phi(x) = \lambda \phi(x) \quad \text{für } \lambda \in \mathbb{R}.$$

Diese liefern dann via $\psi(t, x) := e^{-i\lambda t} \phi(x)$ Lösungen der zeitabhängigen Gleichung. Die Eigenfunktionen des Laplaceoperators auf dem \mathbb{R}^n sind die sogenannten **ebenen Wellen**

$$\phi_k(x) = e^{ik \cdot x} = e^{i(k_1 x_1 + \dots + k_n x_n)} \quad \text{für } k \in \mathbb{R}^n,$$

da

$$-\frac{1}{2} \Delta_x \phi_k(x) = \frac{1}{2} (k_1^2 + \dots + k_n^2) e^{ik \cdot x} = \frac{1}{2} |k|^2 e^{ik \cdot x}.$$

Also haben wir auch eine erste Lösung für die freie Schrödingergleichung, die ebene Welle

$$\psi_k(t, x) := e^{-i \frac{|k|^2}{2} t} e^{ik \cdot x}.$$

Der zugehörige Strom ist

$$j^{\psi_k(t)}(x) = \operatorname{Im} \overline{\psi_k(t, x)} \nabla_x \psi_k(t, x) = \operatorname{Im}(ik) = k$$

und die zugehörige Dichte ist

$$\rho^{\psi_k(t)}(x) = |\psi_k(t, x)|^2 = 1$$

Die ebene Welle beschreibt also einen konstanten Strom mit Dichte 1 und Geschwindigkeit k . Damit ist aber

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\psi_k(t, x)|^2 dx = \infty$$

und die Wahrscheinlichkeitsinterpretation ist nicht anwendbar.

Um quadratintegrierbare Lösungen zu erhalten stellen wir zunächst fest, dass aufgrund der Linearität der Schrödingergleichung auch Linearkombinationen von Lösungen wieder Lösungen sind, also auch

$$\psi(t, x) = \int_{\mathbb{R}^n} \varrho(k) \psi_k(t, x) dk = \int_{\mathbb{R}^n} \varrho(k) e^{-i(\frac{k^2}{2}t - k \cdot x)} dk \quad (6)$$

für geeignetes $\varrho : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ wieder eine Lösung ist. Die Anfangsdaten $\psi(x, 0) = \psi_0(x)$ legen ϱ fest, da bei $t = 0$

$$\psi_0(x) = \int_{\mathbb{R}^n} \varrho(k) e^{ik \cdot x} dk \quad (7)$$

gelten muss.

3.1 Die Fouriertransformation

Die Darstellung (7) motiviert die folgende Definition, wobei

$$L^1(\mathbb{R}^n) := \left\{ f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C} \mid f \text{ ist messbar und } \int |f(x)| dx < \infty \right\} / \text{Gleichheit fast überall}$$

den Raum der integrierbaren Funktionen auf dem \mathbb{R}^n bezeichnet.

5 Definition. Fouriertransformation

Sei $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$, dann heißt

$$\hat{f}(k) = (\mathcal{F}f)(k) := \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-ik \cdot x} dx$$

die **Fouriertransformierte** von f und

$$\check{f}(k) = (\mathcal{F}^{-1}f) := \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{ik \cdot x} dx$$

die **Fourierrücktransformierte** von f .

Wir sammeln die für uns relevanten Eigenschaften der Fouriertransformation in folgendem Satz.

6 Satz. Eigenschaften der Fouriertransformation auf $L^2(\mathbb{R}^n)$

Die Fouriertransformation \mathcal{F} lässt sich eindeutig von $L^2(\mathbb{R}^n) \cap L^1(\mathbb{R}^n)$ zu einer linearen Bijektion

$$\mathcal{F}_2 : L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$$

fortsetzen. Die Inverse Abbildung \mathcal{F}_2^{-1} ist durch die eindeutige Fortsetzung von \mathcal{F}^{-1} gegeben. Weiterhin ist \mathcal{F}_2 und damit auch \mathcal{F}_2^{-1} isometrisch, d.h.

$$\|\mathcal{F}f\|_{L^2} = \|f\|_{L^2} \quad \text{für alle } f \in L^2(\mathbb{R}^d).$$

Die Fouriertransformation \mathcal{F}_2 ist somit eine unitäre Abbildung.

Den Beweis dieses Standardresultats können wir aus Zeitgründen nicht besprechen und verweisen beispielsweise auf Theorem IX.6 in [2]. Die Beweisstrategie ist es, alle Eigenschaften zunächst auf einem Raum „schöner Funktionen“ direkt nachzurechnen und dann die Ergebnisse über Dichtheitsargumente auf L^2 fortzusetzen.

7 Beispiel. Die Fouriertransformierte einer Gaußfunktion

Für $\sigma > 0$ sei

$$f_\sigma(x) := \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \in L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$$

die Gaußfunktion mit Breite σ , d.h. σ ist die Standardabweichung der Verteilung $|f_\sigma(x)|^2$. Dann ist mit der Substitution $y := \frac{x}{\sigma}$ und quadratischer Ergänzung

$$\begin{aligned} \hat{f}_\sigma(k) &= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\frac{x^2}{(2\sigma)^2}} e^{-ikx} dx = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-(y^2+2i\sigma yk)} dy \\ &= \left(\frac{2\sigma^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\sigma^2 k^2} \underbrace{\int_{\mathbb{R}} e^{-(y+i\sigma k)^2} dy}_{=\sqrt{\pi}} = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\sigma^2 k^2}. \end{aligned}$$

Die Fouriertransformierte liefert also eine Verteilung $|\hat{f}_\sigma(k)|^2$ mit Standardabweichung $\frac{1}{2\sigma}$. Das Produkt der Breiten ist mit $\sigma \frac{1}{2\sigma} = \frac{1}{2}$ also konstant.

Die für uns wichtige Rolle der Fouriertransformation ist, dass sie Differentialoperatoren in Multiplikationsoperatoren überführt. Das erlaubt es dann eine große Klasse von Funktionen in $L^2(\mathbb{R}^n)$ zu „differenzieren“, die nicht im ursprünglichen Sinne differenzierbar sind: Mit Satz 6 gilt für $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ mit $\hat{f} \in L^1(\mathbb{R}^n)$, dass

$$f(x) = (\mathcal{F}_2^{-1}\mathcal{F}_2f)(x) = (\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F}_2f)(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}(k) e^{ik \cdot x} dk,$$

und, falls auch $k_j \hat{f}(k) \in L^1(\mathbb{R}^n)$,

$$-i \frac{\partial}{\partial x_j} f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} k_j \hat{f}(k) e^{ik \cdot x} dk = (\mathcal{F}^{-1}k_j \mathcal{F}_2f)(x) = (\mathcal{F}_2^{-1}k_j \mathcal{F}_2f)(x).$$

Das legt nahe, auch für $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ mit $k_j \hat{f} \in L^2(\mathbb{R}^n)$ die Ableitung durch

$$-i \frac{\partial}{\partial x_j} f(x) := (\mathcal{F}_2^{-1} k_j \mathcal{F}_2 f)(x)$$

zu definieren. Man nennt

$$H^m(\mathbb{R}^n) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid (1 + |k|^2)^{m/2} \hat{f}(k) \in L^2(\mathbb{R}^n)\}$$

den m -ten Sobolevraum. Die Funktionen in H^m haben die Eigenschaft, dass man ihre Fouriertransformierte mit Polynomen in k_j der Ordnung m multiplizieren kann und immer noch eine quadratintegrale Funktion erhält.

Auf $H^2(\mathbb{R}^n)$ definiert man den Laplaceoperator analog durch

$$-\Delta_x f(x) := (\mathcal{F}_2^{-1} \sum_{j=1}^n |k_j|^2 \mathcal{F}_2 f)(x) = (\mathcal{F}_2^{-1} |k|^2 \mathcal{F}_2 f)(x).$$

3.2 Lösungstheorie der freien Schrödingergleichung

Zurück zur freien Schrödingergleichung. Fassen wir sie als Gleichung in L^2 auf,

$$i \frac{d}{dt} \psi(t) = -\frac{1}{2} \Delta_x \psi(t), \quad (8)$$

so liefert Fouriertransformation auf beiden Seiten

$$i \frac{d}{dt} (\mathcal{F}_2 \psi)(t, k) = \frac{1}{2} |k|^2 (\mathcal{F}_2 \psi)(t, k). \quad (9)$$

Die Lösung lässt sich direkt ablesen,

$$\hat{\psi}(t, k) = e^{-i \frac{1}{2} |k|^2 t} \hat{\psi}_0(k). \quad (10)$$

Man beachte, dass (8) bzw. (9) nur für Anfangsdaten $\psi_0 \in H^2(\mathbb{R}^n)$ definiert sind, die Lösungsformel (10) aber für alle $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}^n)$ Sinn macht.

8 Satz. Eindeutige globale Lösung der freien Schrödingergleichung

Für $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}^n)$ sei

$$\psi(t) := \mathcal{F}_2^{-1} e^{-i \frac{|k|^2}{2} t} \mathcal{F}_2 \psi_0. \quad (11)$$

Dann gilt $\|\psi(t)\|_{L^2} = \|\psi_0\|_{L^2}$. Falls $\psi_0 \in H^2(\mathbb{R}^n)$, so gilt $\psi(t) \in H^2(\mathbb{R}^n)$ und $\psi(t)$ löst die Schrödingergleichung (8) im L^2 -Sinne.

Für $\psi_0 \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ und $t \neq 0$ gilt die explizite Formel

$$\psi(t, x) = \frac{1}{(2\pi i t)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i \frac{|x-y|^2}{2t}} \psi_0(y) dy. \quad (12)$$

Beweis. Die Isometrie der Zeitentwicklung folgt aus der Isometrie der Fouriertransformation und aus $|e^{-i\frac{|k|^2}{2}t}| = 1$. Die Lösungseigenschaft von $\psi(t)$ für $\psi_0 \in H^2$ folgt aus der Definition des Laplaceoperators auf H^2 . Man rechnet direkt nach (**Übungsaufgabe 3**), dass die Formel (12) zumindest dann eine Lösung der Schrödingergleichung liefert, wenn man unter dem Integral differenzieren kann. Das kann man für eine in L^1 dichte Teilmenge tun. Man kommt auf die Formel, indem man in

$$\psi(t) = \mathcal{F}^{-1} e^{-i\frac{|k|^2}{2}t} \mathcal{F}\psi_0.$$

die beiden Fouriertransformationen als Integrale ausschreibt und die Integrationsreihenfolge vertauscht. \square

Zusammenfassend hat also der Hamiltonoperator $\hat{H}_0 = -\frac{1}{2}\Delta_x$ den Definitionsbereich $D(\hat{H}_0) = H^2(\mathbb{R}^n) \subset L^2(\mathbb{R}^n)$. Für $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}^n)$ ist die Lösung $\psi(t) = e^{-i\hat{H}_0 t}\psi_0$ der freien Schrödingergleichung per Definition durch (11) gegeben, für $\psi_0 \in H^2(\mathbb{R}^n)$ löst dieses $\psi(t)$ die Schrödingergleichung im L^2 -Sinne. Letzteres bedeutet, dass die Abbildung $\mathbb{R} \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$, $t \mapsto \psi(t)$, differenzierbar ist und beide Seiten von (8) als Elemente von $L^2(\mathbb{R}^n)$ übereinstimmen.

9 Bemerkung. Lösungstheorie der allgemeinen Schrödingergleichung

Eine analoge Lösungstheorie der Schrödingergleichung erhält man ganz allgemein für selbstadjungierte Hamiltonoperatoren \hat{H} mit Definitionsbereich $D(\hat{H}) \subset \mathcal{H}$ auf einem Hilbertraum \mathcal{H} : Es gibt eine eindeutige Familie von unitären Operatoren

$$e^{-i\hat{H}t} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H},$$

so, dass für $\psi_0 \in D(\hat{H})$ auch $\psi(t) \in D(\hat{H})$ gilt und $\psi(t)$ die Schrödingergleichung

$$i\frac{d}{dt}\psi(t) = \hat{H}\psi(t)$$

löst. Wegen $e^{-i\hat{H}t}e^{-i\hat{H}s} = e^{-i\hat{H}(t+s)}$ nennt man $e^{-i\hat{H}t}$ auch eine unitäre Gruppe.

10 Bemerkung. Das Zerfließen der Lösungen der freien Schrödingergleichung

Aus (12) ergibt sich sofort, dass die Lösungen der freien Schrödingergleichung für große Zeiten betragsmäßig klein werden,

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^n} |\psi(t, x)| \leq \frac{1}{(2\pi t)^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} |\psi_0(y)| dy = \frac{\|\psi_0\|_{L^1}}{(2\pi t)^{\frac{n}{2}}} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0.$$

Da die L^2 -Norm aber erhalten bleibt, bedeutet das, dass sich die Lösungen immer mehr „verbreitern“. Man spricht vom Zerfließen des Wellenpaketes. Im nächsten Abschnitt werden wir aber eine viel detailliertere Beschreibung des Langzeitverhaltens der Lösungen der freien Schrödingergleichung erhalten.

11 Bemerkung. Der wesentliche Träger der Wellenfunktion

Aus (12) folgert man auch, dass die Lösungen der freien Schrödingergleichung typischerweise als Träger den gesamten Raum \mathbb{R}^n haben. Der Träger einer Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ ist

$$\text{supp } f := \overline{\{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \neq 0\}} \subset \mathbb{R}^n,$$

also der Abschluss der Menge aller Punkte an denen f nicht Null ist. Denn das Integral auf der rechten Seite von (12) wird nur für sehr spezielle ψ_0 , und dann auch nur für diskrete Zeitpunkte t , für x in einer offenen Menge verschwinden. Damit ist auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $\mathbb{P}^{\psi(t)}(\Lambda) = \int_{\Lambda} |\psi(t, x)|^2 dx$ typischerweise auf keiner offenen Menge $\Lambda \subset \mathbb{R}^n$ exakt gleich Null. Andererseits gibt es zu jedem normierten $\psi \in L^2$ und zu jedem $\alpha < 1$ ein beschränktes Gebiet $\Lambda_\alpha \subset \mathbb{R}^n$ mit

$$\mathbb{P}^\psi(\Lambda_\alpha) = \int_{\Lambda_\alpha} |\psi(x)|^2 dx > \alpha.$$

Wählen wir beispielsweise $\alpha = 1 - 10^{-100}$, so können wir für die meisten Zwecke davon ausgehen, dass $|\psi(x)|^2$ innerhalb von Λ_α konzentriert ist und schreiben dafür

$$\int_{\Lambda_\alpha} |\psi(x)|^2 dx \approx 1 \quad \text{bzw.} \quad \int_{\mathbb{R}^n \setminus \Lambda_\alpha} |\psi(x)|^2 dx \approx 0.$$

Ein solches Gebiet werden wir als den wesentlichen Träger von ψ bezeichnen. Was ein akzeptabler Wert von α ist, hängt vom physikalischen Kontext ab.

3.3 Langzeitasymptotik der freien Schrödingergleichung

Mit Formel (12) haben wir eine explizite Formel für die Lösung $\psi(t, x)$ der freien Schrödingergleichung und damit auch für die Dichte der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Konfiguration des Systems für alle Zeiten: Für messbares $\Lambda \subset \mathbb{R}^{3N}$ ist ja nach der Bornschen Regel

$$P(Q(t) \in \Lambda) = \mathbb{P}^{\psi(t)}(\Lambda) = \int_{\Lambda} |\psi(t, q)|^2 dq.$$

Als nächstes möchten wir die „Geschwindigkeitsverteilung“ bestimmen. Da in der Quantenmechanik keine Trajektorien $Q(t)$ definiert sind, fragen wir nach der asymptotischen Geschwindigkeit für große Zeiten, welche wir mit Hilfe der Ortsverteilung im Sinne von

$$\text{Geschwindigkeit} = \frac{\text{zurückgelegte Strecke}}{\text{Zeit}}$$

durch

$$\begin{aligned} P(V_{\text{asympt}} \in \Lambda) &:= \lim_{t \rightarrow \infty} P\left(\frac{Q(t)}{t} \in \Lambda\right) = \lim_{t \rightarrow \infty} P(Q(t) \in t\Lambda) = \lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{P}^{\psi(t)}(t\Lambda) \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{t\Lambda} |\psi(t, q)|^2 dq \end{aligned}$$

definieren. Dass wir nicht genau im Ursprung starten spielt für die Asymptotik keine Rolle. Um einen einfachen Ausdruck für die Verteilung zu bekommen, zeigen wir zunächst folgendes Lemma.

12 Lemma. Asymptotik der Lösungen der freien Schrödingergleichung

Sei $\psi(t)$ die Lösung der freien Schrödingergleichung mit $\psi(0) = \psi_0 \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$, dann gilt

$$\psi(t, x) = \frac{e^{i\frac{x^2}{2t}}}{(it)^{\frac{n}{2}}} \widehat{\psi}_0\left(\frac{x}{t}\right) + r(t, x)$$

mit $\lim_{t \rightarrow \infty} \|r(t)\|_{L^2} = 0$.

Beweis. Es ist

$$\begin{aligned}
\psi(t, x) &= \frac{e^{i\frac{x^2}{2t}}}{(it)^{\frac{n}{2}}} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int e^{-i\frac{x}{t}y} \left(e^{i\frac{y^2}{2t}} + 1 - 1 \right) \psi_0(y) \, dy \\
&= \frac{e^{i\frac{x^2}{2t}}}{(it)^{\frac{n}{2}}} \left(\widehat{\psi}_0 \left(\frac{x}{t} \right) + \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \int e^{-i\frac{xy}{t}} \underbrace{\left(e^{i\frac{y^2}{2t}} - 1 \right)}_{=h(t,y)} \psi_0(y) \, dy \right) \\
&= \frac{e^{i\frac{x^2}{2t}}}{(it)^{\frac{n}{2}}} \left(\widehat{\psi}_0 \left(\frac{x}{t} \right) + \widehat{h} \left(t, \frac{x}{t} \right) \right)
\end{aligned}$$

und somit

$$r(t, x) = \frac{e^{i\frac{x^2}{2t}}}{(it)^{\frac{n}{2}}} \widehat{h} \left(t, \frac{x}{t} \right).$$

Für die L^2 -Norm des Restterms ergibt sich

$$\|r\|_{L^2}^2 = \int |r(t, x)|^2 \, dx = \frac{1}{t^n} \int \left| \widehat{h} \left(t, \frac{x}{t} \right) \right|^2 \, dx = \int \left| \widehat{h}(t, y) \right|^2 \, dy = \int |h(t, y)|^2 \, dy,$$

da die Fouriertransformation mit Satz 6 eine Isometrie bezüglich der L^2 -Norm ist. Nun konvergiert aber $h(t, y)$ für $t \rightarrow \infty$ punktweise gegen Null. Da $|h(t, y)|^2 \leq 4|\psi_0(y)|^2$, liefert der Satz über die dominierte Konvergenz, dass auch

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int |h(t, y)|^2 \, dy = 0.$$

□

13 Satz. Verteilung der asymptotischen Geschwindigkeit

Sei $\psi(t)$ die Lösung der freien Schrödingergleichung mit $\psi(0) = \psi_0 \in L^1(\mathbb{R}^n) \cap L^2(\mathbb{R}^n)$ und $\Lambda \subset \mathbb{R}^n$ messbar. Dann ist

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P \left(\frac{Q(t)}{t} \in \Lambda \right) := \lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{P}^{\psi(t)}(t\Lambda) = \int_{\Lambda} |\widehat{\psi}_0(p)|^2 \, dp.$$

Beweis. Aus Lemma 12 ergibt sich sofort

$$\int_{t\Lambda} |\psi(t, q)|^2 \, dq = \frac{1}{t^n} \int_{t\Lambda} \left| \widehat{\psi}_0 \left(\frac{q}{t} \right) \right|^2 \, dq + R(t) = \int_{\Lambda} |\widehat{\psi}_0(p)|^2 \, dp + R(t),$$

wobei mit den Bezeichnungen aus dem Beweis des Lemmas

$$\begin{aligned}
\lim_{t \rightarrow \infty} R(t) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{t\Lambda} |r(t, q)|^2 \, dx + \lim_{t \rightarrow \infty} 2\operatorname{Re} \left(\frac{1}{t^n} \int_{t\Lambda} \overline{\widehat{\psi}_0 \left(\frac{q}{t} \right)} \widehat{h} \left(t, \frac{q}{t} \right) \, dq \right) \\
&= \lim_{t \rightarrow \infty} 2\operatorname{Re} \left(\int_{t\Lambda} \overline{\widehat{\psi}_0(p)} \widehat{h}(t, p) \, dp \right)
\end{aligned}$$

ist. Für den ersten Summanden haben wir dort schon gezeigt, dass er im Limes $t \rightarrow \infty$ verschwindet. Mit der Cauchy-Schwarz Ungleichung bekommen wir schließlich

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left| \int_{t\Lambda} \overline{\widehat{\psi}_0(p)} \widehat{h}(t, p) \, dp \right| \leq \lim_{t \rightarrow \infty} \|\widehat{\psi}_0\|_{L^2} \|\widehat{h}(t)\|_{L^2} = 0.$$

□

14 Bemerkung. (a) Beachte, dass die Verteilung der asymptotischen Geschwindigkeit weder von der Wahl des Zeitnullpunktes noch von der Wahl des Ursprungs im Konfigurationsraum abhängt, da

$$|\widehat{\psi}(t, p)|^2 = |e^{-i\frac{p^2}{2}t} \widehat{\psi}_0(p)|^2 = |e^{ia \cdot p} \widehat{\psi}_0(p)|^2 = |\widehat{\psi}_0(p)|^2.$$

(b) Hätten wir die Masse m nicht gleich 1 gesetzt, müsste auf der linken Seite $P(\frac{mQ(t)}{t} \in \Lambda)$ stehen. Deshalb haben wir tatsächlich die „asymptotische Impulsverteilung“ berechnet.

(c) Der Operator $\hat{P} := -i\nabla_x$ heißt der Impulsoperator. Den „Erwartungswert eines Operators“ berechnet man in der Quantenmechanik mittels

$$\begin{aligned} \mathbb{E}^{\psi(t)}(\hat{P}) &:= \langle \psi(t), \hat{P}\psi(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} \overline{\psi(t, x)} (\hat{P}\psi)(t, x) \, dx = \int_{\mathbb{R}^n} \overline{\widehat{\psi}(t, p)} p \widehat{\psi}(t, p) \, dp \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} p |\widehat{\psi}(0, p)|^2 \, dp. \end{aligned}$$

Der quantenmechanische Erwartungswert des Impulsoperators ist also genau der Erwartungswert unsere asymptotischen Impulsverteilung.

4 Der Messformalismus der Quantenmechanik

Wir hatten im Abschnitt zur klassischen Physik festgestellt, dass sich in einem System aus N Teilchen die Werte aller „physikalischen Größen“ auf die Kenntnis der Orte $Q_1(t), \dots, Q_N(t)$ aller Teilchen zu allen Zeiten zurückführen lassen. Was man dort „physikalische Größen“ oder „Observable“ nennt, sind Funktionen auf dem Phasenraum, also insbesondere auch Funktionen der Trajektorien. Man sollte sich diesbezüglich auch klar machen, dass sich jede „Messung“ einer „Observable“ letztendlich auf die „Messung“ des Ortes von Irgendetwas (seien es Zeigerstellungen an Messgeräten, Tinte auf Papier, etc.) zurückführen lässt.

In der Quantenmechanik sollte das im Prinzip nicht anders sein. Die Verteilung der Orte aller Teilchen zu allen Zeiten gegeben durch die Lösung der Schrödingergleichung legt auch die Verteilung aller anderen „physikalischen Größen“ oder „Observablen“ fest. Beim Impuls im Sinne der asymptotischen Geschwindigkeit unter freier Dynamik haben wir das bereits gesehen. Um Vorhersagen für bestimmte Experimente zu machen, muss man im Prinzip das Experiment quantenmechanisch beschreiben, die Wellenfunktion nach Ablauf des Experimentes berechnen und daraus die Wahrscheinlichkeitsverteilung der möglichen Konfigurationen und somit der möglichen Ergebnisse berechnen. Das ist im Allgemeinen aber nicht wirklich praktikabel und daher hat sich ein in der Anwendung sehr praktischer Messformalismus der Quantenmechanik herausgebildet.

In Lehrbüchern zur Quantenmechanik findet man fast immer eine axiomatische Darstellung des Messformalismus. Wir wollen im Folgenden zunächst diese axiomatische Darstellung vorstellen, uns dann aber klar machen, dass sich dieser Formalismus (mit einem sehr wichtigen Vorbehalt!) im Sinne der oben erwähnten Modellierung von Experimenten leicht aus der Schrödingergleichung zusammen mit der Bornschen Regel herleiten lässt.

Das bedeutet aber, dass die folgenden Axiome der Quantenmechanik, anders als oft dargestellt, eben keine Axiome sind sondern (mit einer sehr wichtigen Ausnahme!) Konsequenzen der Schrödingergleichung zusammen mit der Bornschen Regel. Dieses Missverständnis führt manchmal zu einem naiven Realismus über Operatoren, der in nicht unerheblicher Weise an den vielen Verwirrungen im Bereich der Interpretation der Quantenmechanik beteiligt ist. Das schon angedeutete tatsächlich verbleibende Problem ist das sogenannte Messproblem der Quantenmechanik. Es lässt sich weder durch eine genauere Analyse der Schrödingergleichung lösen, noch durch weitere Axiome.

4.1 Die üblichen Axiome der Quantenmechanik

Die folgende Liste ist bis auf Feinheiten die kanonische Liste der Axiome der Quantenmechanik. Ich zitiere hier aus dem sehr empfehlenswerten Skript meines Kollegen Prof. Vogelsang. Dem Inhalt nach im Wesentlichen äquivalente aber meist weniger explizite Darstellungen finden sich in fast allen Lehrbüchern, beispielsweise auch in [1], Abschnitt 8.3. Die Notation habe ich im Hinblick auf die bisher von uns Verwendete angepasst.

Axiome der Quantenmechanik

1. **Zustandsraum:** Die möglichen Zustände eines Systems werden durch die normierten Vektoren ψ in einem Hilbertraum \mathcal{H} beschrieben.
2. **Observablen und Operatoren:** Jede physikalische Observable A wird durch einen selbstadjungierten Operator \hat{A} auf dem Hilbertraum \mathcal{H} beschrieben.
3. **Messprozess und Eigenwerte:** Die Messung einer Observable A liefert als Ergebnis einen der Eigenwerte des zugeordneten Operators \hat{A} .
4. **Messung und Wahrscheinlichkeit:** Sei A eine Observable und a_i ein Eigenwert des zugehörigen Operators \hat{A} sowie P_{a_i} die orthogonale Projektion auf den zugehörigen Eigenraum. Die Wahrscheinlichkeit, dass man bei einer Messung der Observable A an einem System im Zustand ψ den Wert a_i erhält, ist

$$P(A = a_i | \psi) = \|P_{a_i} \psi\|^2.$$

5. **Kollaps der Wellenfunktion:** Ergibt eine Messung der Observable A am Zustand ψ den Wert a_i , so befindet sich das System direkt nach dieser Messung im Zustand

$$\psi_{\text{koll}} = \frac{P_{a_i} \psi}{\|P_{a_i} \psi\|}.$$

6. **Zeitentwicklung:** Die Zeitentwicklung des Zustandes ψ eines Systems, das durch den Hamiltonoperator \hat{H} beschrieben wird, ist durch die Schrödingergleichung bestimmt,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = \hat{H}\psi(t).$$

7. **Korrespondenzprinzip:** Sei $A : \mathbb{R}^{6N} \rightarrow \mathbb{R}$, $(q, p) \mapsto A(q, p)$ eine klassische Observable. Dann ist der zugehörige Operator \hat{A} durch

$$\hat{A} = A(q, -i\hbar\nabla_q)$$

auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}_q^{3N})$ gegeben.

Bevor wir untersuchen werden, wie sich der durch die Axiome beschriebene Formalismus bis auf Axiom 5 aus der Schrödingergleichung heraus begründen lässt, zunächst ein paar Bemerkungen:

- 15 Bemerkung.** (a) Die Axiome spiegeln eine Präzision vor, die tatsächlich nicht vorliegt: Außer in Axiom 7 wird nirgends gesagt, was eigentlich genau eine physikalische Observable ist. Was es genau bedeutet eine Observable zu messen und wann eine Messung vorliegt, wird an keiner Stelle gesagt. Das ist aber von praktischer Relevanz, da gemäß Axiom 5 die Messung den Zustand verändert.
- (b) In der Praxis kommt der durch die Axiome beschriebene Messformalismus nur selten zur Anwendung, z.B. im Stern-Gerlach-Experiment zur Messung des Spins. Die meisten Experimente sind Streuexperimente im weiteren Sinne. Aber für Streuexperimente verwendet man einen anderen Formalismus und berechnet die Wahrscheinlichkeiten auf Basis des Wahrscheinlichkeitsstroms $j^{\psi(t)}$, so z.B. auch beim Doppelspaltexperiment.
- (c) Die hier eingeführte Sprache des „Messens von Observablen“ verführt dazu, diese Observablen mit unabhängig vom konkreten Experiment bestehenden Eigenschaften des Systems zu assoziieren. Wie wir später sehen werden, kann es aber nicht sein, dass jede Observable A schon vor ihrer Messung einen bestimmten Wert a_i hatte.

16 Bemerkung. Zum Diracformalismus

Der durch die Axiome 1–6 festgelegte mathematische Rahmen hat keinen Bezug mehr zum Konfigurationsraum \mathbb{R}^{3N} und zum speziellen Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}^{3N})$. Man geht daher oft dazu über, die Zustände $\psi \in \mathcal{H}$ als abstrakte Vektoren und \mathcal{H} als abstrakten unendlichdimensionalen separablen Hilbertraum aufzufassen. Solche Räume sind unitär äquivalent zu dem Raum

$$\ell^2 := \{c : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{C} \mid \sum_{j=1}^{\infty} |c_j|^2 < \infty\}$$

der quadratsummierbaren Folgen mit dem Skalarprodukt

$$\langle c, d \rangle_{\ell^2} = \sum_{j=1}^{\infty} \bar{c}_j d_j.$$

Es ist also ℓ^2 der kanonische komplexe n -dimensionale Raum \mathbb{C}^n mit $n = \infty$. Einen Isomorphismus $J : \mathcal{H} \rightarrow \ell^2$ erhält man (ganz wie im Endlichdimensionalen) durch Wahl einer Orthonormalbasis $(\phi_j)_{j \in \mathbb{N}}$ von \mathcal{H} , d.h.

$$\langle \phi_j, \phi_i \rangle_{\mathcal{H}} = \delta_{ij} := \begin{cases} 1 & \text{falls } i = j \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Dann ist

$$J : \mathcal{H} \rightarrow \ell^2, \quad \psi \mapsto \langle \phi_j, \psi \rangle_{\mathcal{H}}$$

die Abbildung, die ψ seine Komponenten in der Basisdarstellung bezüglich der Basis ϕ_j zuweist und

$$\psi = \sum_{j=1}^{\infty} \langle \phi_j, \psi \rangle_{\mathcal{H}} \phi_j.$$

Hier ist die Abbildung

$$P_{\phi_j} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad \psi \mapsto \langle \phi_j, \psi \rangle_{\mathcal{H}} \phi_j \tag{13}$$

die orthogonale Projektion auf den von ϕ_j aufgespannten eindimensionalen Unterraum. Da solche Projektionen auch im Messformalismus der Quantenmechanik eine wichtige Rolle spielen, hat sich eine auf Dirac zurückgehende Schreibweise eingebürgert: Vektoren $\psi \in \mathcal{H}$ notiert man als sogenannte „kets“ $|\psi\rangle$, das zu ψ kanonisch assoziierte lineare Funktional

$$\psi^* : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}, \quad \phi \mapsto \psi^*(\phi) := \langle \psi, \phi \rangle$$

mit dem „bra“ $\langle \psi|$, und das Skalarprodukt als „bracket“

$$\langle \phi | \psi \rangle := \langle \phi, \psi \rangle_{\mathcal{H}}.$$

Die Projektion (13) lässt sich dann in der Form

$$P_{\phi_j} = |\phi_j\rangle \langle \phi_j|$$

schreiben. Die Formeln aus den Axiomen 4 und 5 werden dann für den Fall eines eindimensionalen Eigenraums, aufgespannt von einem normierten Eigenvektor φ_i , zu

$$P(A = a_i | \psi) = \|P_{a_i} \psi\|^2 = |\langle \varphi_j | \psi \rangle|^2$$

und

$$\psi_{\text{koll}} = \frac{P_{a_i} \psi}{\|P_{a_i} \psi\|} = \frac{\langle \varphi_j | \psi \rangle}{|\langle \varphi_j | \psi \rangle|} |\varphi_j\rangle.$$

Insgesamt ergibt sich ein recht eleganter Formalismus, der in seiner mathematischen Form invariant unter unitären Abbildungen (Hilbertraum Isomorphismen) ist. Man könnte daher vergessen, dass man ursprünglich mal von einem ganz konkreten Raum $L^2(\mathbb{R}^{3N})$ von Wellenfunktionen auf dem Konfigurationsraum von N Teilchen ausgegangen ist. In manchen Darstellungen der Quantenmechanik wird nun betont, dass dem Raum $L^2(\mathbb{R}^{3N})$, der sogenannten Ortsdarstellung, tatsächlich keine besondere physikalische Bedeutung zukäme, sondern der physikalische Zustandsraum der abstrakte Hilbertraum sei und alle Basisdarstellungen (z.B. gegeben durch Orthonormalbasen aus Eigenvektoren von Observablen-Operatoren \hat{A}) gleichberechtigt wären.

Diese Sichtweise mag zwar auf den ersten Blick besonders elegant und tief sinnig erscheinen, macht meines Erachtens aber wenig Sinn. Nicht jede mathematische Symmetrie ist auch eine physikalische. In der klassischen Hamiltonschen Mechanik hat man eine ähnliche Situation: die Hamiltonschen

Bewegungsgleichungen sind invariant unter Symplektomorphismen (kanonischen Transformationen) des Phasenraums. Dennoch ist klar, dass der physikalische Output der Theorie am Ende aus der Trajektorie $Q(t)$ im Konfigurationsraum besteht. Wer das nicht glauben mag, der überlege sich mal, was man aus der Kenntnis z.B. von $P(t)$ allein (also der Impulse aller Teilchen zu allen Zeiten) über die durch das mathematische Modell beschriebene Welt sagen kann. Bezüglich der symplektischen Struktur sind andererseits die Orte Q und die Impulse P völlig gleichberechtigt.

4.2 Modellierung eines idealisierten Experiments

Aber vom prinzipiellen Standpunkt aus ist es ganz falsch eine Theorie nur auf beobachtbare Größen gründen zu wollen. Denn es ist ja in Wirklichkeit umgekehrt. Erst die Theorie entscheidet darüber was man beobachten kann.

Einstein 1927, zitiert durch Heisenberg

Wir vergessen nun wieder für einen Moment die Axiome und versuchen ein typisches Experiment mit Hilfe der Schrödingergleichung und der Bornschen Regel zu beschreiben. Diese Idee ist schon recht alt und geht meines Wissens auf Arbeiten von Günther Ludwig aus den 1960ern zurück.

Das quantenmechanische System, an dem eine „Messung“ durchgeführt werden soll, habe den Konfigurationsraum \mathbb{R}_x^n . Der „Messapparat“ und die „Umgebung“ haben den Konfigurationsraum \mathbb{R}_y^m . Typischerweise ist $n \approx 10, \dots, 1000$ und $m \approx 10^{23}$. Man sagt deshalb, das System sei mikroskopisch und der Apparat makroskopisch.

Die Wellenfunktion des Gesamtsystems Ψ ist also eine Funktion in $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}_x^n \times \mathbb{R}_y^m)$. Wir nehmen an, dass der Anfangszustand ein Produktzustand

$$\Psi_0(x, y) = \varphi_i(x)\Phi_0(y)$$

ist. Hier ist φ_i ein möglicher Anfangszustand des Systems und Φ_0 der Anfangszustand der Messapparatur. Die Produktstruktur bringt zum Ausdruck, dass das System und die Messapparatur zu Beginn unabhängig voneinander präpariert werden.

17 Bemerkung. Produktzustände und verschränkte Zustände

Eine Wellenfunktion $\Psi \in L^2(\mathbb{R}_x^n \times \mathbb{R}_y^m)$ heißt **Produktzustand** bezüglich der Aufspaltung der Koordinaten in $q = (x, y)$, falls sie von der Form

$$\Psi(x, y) = \psi_1(x)\psi_2(y)$$

ist. Für einen Produktzustand sind die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die X - und die Y -Konfigurationen unabhängig:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}^\Psi(X \in \Lambda_1 \text{ und } Y \in \Lambda_2) &= \int_{\Lambda_1 \times \Lambda_2} |\Psi(x, y)|^2 dx dy = \int_{\Lambda_1 \times \Lambda_2} |\psi_1(x)|^2 |\psi_2(y)|^2 dx dy \\ &= \left(\int_{\Lambda_1} |\psi_1(x)|^2 dx \right) \left(\int_{\Lambda_2} |\psi_2(y)|^2 dy \right) \\ &= \mathbb{P}^{\psi_1}(X \in \Lambda_1) \mathbb{P}^{\psi_2}(Y \in \Lambda_2). \end{aligned}$$

Alle Wellenfunktionen die sich nicht als Produkt schreiben lassen heißen **verschränkt** bzgl. der Aufspaltung der Koordinaten in $q = (x, y)$.

Wenn die beiden Teilsysteme in Wechselwirkung stehen, dann sind die Lösungen $\Psi(t) = e^{-i\hat{H}t}\Psi_0$ der Schrödingergleichung typischerweise verschränkte Wellenfunktionen, selbst wenn der Anfangszustand Ψ_0 ein Produktzustand ist.

Das Experiment ist nun so konzipiert, dass die unitäre Zeitentwicklung $U(t) = e^{-i\hat{H}t}$ des Gesamtsystems bestimmte Anfangszustände φ_i des zu messenden Systems in Endzustände Ψ_i des Gesamtsystems überführt, an denen man das „Ergebnis“, also das Vorliegen von φ_i , gut ablesen kann. Das heißt, die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi_i(x, y)|^2$ ist in einem solchen Bereich $\mathbb{R}^n \times \Lambda_i$ des Konfigurationsraums konzentriert, sodass jede mikroskopische Konfiguration $Y \in \Lambda_i$ des Apparats (z.B. eines Zeigers) mit derselben makroskopischen Stellung einhergeht. Aus dieser Makrokonfiguration schließt man dann durch „Ablesen“ auf einen bestimmten Messwert a_i . Es habe Ψ_i also wesentlichen Träger in $\mathbb{R}^n \times \Lambda_i$, vgl. Bemerkung 11.

Für solche Anfangszustände φ_i liefert die Schrödingersche Zeitentwicklung also

$$\begin{array}{ccc} \text{Anfangszustand bei } t = 0 & \text{Zeitentwicklung} & \text{Endzustand bei } t = T \\ \varphi_i(x)\Phi_0(y) & \xrightarrow{U(T)} & \Psi_i(x, y). \end{array}$$

18 Bemerkung. Das Standardbeispiel für solch ein Experiment ist die „Messung des Spins“ beim Stern-Gerlach Versuch. Wir werden später auf die Details eingehen, hier sei nur erwähnt, das es bei diesem Experiment zwei Anfangswellenfunktionen φ_1 und φ_2 gibt, wobei φ_1 und φ_2 zu Färbungen einer Photoplatte in makroskopisch getrennten Bereichen führen: startet man mit φ_1 , so erhält man immer eine Färbung „oben“, startet man mit φ_2 , so erhält man immer eine Färbung „unten“.

Startet man das Experiment nun mit einer allgemeinen Wellenfunktion $\varphi = \sum_i c_i \varphi_i$ für das System, so ergibt sich aus der **Linearität** von $U(T)$

$$\begin{array}{ccc} \text{Anfangszustand bei } t = 0 & \text{Zeitentwicklung} & \text{Endzustand bei } t = T \\ \sum_i c_i \varphi_i(x)\Phi_0(y) & \xrightarrow{U(T)} & \Psi_\varphi(x, y) = \sum_i c_i \Psi_i(x, y). \end{array}$$

Die lineare Schrödingerdynamik liefert also einen Endzustand, dessen y -Träger makroskopisch verschiedene Zeigerstellungen enthält. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die tatsächliche Konfiguration $Y(T)$ des Apparats erhalten wir aus der Bornschen Regel. Sei $\Lambda_i \subset \mathbb{R}^m$ wieder das Gebiet im Konfigurationsraum des Apparats, in welchem die Konfiguration einer makroskopischen Zeigerstellung auf den Wert a_i entspricht. Nach Konstruktion des Experiments hat Ψ_i wesentlichen Träger in $\mathbb{R}^n \times \Lambda_i$ und wegen $\Lambda_i \cap \Lambda_j = \emptyset$ für $i \neq j$ folgt

$$\langle \Psi_i, \Psi_j \rangle_{L^2} = \int_{\mathbb{R}^n} \left(\int_{\mathbb{R}^m} \overline{\Psi_i(x, y)} \Psi_j(x, y) dy \right) dx \approx 0.$$

Das Zeichen \approx meint hier und im Folgenden gleich bis auf $1 - \alpha$ im Sinne von Bemerkung 11. Die Wahrscheinlichkeit einen bestimmten Wert a_j abzulesen ist also

$$\begin{aligned} P(a_j|\varphi) &:= \mathbb{P}^{\Psi_\varphi}(Y(T) \in \Lambda_j) = \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\Lambda_j} |\Psi_\varphi(x, y)|^2 dy dx \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\Lambda_j} \left| \sum_i c_i \Psi_i(x, y) \right|^2 dy dx \\ &\approx \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\Lambda_j} |c_j|^2 |\Psi_j(x, y)|^2 dy dx = |c_j|^2. \end{aligned}$$

Wir haben hier vorausgesetzt, dass $\varphi_i, \Phi_0, \varphi$ und somit auch Ψ_i jeweils in L^2 auf 1 normiert sind.

Definiert man die Projektion P_{a_j} durch $P_{a_j}\varphi = \langle \varphi_j, \varphi \rangle \varphi_j$, so ist

$$P(a_j|\varphi) \approx |c_j|^2 = |\langle \varphi_j, \varphi \rangle|^2 = \|P_{a_j}\varphi\|^2 = \langle \varphi, P_{a_j}\varphi \rangle.$$

Da die Ψ_i paarweise orthogonal sind, müssen auch die φ_i paarweise orthogonal sein. Damit sind die Projektionen P_{a_j} paarweise orthogonal. Für den Erwartungswert des Messergebnisses a ergibt sich dann

$$E(a|\varphi) := \sum_i a_i P(a_i|\varphi) \approx \sum_i a_i \langle \varphi, P_{a_i}\varphi \rangle = \left\langle \varphi, \sum_i a_i P_{a_i}\varphi \right\rangle =: \langle \varphi, \hat{A}\varphi \rangle$$

mit dem linearen Operator $\hat{A} := \sum_i a_i P_{a_i}$. Sind die a_i reell, dann ist \hat{A} ein selbstadjungierter Operator mit Eigenwerten a_i . Die möglichen Messwerte sind also die Eigenwerte des Operators \hat{A} , die Wahrscheinlichkeit den Wert a_j zu messen ist durch $P(a_j|\varphi) = \|P_{a_j}\varphi\|^2$ gegeben und der Erwartungswert des Messwertes lässt sich kompakt mit Hilfe des Operators schreiben. Das entspricht genau den Axiomen 2., 3. und 4. aus dem vorhergehenden Abschnitt.

Zusammenfassend haben wir gezeigt, dass die Wahrscheinlichkeiten in einem idealisierten quantenmechanischen Experiment bequem mit Hilfe einer Familie von orthogonalen Projektionen P_{a_i} berechnet werden können. Der selbstadjungierte „Buchhalteoperator“ $\hat{A} = \sum a_i P_{a_i}$ erlaubt es, bequem den Erwartungswert und auch die höheren Momente der Verteilung zu berechnen. Allerdings werden aus der Analyse einige Punkte klar: nicht jeder selbstadjungierte Operator entspricht einem tatsächlich durchführbaren Experiment; es kann verschiedene Experimente geben, die durch denselben Operator beschrieben werden; nicht jedes Experiment erfüllt die Annahmen, die zu unserem Ergebnis geführt haben. Es ist daher offenbar nicht angebracht, alle Operatoren mit physikalischen Größen im Sinne von unabhängig von der Messung bestehenden Eigenschaften eines Systems zu identifizieren. Außerdem besteht keine Freiheit die Form von Observablen-Operatoren zu postulieren: alle statistischen Vorhersagen ergeben sich aus der Bornschen Regel. Postulate über die Form bestimmter Observablen-Operatoren (wie z.B. in Axiom 7) sind entweder redundant oder inkonsistent.

Übungsaufgabe 4: Diskutieren Sie qualitativ die folgende Karikatur eines Experiments, indem Sie den wesentlichen Träger der Wellenfunktion $\Psi(t, x, y)$ für mehrere Zeitpunkte $0 \leq t \leq T$ im Konfigurationsraum skizzieren: Es handle sich um zwei Teilchen gleicher Masse in

einer Raumdimension, also $n = m = 1$. Die Wellenfunktion des x -Teilchens sei bei $t = 0$ gegeben durch

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_0(x)e^{ikx} + \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_0(x)e^{-ikx} =: \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_r(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_l(x)$$

wobei $\varphi_0(x) \in \mathbb{R}$ wesentlichen Träger in $[-1, 1]$ habe und $k \gg 1$ sei. Der Teil $\varphi_r(x)$ läuft also unter der freien Schrödingerentwicklung mit Geschwindigkeit k nach rechts und $\varphi_l(x)$ nach links. Das y -Teilchen habe die Wellenfunktion $\Phi_0(y) = \varphi_0(y - a)$, welche im Abstand a rechts vom Ursprung lokalisiert sei. Die beiden Teilchen haben eine abstoßenden Wechselwirkung, wobei das Wechselwirkungspotential $V(x - y) > 0$ eine Reichweite deutlich kleiner als a habe. Gehen Sie davon aus, dass sich die Wellenpakete quasi-klassisch verhalten, also im Wesentlichen ohne ihre Form zu verändern entlang der durch das Potential vorgegebenen klassischen Trajektorien propagieren.

Tipp: Schauen Sie sich nochmals Beispiel 3 an.

4.3 Schrödingers Katze und das Messproblem

Wir haben bisher ein recht offensichtliches Problem ignoriert: Wenn wir kurz nach der im letzten Abschnitt beschriebenen Messung das Ergebnis ein zweites Mal ablesen und wieder die Bornsche Regel anwenden, so ist die Wellenfunktion ja immer noch von der Form $\Psi_\varphi(x, y) = \sum_i c_i \Psi_i(x, y)$ oder zumindest nahe dran. Damit ist das Ergebnis aber wieder zufällig und aufgrund der Bornschen Regel unabhängig von dem zuvor abgelesenen Wert. Das widerspricht allerdings in offensichtlicher Weise unserer Erfahrung: makroskopische Objekte wie Zeiger ändern nicht zufällig ihre Konfiguration. Daher ist die Schrödingergleichung zusammen mit der Bornschen Regel empirisch nicht adäquat oder einfacher gesagt, die Theorie kann in dieser Form nicht korrekt sein.

Hier kommt jetzt Axiom 5, das sogenannte Kollapspostulat ins Spiel. Gemäß der Schrödingergleichung, also Axiom 6, ist der Zustand nach Ablauf des Experiments zur Zeit T durch $\Psi_\varphi(x, y) = \sum_i c_i \Psi_i(x, y)$ gegeben. Das verallgemeinerte Kollapspostulat sagt nun, dass nach der Messung der Zustand des Gesamtsystems durch $\Psi_j(x, y)$ gegeben ist, falls der Wert a_j gemessen wurde. Das stellt sicher, dass bei nochmaligem Ablesen der Zeigerkonfiguration Y wieder ein Wert in Λ_j herauskommt. Insgesamt ergibt sich also für die Beschreibung des Experiments folgender Ablauf:

Anfangszustand	Zeitentwicklung	Kollaps	Endzustand
$\sum_i c_i \varphi_i(x) \Phi_0(y)$	$\xrightarrow{U(T)}$	$\Psi_\varphi(x, y) = \sum_i c_i \Psi_i(x, y)$	$\xrightarrow{P_j}$ $\Psi_j(x, y)$

19 Bemerkung. Das Kollapspostulat in der Form von Axiom 5 ist eine extreme Idealisierung, die nur Sinn macht, wenn das Experiment den Zustand des Systems gar nicht verändert, wenn also gilt

$$\varphi_i(x) \Phi_0(y) \xrightarrow{U(T)} \Psi_i(x, y) = \varphi_i(x) \Phi_i(y).$$

Das ist allerdings im Allgemeinen höchstens näherungsweise erfüllt. Von praktischer Relevanz ist noch eher der Fall

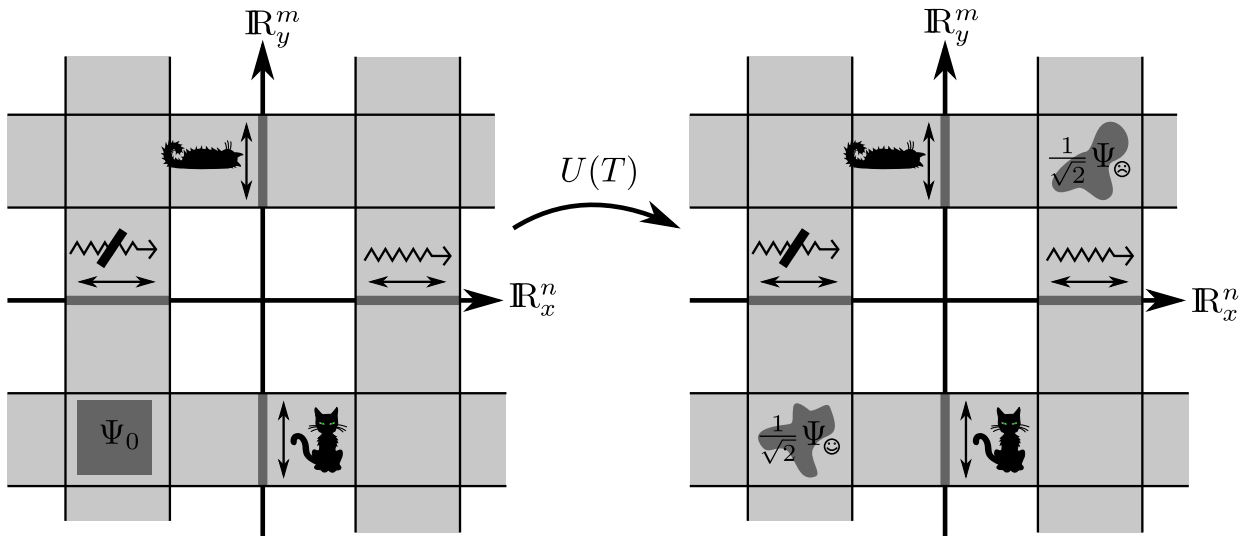
$$\varphi_i(x) \Phi_0(y) \xrightarrow{U(T)} \Psi_i(x, y) \approx \tilde{\varphi}_i(x) \Phi_i(y),$$

dass also am Ende näherungsweise wieder ein Produktzustand vorliegt.

Der zufällige Übergang des Zustands $\Psi_\varphi(x, y) = \sum_i c_i \Psi_i(x, y)$ in den Zustand $\Psi_j(x, y)$ am Ende der Messung steht aber offenbar im Widerspruch zur linearen und deterministischen Schrödingergleichung, also zu Axiom 6. Die Problematik der Situation wird noch dadurch verstärkt, dass an keiner Stelle klar definiert wird, was genau eine Messung ist, wann sie beendet ist und wann somit der Kollaps stattfindet. Schließlich ist die Vorstellung, dass Fakten über Orte makroskopischer Objekte wie Zeigerstellungen erst durch deren Beobachtung geschaffen werden, gelinde gesagt gewöhnungsbedürftig. Andererseits kann man das Kollapspostulat auch nicht ohne Weiteres weglassen, da man dann, wie zuvor beschrieben, empirisch falsche Vorhersagen bekommt.

Diese Problematik nennt man das **Messproblem** der Quantenmechanik. Es wurde erstmals sehr deutlich von Schrödinger formuliert und zwar in seinem berühmten Katzen-Artikel. Schrödinger betrachtet dort eine Situation ähnlich der des vorangegangenen Abschnitts. Das x -System ist in seinem Fall eine radioaktive Substanz die innerhalb des Zeitraums $[0, T]$ mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ einen Zerfall produziert, welcher in einem in der Nähe befindlichen Geigerzähler registriert wird. Das y -System besteht neben dem Geigerzähler auch noch aus einer zunächst lebendigen Katze und einer Apparatur, welche beim Anschlagen des Geigerzählers die Katze tötet. In unserer bisherigen Notation gilt also

$$\begin{array}{ccc} \text{Anfangszustand bei } t = 0 & \text{Zeitentwicklung} & \text{Endzustand bei } t = T \\ \Psi_0(x, y) = \varphi(x)\Phi_\odot(y) & \xrightarrow{U(T)} & \Psi_T(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_\odot(x, y) + \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_\ominus(x, y) \end{array}$$



Zur Figur: Die dunkel schattierten Gebiete deuten jeweils den wesentlichen Träger der Wellenfunktion an. Die Anfangswellenfunktion Ψ_0 hat wesentlichen Träger in dem Gebiet des Konfigurationsraums, in dem die Katze lebt (unterer waagerechter Schlauch) und kein relevanter Zerfall stattgefunden hat (linker senkrechter Schlauch). Nach der Zeit T führt die Schrödingersche Zeitentwicklung $U(T)$ dazu, dass ein Teil der Wellenfunktion nun auch wesentlichen Träger im Gebiet des Konfigurationsraums hat, in dem die Katze tot ist (oberer waagerechter Schlauch) und ein relevanter Zerfall stattgefunden hat (rechter senkrechter Schlauch).

Nimmt man die Quantenmechanik wie sie in den Axiomen 1 bis 7 formuliert ist ernst, so schafft erst eine „Beobachtung“ oder „Messung“ der Katze ein Faktum über ihren Gesundheitszustand. Das ist aber absurd. Andererseits zeigt Schrödinger damit an einem besonders drastischen Beispiel nur das typische Verhalten, dass wir auch schon bei der Modellierung von Experimenten beobachtet haben: Die Linearität der Schrödingergleichung führt zwangsläufig dazu, dass sich Superpositionen im mikroskopischen Bereich durch Wechselwirkung mit makroskopischen Objekten auf letztere übertragen.

Das Messproblem ist letztendlich die Ursache für einen bis heute nicht abebbenden Disput unter den Physikern zur Interpretation der Quantenmechanik. Es gibt dazu fast so viele Meinungen wie Physiker, hier einige davon in verkürzter Form insoweit ich sie verstehe:

- (a) Der Kollaps wird durch Wechselwirkung mit einem klassischen bzw. makroskopischen System herbeigeführt! Die Rolle der Physik ist es, das Verhalten der makroskopischen Objekte zu beschreiben, also Statistiken von Messergebnissen vorherzusagen, aber nicht, das Verhalten mikroskopischer Systeme unabhängig von ihrer Beobachtung zu modellieren. (Niels Bohr, Kopenhagener Deutung, heute nicht mehr ganz so populär)
Probleme: Wo genau liegt die Grenze zwischen mikro- und makroskopisch, zwischen Quanten- und klassischen Systemen? Weiterhin bestehen doch auch die Messapparate aus Atomen. Wie kann etwas „real“ sein, wenn seine Bausteine es nicht sind?
- (b) Das Problem hat nichts mit Physik sondern nur mit Philosophie zu tun! Denn Physik ist nur das, was wir messen können. Ob die Katze tot oder lebendig ist, ist erst dann eine physikalische Frage wenn wir messen (eine recht populäre Verkürzung der Kopenhagener Sichtweise)
Problem: Man ignoriert das Problem nur, statt es zu lösen.
- (c) „Shut up and calculate!“ Da die Quantenmechanik für praktische Zwecke hervorragende Dienste leistet, gibt es keinen Grund über diese Problematik ernsthaft nachzudenken (vertreten durch viele Physiker)
Problem: Unbefriedigend wenn man nicht nur an konkreten Rechnungen sondern auch an der präzisen Formulierung physikalischer Theorien interessiert ist.
- (d) Viele Welten (many worlds): Es gibt keinen Kollaps, die Lösung der Schrödingergleichung beschreibt unser Universum korrekt. Alle makroskopischen Zweige (genannt Welten) der Wellenfunktion sind realisiert. Jede der vielen Realisierungen von uns selbst nimmt aber nur den eigenen Zweig wahr. (Hugh Everett, ziemlich populär)
Problem: Scheint zunächst absurd, ist allerdings nicht mehr ganz so absurd, wenn man etwas darüber nachgedacht hat. Mir ist allerdings nicht klar, inwieweit diese Interpretation Bezug auf unsere Wahrnehmung nimmt (Leib-Seele-Problem) und, wie man in so einer Theorie die quantenmechanischen Wahrscheinlichkeiten bekommt.
- (e) Bewusstsein verursacht den Kollaps, d.h. erst die Wahrnehmung durch einen bewussten Beobachter lässt die Wellenfunktion kollabieren! (von Neumann, Wigner, nicht sonderlich populär)
Problem: Was genau ist und wer genau hat Bewusstsein? Selbst wenn man diese Fragen

beantworten könnte, stellt sich wider die Frage, wie bewusst die Wahrnehmung sein muss, damit die Wellenfunktion kollabiert.

- (f) Dekohärenz (siehe unten) löst das Messproblem! (vertreten durch viele Physiker die sich mit der Problematik nicht wirklich befasst haben)
Problem: Dekohärenz löst das Messproblem nicht.
- (g) Spontaner Kollaps: es wird ein weiteres stochastisches Gesetz in die Theorie eingeführt, das die Wellenfunktion zu zufälligen Zeiten in zufälliger Weise objektiv (ohne Bezug auf Beobachtung) kollabieren lässt. (Ghirardi-Rimini-Weber, nicht sonderlich populär)
Problem: Keins. Allerdings scheint mir diese Lösung ad hoc und wenig elegant.
- (h) Bohmsche Mechanik (auch pilot-wave theory): der Zustand des Systems wird wieder durch die Teilchenorte bzw. die Konfiguration $Q(t)$ beschrieben. Die Rolle der Wellenfunktion ist es, das Bewegungsgesetz für die Teilchenbahnen zu erzeugen (De Broglie, Bohm, nicht sonderlich populär)
Problem: Keins. Meines Erachtens die offensichtliche Lösung des Messproblems.
- (i) Quantenlogik...
- (j) Quantenwahrscheinlichkeit...
- (k) Physik ist nur über Information...
- (l) Quantenmechanik kann man halt nicht verstehen...
- (m) Quantenmechanik zeigt, dass Realität eine Illusion ist...

Diese Liste ließe sich noch weit fortsetzen, wird aber immer abstruser.

4.4 Dekohärenz

Ist eine Wellenfunktion als Summe zweier Funktionen gegeben,

$$\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x),$$

so ist die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|\psi(x)|^2 = \overline{(\psi_1(x) + \psi_2(x))}(\psi_1(x) + \psi_2(x)) = |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + 2\text{Re}(\psi_1(x)\psi_2(x))$$

im Allgemeinen nicht die Summe der Dichten, sondern enthält einen zusätzlichen Interferenzterm. Haben die Funktionen ψ_1 und ψ_2 disjunkte Träger, so verschwindet der Interferenzterm. Das bedeutet aber nicht, dass sie nicht zu einem späteren Zeitpunkt wieder überlappen und somit interferieren können. So überlappen beim Doppelspaltexperiment mit einem gut lokalisierten Wellenpaket die beiden Teile, welche durch die beiden Spalte gehen, zum Zeitpunkt des Durchgangs nicht. Die Beugung an den Spalten führt aber dazu, dass sie sich hinter dem Doppelspalt wieder überlappen und das typische Interferenzmuster erzeugen.

Haben wir es allerdings mit einem makroskopischen System mit sehr vielen Teilchen zu tun (z.B. $N = 10^{23}$) und haben die beiden Teile ψ_1 und ψ_2 disjunkte Träger in makroskopisch vielen Koordinaten (z.B. zwei verschiedene Zeigerstellungen), dann ist es praktisch unmöglich, die beiden Teile im extrem hochdimensionalen Konfigurationsraum wieder zum Überlappen zu bringen. Ein Beispiel ist Schrödingers Katze: Es ist praktisch ausgeschlossen, dass die unitäre Zeitentwicklung $e^{-i\hat{H}t}$ die beiden Teile Ψ_{\odot} und Ψ_{\ominus} wieder zum Überlappen bringt. Dazu müssten die Orte **aller** Teilchen aus der radioaktiven Substanz, aus dem Geigerzähler, aus der Tötungsapparatur und natürlich auch der Katze (sowie allen weiteren Dingen oder Lebewesen die inzwischen mit dem System interagiert haben) wieder übereinstimmen. Das wird nicht passieren, und deshalb kann man davon ausgehen, dass

$$\left| e^{-i\hat{H}t} \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_{\odot}(x, y) + e^{-i\hat{H}t} \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_{\ominus}(x, y) \right|^2 \approx \left| e^{-i\hat{H}t} \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_{\odot}(x, y) \right|^2 + \left| e^{-i\hat{H}t} \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_{\ominus}(x, y) \right|^2$$

für alle Zeiten $t \geq 0$ gilt. In Zukunft werden die beiden Teile also nicht mehr interferieren. Den Effekt, dass Wechselwirkung mit einer makroskopischen Umgebung zu irreversiblen Verlust der Interferenzfähigkeit führt, nennt man Dekohärenz. Dekohärenz erklärt, warum wir keine Interferenzeffekte bei makroskopischen Körpern beobachten.

Dekohärenz löst aber das Messproblem nicht: Die Tatsache, dass Ψ_{\odot} und Ψ_{\ominus} nicht mehr interferieren können, ändert nichts daran, dass die Lösung der Schrödingergleichung die Summe beider Teile ist. Und diese Lösung ist nunmal empirisch nicht adäquat (es sei denn, man versteht und akzeptiert die Viele Welten Theorie).

4.5 Das Doppelspaltexperiment

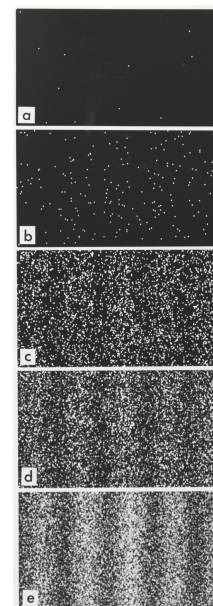
Zum Abschluss wollen wir noch das Doppelspaltexperiment im Lichte der vorangegangenen Diskussion durchsprechen.

Beim Doppelspaltexperiment treffen Teilchen (beispielsweise Elektronen) auf zwei parallele Spalte, deren Breite zur Beugung der Wellenfunktion an den Spalten führt. Diese Beugung ist eine Konsequenz der Schrödingergleichung.

Von den beiden Spalten geht dann jeweils eine Kugelwelle $\psi_1(x)$ und $\psi_2(x)$ aus. Hinter den Spalten überlagern sich die beiden Teile der Welle wieder und liefern als Wahrscheinlichkeitsdichte für den Ort des Teilchens

$$\rho^{\psi}(x) = |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + 2\text{Re}(\psi_1(x)\psi_2(x)).$$

Der Interferenzterm $2\text{Re}(\psi_1(x)\psi_2(x))$ führt zu dem typischen Interferenzmuster, das im Experiment beispielsweise durch Aufstellen einer Photoplatte in geeignetem Abstand zu den Spalten beobachtet werden kann. Genauer gesagt stellt man fest, dass auf dem Schirm gut lokalisierte „Teilchen“ ankommen und bei mehrfacher Wiederholung des Experiments die Auftreffpunkte ρ^{ψ} -verteilt sind, siehe Bild. Man findet also die Beschreibung durch die Schrödingergleichung zusammen mit der Bornschen Regel im Experiment bestätigt.



Das Kollapspostulat scheint hier zwar zunächst empirisch nicht mehr relevant, da das Teilchen nach dem Auftreffen auf der Platte für weitere „Messungen“ nicht mehr zur Verfügung steht. Allerdings liefert die Schrödingergleichung für das Gesamtsystem Teilchen+Platte wieder eine (diesmal kontinuierliche) Überlagerung von Wellenfunktionen, die zu makroskopisch verschiedenen Punkten auf der Platte gehören. Und diese Superposition ist eben keine gute Beschreibung des Zustands der Platte, da der Ort der Färbung, wenn er einmal da ist, bei öfterem Hinsehen nicht mehr zufällig ist.

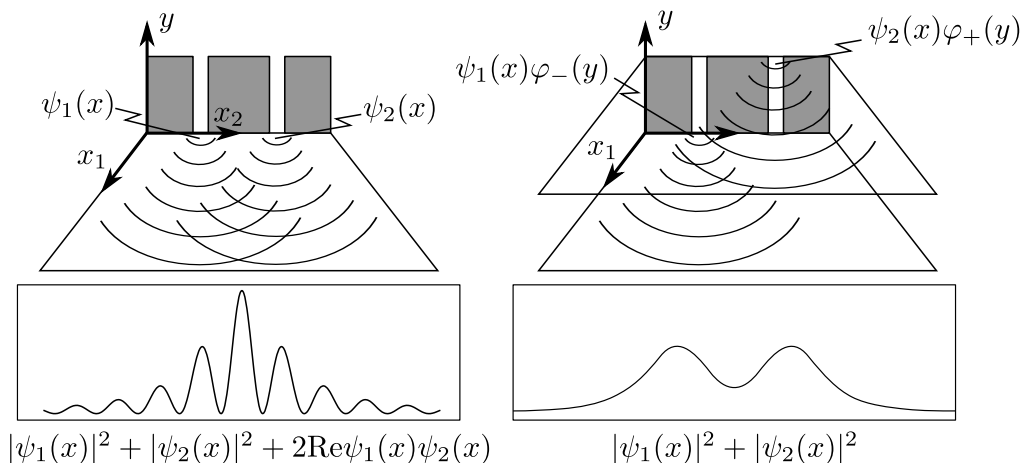
Eine zentrale Rolle bei vielen Besprechungen des Doppelspaltexperiments nimmt der folgende Effekt ein. Misst man an einem der Spalte, ob das Teilchen durch diesen Spalt kommt, z.B. indem man ein System mit Konfiguration y anbringt, welches nur beim Durchqueren des Teilchens durch diesen Spalt seine Konfiguration ändert, so verschwindet das Interferenzmuster. Das ist leicht zu verstehen, da die Wellenfunktion jetzt auf dem Konfigurationsraum von x -Teilchen und y -Teilchen lebt. Die Lösung der Schrödingergleichung hat nun die Form

$$\Psi(x, y) = \psi_1(x)\varphi_-(y) + \psi_2(x)\varphi_+(y)$$

und die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Ort des x -Teilchens ist

$$\begin{aligned} \int |\Psi(x, y)|^2 dy &= |\psi_1(x)|^2 \underbrace{\int |\varphi_-(y)|^2 dy}_{=1} + |\psi_2(x)|^2 \underbrace{\int |\varphi_+(y)|^2 dy}_{=1} \\ &\quad + 2\text{Re}\left(\psi_1(x)\psi_2(x) \underbrace{\int \varphi_-(y)\varphi_+(y) dy}_{\approx 0}\right) \\ &= |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2, \end{aligned}$$

da die beiden Summanden in den y -Koordinaten nicht mehr überlappen. Die Erklärung für das Verschwinden des Musters ist also denkbar simpel: Interferenz kann nur stattfinden, wenn sich verschiedene Teile der Wellenfunktion im Konfigurationsraum überlappen!



Das Doppelspaltexperiment hat bekanntlich zu weitreichenden physikalischen und philosophischen Schlussfolgerungen geführt. Oft wird davon gesprochen, dass aus dem Doppelspaltexperiment folge, dass quantenmechanische Teilchen manchmal Welle und manchmal Teilchen seien und insbesondere keinen Ort oder zumindest keine Trajektorien haben können.

Nüchtern betrachtet zeigen das Experiment und seine theoretische Beschreibung, dass einerseits eine Beschreibung durch Teilchen mit Orten empirisch sinnvoll ist, denn wir sehen ja auf dem Schirm gut lokalisierte Auftreffpunkte. Andererseits muss die Dynamik der Teilchen wohl so beschaffen sein, dass die Verteilung der Orte durch die Schrödingerwelle beschrieben wird. Dass es keine Teilchenbahnen mehr geben kann, oder keine mikroskopische Realität, oder überhaupt keine beobachterunabhängige Realität, all diese Dinge folgen sicherlich nicht aus dem Doppelspaltexperiment oder aus irgendeinem anderen bisher gemachten Experiment. Als einzig sichere Schlussfolgerung kann gelten, dass die Teilchenbahnen nicht mehr durch die klassischen Hamiltonschen Bewegungsgleichungen gegeben sind.

Wir schließen diesen Abschnitt mit einer eher technischen Bemerkung:

20 Bemerkung. Die Rolle des Wahrscheinlichkeitsstroms

Auch wenn man sich der Einfachheit halber das Doppelspaltexperiment immer mit stationären interferierenden Wellen vorstellt, so hat man im wirklichen Experiment eine zeitabhängige Welle, die durch die beiden Spalte propagiert. Auch „misst“ man durch Aufstellen der Photoplatte nicht im Sinne der Bornschen Regel oder des Messformalismus wo das Teilchen zu einem bestimmten Zeitpunkt gerade ist. Der Punkt auf dem Schirm erscheint nämlich zu einem Zeitpunkt, der selbst zufällig ist. Daher kann man nicht ρ^ψ zur Berechnung des Interferenzmusters verwenden, sondern den Wahrscheinlichkeitsstrom j^ψ . Genauer gesagt berechnet man die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen auf einem bestimmten Bereich des Schirms auftrifft durch Integration des Wahrscheinlichkeitsflusses durch diese Fläche über die Zeit. Das hat zwar zunächst nichts mit den Axiomen des Messformalismus zu tun, funktioniert aber und ist die Grundlage für die Berechnung von Detektionswahrscheinlichkeiten in der Streutheorie. Allerdings ist unklar, wie man diese Verwendung des Wahrscheinlichkeitsstroms rechtfertigen kann, wenn man, wie in der Quantenmechanik, explizit darauf besteht, dass die Teilchen nicht entlang von Trajektorien (z.B. tangential an das Vektorfeld j^ψ) laufen.

5 Ergänzungen

5.1 Zur Bohmschen Mechanik

Dieser Abschnitt enthält keine Zusammenfassung der Vorlesung von Herrn Dürr, sondern nur ein paar Anmerkungen meinerseits. Eine wenig technische, deutschsprachige Einführung mit Betonung auf konzeptionellen Aspekten findet sich in dem Artikel *Quantenphysik ohne Quantenphilosophie* [4] von Detlef Dürr und Dustin Lazarovici. Weiterführende Details finden sich beispielsweise in [3].

Bevor wir die Gleichungen der Bohmschen Mechanik formulieren, sollte der Leser einen gedanklichen Schritt zurück machen und sich überlegen, was die üblicherweise zur Einführung der Quantenmechanik diskutierten Phänomene eigentlich nahelegen. So sagt uns das Doppelspaltexperiment offenbar, dass sich die Elektronen in diesem Experiment nicht auf einer klassischen Bahn bewegen. Keine *klassische Bahn* meint hier aber nur, dass die Bahnkurve eben *keine Lösung der Newtonschen oder Hamiltonschen Bewegungsgleichungen ist*. Die gut lokalisierten Schwärzungen auf dem Schirm legen aber immer noch eine Beschreibung durch Teilchen mit Bahnkurven nahe. Und das Interferenzmuster lässt vermuten, dass die Bewegung der Teilchen durch ein Wellenfeld beeinflusst wird. Ganz analog sagen einem die Stabilität und

die Spektren von Atomen, dass sich Elektronen in Atomen nicht auf klassischen Newtonschen Bahnen bewegen. Die viel weitergehenden Aussagen, dass Elektronen grundsätzlich überhaupt keine Bahnen haben können und, dass eine beobachterunabhängige mikroskopische Beschreibung von Elementarteilchen prinzipiell unmöglich sei, folgen aus diesen Befunden zunächst nicht. Da solche oder ähnliche Aussagen aber zum Kanon der Quantenphilosophie gehören, könnte man denken, dass diese weitergehenden Aussagen vielleicht aus anderen Experimenten oder aus einer genaueren Analyse der oben genannten Beispiele folgen. Aber auch das ist nicht der Fall. Ganz im Gegenteil, alle Phänomene, die üblicherweise durch die nichtrelativistische Quantenmechanik beschrieben werden, lassen sich in offensichtlicher Weise durch eine Theorie beschreiben, in der die Teilchen wohldefinierte Bahnkurven haben. Diese Theorie heißt heute Bohmsche Mechanik und jeder Leser der vorangegangenen Kapitel kann die Gleichungen der Bohmschen Mechanik vermutlich schon raten.

Ein System aus N Teilchen wird in der Bohmschen Mechanik wie gehabt durch die Konfiguration der Teilchen $Q(t) = (Q_1(t), \dots, Q_N(t)) \in \mathbb{R}^{3N}$ beschrieben. Die zeitliche Entwicklung der Konfiguration wird durch die Wellenfunktion $\psi(t) : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{C}$ des Systems bestimmt:

$$\frac{d}{dt}Q_j(t) = \frac{\hbar}{m_j} \operatorname{Im} \frac{\nabla_{q_j} \psi}{\psi}(Q_1(t), \dots, Q_N(t)) = \frac{j^{\psi(t)}}{\rho^{\psi(t)}}(Q(t)). \quad (14)$$

Dabei ist $\psi(t, q)$ eine Lösung der Schrödingergleichung :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, q) = - \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_j} \Delta_{q_j} \psi(t, q) + V(q) \psi(t, q). \quad (15)$$

Das ist alles. Das sind die Gleichungen der Theorie, die alles Weitere festlegen. Für zusätzliche Axiome oder eine „Interpretation“ bestehen weder Spielraum noch Bedarf. Man nennt daher Bohmsche Mechanik auch manchmal das „unromantische Bild“ der Quantenmechanik.

Was sind die Vorhersagen der Theorie? Um den Messformalismus der Quantenmechanik und somit auch deren statistische Vorhersagen herzuleiten, macht man zunächst eine statistische Hypothese:

Gleichgewichtshypothese: *In einem System, welches zum Zeitpunkt $t = 0$ durch die Wellenfunktion $\psi(0, q)$ beschrieben wird, ist die tatsächliche Konfiguration $Q(0)$ zufällig mit Verteilung $|\psi(0, q)|^2$.*

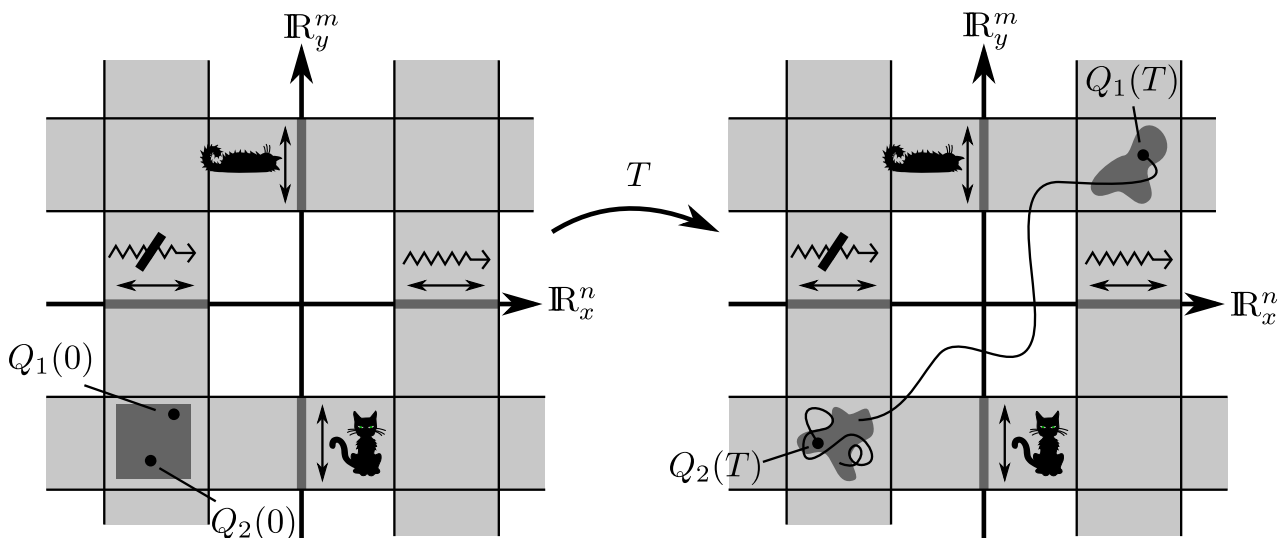
Man sollte diese Gleichgewichtshypothese analog zu statistischen Hypothesen in der klassischen Statistischen Physik lesen. Dort nimmt man Folgendes an: In einem System im Gleichgewicht bei Temperatur T , welches durch die Hamiltonfunktion $H(q, p)$ beschrieben wird, sind die Orte und Impulse $(Q(0), P(0))$ zufällig und proportional zu $e^{-H(q,p)/k_B T}$ verteilt.

Sowohl die Bohmsche als auch die Hamiltonsche Gleichgewichtsverteilung sind invariant unter der jeweiligen zeitlichen Entwicklung, also ausgezeichnet durch das jeweilige Bewegungsgesetz. Für die $|\psi(t, q)|^2$ -Verteilung folgt das direkt aus der Form des Bohmschen Geschwindigkeitsfeldes (14) und der Kontinuitätsgleichung.

21 Bemerkung. Zur Existenz von Lösungen

Streng genommen muss man zunächst zeigen, dass (14) überhaupt eindeutige globale Lösungen besitzt, zumindest für $|\psi(0, q)|^2$ -fast alle Anfangsdaten. Das ist nicht völlig trivial, da das Bohmsche Geschwindigkeitsfeld beispielsweise an den Nullstellen von ψ singularär wird. Man kann aber zeigen (siehe [5] und Referenzen darin), dass diejenigen Anfangsdaten $Q(0)$, für die (14) keine eindeutige Lösung global in der Zeit besitzt, eine Nullmenge bezüglich des $|\psi(0, q)|^2$ -Maßes bilden.

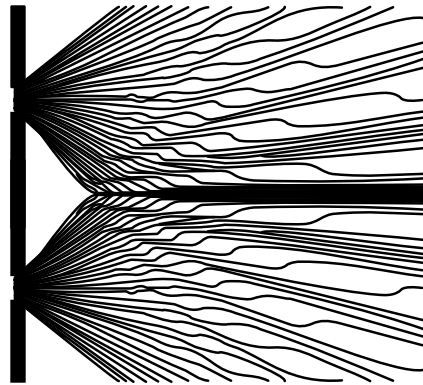
Damit folgt aber der übliche Quantenformalismus wieder im Sinne der Diskussion von Abschnitt 4.2 durch Modellierung von tatsächlichen Experimenten. Den Kollaps der Wellenfunktion gibt es in der Bohmschen Mechanik allerdings nicht mehr. Die Schrödingergleichung führt zwar immer noch (aufgrund ihrer Linearität) zu makroskopischen Superpositionen, das stellt aber kein Problem mehr da. Denn das System hat ja zu jedem Zeitpunkt eine wohlbestimmte Konfiguration $Q(t)$, und die gehört eben entweder zu einer lebendigen oder zu einer toten Katze. Für praktische Zwecke kann man den Kollaps dann einführen, wenn man sich sicher ist, dass die jeweils vernachlässigten Teile der Wellenfunktion für die weitere Entwicklung der Konfiguration $Q(t)$ keine Rolle mehr spielen.



Zur Figur: Nochmals das Bild zu Schrödingers Katze, aber diesmal mit zwei der möglichen Bohmschen Trajektorien im Konfigurationsraum. Die Lösung der Schrödingergleichung ist unverändert und zum Zeitpunkt T immer noch eine Superposition von zwei makroskopisch verschiedenen Teilen. Anders als in der Quantenmechanik hat das System in der Bohmschen Mechanik aber zu jedem Zeitpunkt eine wohldefinierte Konfiguration $Q(t)$. Und diese liegt zum Zeitpunkt T dann entweder im Träger von $\Psi_{\odot}(x, y)$ (beispielsweise $Q_2(T)$) oder im Träger von $\Psi_{\ominus}(x, y)$ (beispielsweise $Q_1(T)$). Damit besteht dann aber auch kein Zweifel darüber, ob die Katze zum Zeitpunkt T lebt oder nicht. Da das Bohmsche Bewegungsgesetz im Konfigurationsraum lokal ist, kann man dann jeweils den Teil der Wellenfunktion für alle späteren Zeiten vergessen, der makroskopisch verschiedenen Träger von der tatsächlichen Konfiguration $Q(T)$ hat.

Es mag zunächst überraschend sein, aber die Verwendung der Gleichgewichtshypothese macht eine Berechnung der Bohmschen Trajektorien für praktische Zwecke oft überflüssig.

Dennoch wollen wir die Form der Bahnen $Q(t)$ an zwei Beispielen kurz besprechen. Im Doppelspaltexperiment mit einer symmetrischen Anfangswellenfunktion (zur im Bild horizontalen Achse) sehen die Bohmschen Bahnen aus wie in nebenstehendem Bild. Hier sind Lösungen von (14) zu einer festen Anfangswellenfunktion aber zu verschiedenen Anfangsorten $Q(0)$ skizziert. Die Anfangsorte wurde dabei näherungsweise $|\psi(0, q)|^2$ -verteilt gewählt. Die Theorie repro-



duziert also in ganz einfacher Weise die experimentellen Befunde zum Doppelspalt. Jedes Mal wenn ein Teilchen auf den Doppelspalt trifft, ist eine der Trajektorien realisiert und man beobachtet einen gut lokalisierten Auftreffpunkt. Die Statistik der Auftreffpunkte zeigt aber das charakteristische Interferenzmuster.

Als weiteres einfaches Beispiel sei die Bahn eines Elektrons im Grundzustand des Wasserstoffatoms genannt. Die Grundzustandswellenfunktion kann reell gewählt werden und hat unter der Zeitentwicklung immer eine räumlich konstante Phase. Damit ist aber das Bohmsche Geschwindigkeitsfeld identisch Null und die Teilchen bewegen sich gar nicht. Im Grundzustand des Wasserstoffatoms ruht das Elektron also.

Nun mögen einem die Bohmschen Bahnen im Doppelspaltexperiment und auch im Grundzustand des Wasserstoffs sehr seltsam erscheinen: Wie können sie sich zwischen Doppelspalt und Schirm krümmen, obwohl doch keine Kraft wirkt? Wie kann das Elektron in der Nähe des Atomkerns ruhen, wenn dieser doch aufgrund der elektrostatischen Anziehung eine Kraft auf das Elektron ausübt? Nun, *Bohmsche Mechanik ist eben nicht Newtonsche Mechanik*. Der Kraftbegriff ist aber ebenso wie der Begriff des Impulses ein Konzept aus der Newtonschen Mechanik. Und wir haben ja bereits geklärt, dass Newtonsche Mechanik für das Doppelspaltexperiment und auch für Atome *falsche Vorhersagen* macht. Bohmsche Mechanik macht die richtigen, im Experiment überprüften Vorhersagen.

Es bleibt nur noch die Frage, wie man die Gleichgewichtshypothese in der Bohmschen Mechanik begründen kann? Das ist eine etwas längere Geschichte, die hier nicht ausgeführt werden soll. Nur soviel: Man kann zeigen, dass sie typischerweise gilt, im Sinne von Boltzmann. Kurz gesagt heißt dies, dass in einer typischen Realisierung einer Bohmschen Welt (in der alles deterministisch abläuft) Experimentatoren die Gleichgewichtshypothese für ihre Experimente an Subsystemen bestätigt finden. Typisch bedeutet hier, dass die Menge der Anfangskonfigurationen zu einer gegebenen Anfangswellenfunktion Ψ die zu einer Welt führen, in der Experimentatoren die Gleichgewichtshypothese für Subsysteme verwerfen würden, verschwindend kleines $|\Psi|^2$ -Maß hat. Den Beweis dieses Resultats sowie eine ausführliche Diskussion seiner Bedeutung findet man in [6].

Wir schließen diesen Abschnitt mit einer Bemerkung zur Rolle des Impulses in der Bohmschen Mechanik.

22 Bemerkung. Impuls, Kraft und Energie in der Bohmschen Mechanik

Bohmsche Teilchen haben Bahnkurven $Q_j(t)$ und somit insbesondere auch Geschwindigkeiten $\dot{Q}_j(t)$ und Beschleunigungen $\ddot{Q}_j(t)$. Da das Bewegungsgesetz (14) eine Differentialgleichung erster Ordnung ist, spielt die Beschleunigung $\ddot{Q}_j(t)$ in dieser Theorie keine zentrale Rolle mehr. Damit geht aber auch die zentrale Bedeutung des Kraftbegriffs aus der Newtonschen Mechanik zumindest auf fundamentaler Ebene verloren. Weiterhin ist eine Wellenfunktion die (15) löst im Allgemeinen weder zeitunabhängig noch invariant unter Translationen im Raum. Damit hat auch das Bewegungsgesetz (14) keine dieser Symmetrien und es gibt auch keine der Energie und dem Impuls der klassischen Mechanik entsprechenden Größen mehr, die entlang der Bohmschen Bahnen $Q(t)$ erhalten sind. Insbesondere ist es völlig sinnfrei, die Bohmsche Geschwindigkeit $\dot{Q}_j(t)$ eines Teilchens mit der Masse m_j zu multiplizieren und die resultierende Größe Impuls zu nennen. Ebenso macht es keinen Sinn, $\frac{m_j}{2}|\dot{Q}_j(t)|^2$ kinetische Energie oder $H(Q(t), M\dot{Q}(t))$ Gesamtenergie zu nennen (wobei H die klassische Hamiltonfunktion bezeichnet). Warum nicht? Weil diese Größen ihre Rolle und ihre Eigenschaften aufgrund der speziellen Form der klassischen Bewegungsgleichungen haben. Bohmsche Bahnen sind aber nicht klassisch.

Andererseits haben wir bereits in Abschnitt 3.3 gesehen, dass die Verteilung der quantenmechanischen „Impulsobservable“ einfach nur die asymptotische Verteilung der Geschwindigkeiten unter der freien Zeitentwicklung ist. Aus der asymptotischen Form der Lösung der freien Schrödingergleichung liest man analog zu Satz 13 aber sofort ab, dass auch die asymptotische Bohmsche Geschwindigkeit eines Teilchens gemäß dem Betragsquadrat der Fouriertransformierten der Wellenfunktion verteilt ist. Insbesondere sind die Bohmschen Trajektorien in diesem Fall zumindest asymptotisch für große Zeiten geradlinig mit konstanter Geschwindigkeit und somit klassisch.

Damit widerspricht die Bohmsche Mechanik aber in keiner Weise der Heisenbergschen Unschärferelation. Im Gegenteil, letztere ist eine Konsequenz der Bohmschen Mechanik. Die Varianz ΔQ der Ortsverteilung $|\psi(t_0, q)|^2$ zu einem festen Zeitpunkt t_0 und die Varianz ΔP der Verteilung $|\hat{\psi}(t_0, k)|^2$ der asymptotischen Geschwindigkeiten $\lim_{t \rightarrow \infty} \dot{Q}(t)$ unter freier Zeitentwicklung von ψ erfüllen die Ungleichung

$$\Delta Q \cdot \Delta P \geq \frac{1}{4}.$$

Das ist aber einfach nur eine mathematische Eigenschaft der Fouriertransformation.

5.2 Zur quantenmechanischen Beschreibung von Photonen

Die allgemeine Beschreibung des quantisierten elektromagnetischen Feldes im Rahmen der Quantenfeldtheorie würde den Rahmen dieser Einführung sprengen. Allerdings beschreibt man in Experimenten mit einer endlichen und festen Zahl von Photonen (wie beispielsweise dem Doppelspaltexperiment, dem Knallertest oder EPR-Bell-Experimenten) die Photonen mit einer Wellenfunktion ganz analog zu der von Elektronen. Diese Analogie aber auch die Unterschiede sollen kurz skizziert werden.

Die Wellenfunktion $\hat{\psi} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}^3$ eines einzelnen Photons in Fourierdarstellung (man spricht auch wieder von „Impulsdarstellung“) ist von der Form

$$\hat{\psi}(k) = \varepsilon_1(k) \hat{\psi}_1(k) + \varepsilon_2(k) \hat{\psi}_2(k), \quad (16)$$

wobei $(\varepsilon_1(k), \varepsilon_2(k), k/|k|)$ eine Orthonormalbasis des \mathbb{R}^3 ist. Die Basisvektoren $\varepsilon_1(k)$ und $\varepsilon_2(k)$ transversal zur Ausbreitungsrichtung $k/|k|$ spannen die Ebene der möglichen Polarisations-

richtungen auf. Damit erfüllt $\widehat{\psi}(k)$ die sogenannte transversale Eichung (auch Coulomb-eichung), d.h. $k \cdot \widehat{\psi}(k) = 0$ oder äquivalent $\operatorname{div} \psi(x) = 0$. Man lässt in der Notation aber oft die Polarisationsrichtungen weg und schreibt $\widehat{\psi}$ als zweikomponentige Wellenfunktion in der Form

$$\widehat{\psi} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}^2, \quad \widehat{\psi}(k) = \begin{pmatrix} \widehat{\psi}_1(k) \\ \widehat{\psi}_2(k) \end{pmatrix}.$$

Damit hat $\widehat{\psi}$ formal die gleiche Form wie die Wellenfunktion eines Teilchens mit Spin $\frac{1}{2}$. Man beachte aber, dass sich die Wellenfunktion eines Photons unter Drehungen des Raumes nicht wie eine Spinorwellenfunktion transformiert, sondern das Transformationsverhalten durch die ursprüngliche Form (16) gegeben ist. Das führt beispielsweise dazu, dass bei Experimenten mit Photonen statt Elektronen Messungen von Polarisationsrichtungen immer nur um den halben Winkel relativ zu Messungen der Spinrichtungen verschoben werden. So entspricht die perfekte Korrelation bei „Spinmessungen“ in entgegengesetzte Richtungen im Spin-Singlett-Zustand der Tatsache, dass bei Photonen im Polarisations-Singlett-Zustand bei senkrecht zueinander liegenden „Polarisationsmessungen“ perfekte Korrelation beobachtet wird.

Die zeitliche Entwicklung der Photonwellenfunktion ist durch die „Schrödingergleichung“

$$i \frac{\partial}{\partial t} \widehat{\psi}(t, k) = c|k| \widehat{\psi}(t, k)$$

bestimmt, wobei c die Lichtgeschwindigkeit ist. Nochmaliges Ableiten liefert

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \widehat{\psi}(t, k) = -c^2 |k|^2 \widehat{\psi}(t, k)$$

und Fourierrücktransformation liefert

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(t, x) = c^2 \Delta_x \psi(t, x),$$

also die Wellengleichung.

5.3 Nichtlokalität: Das Einstein-Podolsky-Rosen Argument und die Bellsche Ungleichung

Zu diesem Thema gibt es Literatur sehr unterschiedlicher Qualität. Die Originalarbeiten von Bell sind sehr klar und wenig technisch und daher auch zum Einstieg zu empfehlen. Ein guter Übersichtsartikel ist [7]. Im Folgenden werde ich nicht versuchen, den Vortrag von Herrn Lazarovici zu diesem Thema wiederzugeben, sondern nur die insgesamt recht einfache Struktur der Argumente zusammenfassen.

Zunächst zur berühmten Arbeit von Einstein, Podolsky und Rosen über die „Unvollständigkeit der Quantenmechanik“ von 1935. Die heute gebräuchliche und auch von mir im Folgenden gewählte Formulierung des Arguments geht auf David Bohm zurück. Wir betrachten ein System aus zwei Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen (vgl. Kapitel 6), deren gemeinsame Wellenfunktion so beschaffen ist, dass sich die beiden Teilchen in räumlich entgegengesetzte Richtungen voneinander

wegbewegen, sagen wir nach „links“ und nach „rechts“. Der gemeinsame „Spinzustand“ sei der sogenannte Singulett-Zustand. Das bedeutet, dass die Wellenfunktion Werte im eindimensionalen Singulett-Unterraum annimmt, siehe Kapitel 6 und 7. Für die folgenden Argumente spielt es aber eigentlich keine Rolle, was das mathematisch genau bedeutet. Wichtig sind nur die experimentell überprüfbareren Vorhersagen der Quantenmechanik für dieses System.

Da die beiden Teilchen nach einiger Zeit räumlich getrennt sind, kann man mit Hilfe des Stern-Gerlach Experiments (siehe Abschnitt 6.2) an jedem Teilchen einzeln den „Spin in eine bestimmte Raumrichtung \vec{s} messen“. Man macht dies, indem man das jeweilige Teilchen durch ein geeignetes inhomogenes in Richtung \vec{s} ausgerichtetes Magnetfeld fliegen lässt. Die zwei möglichen Ergebnisse einer solchen „Messung“ sind, dass das Teilchen entweder in Richtung \vec{s} oder in Richtung $-\vec{s}$ abgelenkt wird. Wir nennen die Ergebnisse dann Spin $+1$ oder -1 in Richtung \vec{s} .

Man stellt nun fest, dass für die oben beschriebene Singulett-Wellenfunktion die quantenmechanische Statistik der „Spinmessungen“ sehr einfach ist: Egal in welche Richtung und egal auf welcher Seite (links oder rechts) man die „Spinmessung“ durchführt, man erhält immer mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ das Ergebnis $+1$ und mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ das Ergebnis -1 . Die Ergebnisse sind also in der quantenmechanischen Beschreibung absolut zufällig. Führt man aber rechts und links jeweils eine „Spinmessung“ in derselben (aber ansonsten beliebigen) Richtung \vec{s} durch, so stellt man fest, dass die Ergebnisse perfekt antikorreliert sind: wenn das Experiment auf einer Seite $+1$ ergibt, so ergibt es auf der anderen Seite -1 .

Es gibt nun zwei Möglichkeiten, diese perfekte Antikorrelation zu erklären: Entweder die Ergebnisse aller möglichen „Spinmessungen“ standen schon vor der Durchführung des Experiments fest, salopp gesagt, die Teilchen haben sich zuvor abgesprochen, in welche Richtung sie jeweils fliegen. Oder die Ergebnisse standen vor der Durchführung des Experiments noch nicht fest. Dann müssen die beiden getrennten Teilsysteme aber während der Durchführung des Experiments in irgendeiner Form miteinander wechselwirken, um die perfekte Antikorrelation zu erreichen.

Da die beiden „Spinmessungen“ aber im Prinzip in beliebig großer räumlicher Entfernung voneinander stattfinden können, haben Einstein, Podolsky und Rosen (EPR) diese zweite Möglichkeit der Wechselwirkung während des Experiments explizit ausgeschlossen. Man nennt das die Lokalitätsannahme und es sprach 1935 alles dafür, dass dies eine sinnvolle Annahme ist. Dann bleibt aber nur die erste Möglichkeit, nämlich, dass die Ergebnisse schon vor der Messung feststanden. Da dies in der quantenmechanischen Beschreibung nicht enthalten ist, sprachen Einstein, Podolsky und Rosen von der Unvollständigkeit der Quantenmechanik. Es handelt sich bei der Arbeit von EPR also nicht wirklich um ein Paradoxon, auch wenn oft vom EPR-Paradoxon die Rede ist, sondern um ein sehr klar formuliertes Argument, dass aus der Lokalitätsannahme die Unvollständigkeit der quantenmechanischen Beschreibung folgert.

Fast 30 Jahre später, 1964, griff John Bell die Frage nach der lokalen Beschreibung quantenmechanischer Phänomene wieder auf. John Bell war einer der wenigen Physiker, welche die Bedeutung der Bohmschen Mechanik erkannt hatten. Die Bohmsche Mechanik ist, bis auf einen wichtigen Punkt, eine Vervollständigung der Quantenmechanik ganz im Sinne von Einstein. Dieser wichtige Punkt ist aber genau die Lokalitätsannahme, Bohmsche Mechanik ist nichtlokal. Bell gelang es jedoch mit seiner berühmten Ungleichung zu zeigen, dass jede

Theorie, welche die quantenmechanischen Vorhersagen für das oben beschriebene Experiment reproduziert (und insbesondere auch die Quantenmechanik selbst), die Lokalitätsannahme von EPR verletzen muss, also nichtlokal ist.

Das Argument ist völlig unabhängig von einer bestimmten theoretischen Beschreibung des Experiments und nimmt zunächst keinerlei Bezug auf die Quantenmechanik. Wir führen daher die folgende Notation ein: Da wir immer mit dem gleichen Anfangszustand für die beiden Teilchen starten, ist der Versuchsaufbau durch die Angabe der beiden Richtungen $s^l, s^r \in S^2$ für die Ausrichtung des Stern-Gerlach Magneten auf der linken und der rechten Seite eindeutig beschrieben. Die Ergebnisse der Spinmessungen nennen wir

$$X_{s^l, s^r}^l, X_{s^l, s^r}^r \in \{-1, +1\}.$$

Es bezeichnet also X_{s^l, s^r}^l den Ausgang des Experiments auf der linken und X_{s^l, s^r}^r den Ausgang des Experiments auf der rechten Seite, falls auf der linken Seite in Richtung s^l und auf der rechten Seite in Richtung s^r gemessen wird. Nun zeigt das Experiment (und es besagt auch die Quantenmechanik), dass X_{s^l, s^r}^l und X_{s^l, s^r}^r zufällig sind und jeweils die folgende Verteilung haben:

$$\mathbb{P}(X_{s^l, s^r}^l = 1) = \mathbb{P}(X_{s^l, s^r}^r = 1) = \frac{1}{2}. \quad (17)$$

Für die gemeinsame Verteilung findet man allerdings, dass X_{s^l, s^r}^l und X_{s^l, s^r}^r nicht unabhängig sind, sondern

$$\mathbb{P}(X_{s^l, s^r}^l = -X_{s^l, s^r}^r) = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (18)$$

gilt, wobei θ der Winkel zwischen s^l und s^r ist.

Bell stellte sich nun die Frage, ob man diese statistischen Vorhersagen überhaupt durch eine lokale Theorie im Sinne von EPR beschreiben kann. Die EPR-Definition von Lokalität lässt sich in dieser Notation denkbar einfach und präzise formulieren: in einer lokalen Theorie darf das Ergebnis X_{s^l, s^r}^l auf der linken Seite nicht davon abhängen, in welcher Richtung der Stern-Gerlach-Magnet auf der rechten, möglicherweise sehr weit entfernten Seite eingestellt ist, und umgekehrt. Das heißt es muss

$$X_{s^l, s^r}^l = X_{s^l}^l \quad \text{und} \quad X_{s^l, s^r}^r = X_{s^r}^r$$

gelten. Die Frage ist also, ob es Zufallsvariablen $X_{s^l}^l$ und $X_{s^r}^r$ gibt, die

$$\mathbb{P}(X_{s^l}^l = 1) = \mathbb{P}(X_{s^r}^r = 1) = \frac{1}{2}$$

und

$$\mathbb{P}(X_{s^l}^l = -X_{s^r}^r) = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (19)$$

erfüllen. Die Antwort ist nein, wie wir aus folgender Version der Bellschen Ungleichung schließen werden.

23 Satz. Bellsche Ungleichung

Seien $X_a^1, X_a^2, X_b^1, X_b^2, X_c^1, X_c^2 : \Omega \rightarrow \{-1, 1\}$, zweiwertige Zufallsvariablen mit

$$\mathbb{P}(X_j^1 = -X_j^2) = 1 \quad \text{für alle } j \in \{a, b, c\}. \quad (20)$$

Dann gilt

$$\text{(Bell)} \quad \mathbb{P}(X_a^1 = -X_b^2) + \mathbb{P}(X_b^1 = -X_c^2) + \mathbb{P}(X_c^1 = -X_a^2) \geq 1.$$

Beweis.

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(X_a^1 = -X_b^2) + \mathbb{P}(X_b^1 = -X_c^2) + \mathbb{P}(X_c^1 = -X_a^2) &= \\
\stackrel{(20)}{=} \mathbb{P}(X_a^1 = X_b^1) + \mathbb{P}(X_b^1 = X_c^1) + \mathbb{P}(X_c^1 = X_a^1) & \\
\geq \mathbb{P}(X_a^1 = X_b^1 \text{ oder } X_b^1 = X_c^1 \text{ oder } X_c^1 = X_a^1) & \\
= 1. &
\end{aligned}$$

Die letzte Gleichung gilt, da X_a^1, X_b^1, X_c^1 jeweils nur die Werte $+1$ und -1 annehmen können. Damit müssen auf jeden Fall zwei der drei Zufallsvariablen denselben Wert haben. \square

Um zu sehen, dass es die „lokalen“ Zufallsvariablen $X_{s^l}^1$ und $X_{s^r}^r$ für das EPR-Experiment nicht geben kann, wählen wir drei Richtungen $a, b, c \in S^2$ in einer Ebene mit Zwischenwinkel jeweils 120° . Dann erfüllen $X_a^1, X_a^r, X_b^1, X_b^r, X_c^1, X_c^r$ wegen (19) für $\theta = 0$ die Bedingung (20), also muss nach (Bell) gelten, dass

$$\mathbb{P}(X_a^1 = -X_b^r) + \mathbb{P}(X_b^1 = -X_c^r) + \mathbb{P}(X_c^1 = -X_a^r) \geq 1.$$

Dann kann aber (19) nicht erfüllt sein, da (19) impliziert, dass

$$\mathbb{P}(X_a^1 = -X_b^r) + \mathbb{P}(X_b^1 = -X_c^r) + \mathbb{P}(X_c^1 = -X_a^r) = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = \frac{3}{4} < 1.$$

Also kann es lokale Zufallsvariable $X_{s^l}^1$ und $X_{s^r}^r$, die (19) erfüllen, nicht geben.

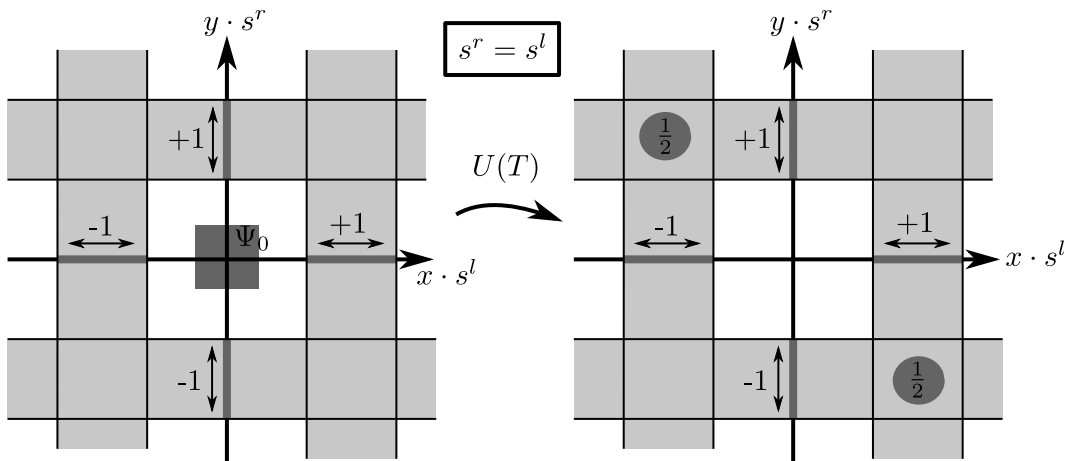
Das Nichtlokalitätsargument von Bell ist nicht nur sehr einfach und direkt, es hat auch eine weit über die Quantenmechanik hinausgehende Bedeutung. Es zeigt, dass es keine, wie auch immer geartete, lokale Beschreibung der im Experiment bestätigten Statistik (18) geben kann. Nicht nur Quantenmechanik ist nichtlokal, die Natur ist nichtlokal!

24 Bemerkung. Zur Lokalitätsbedingung

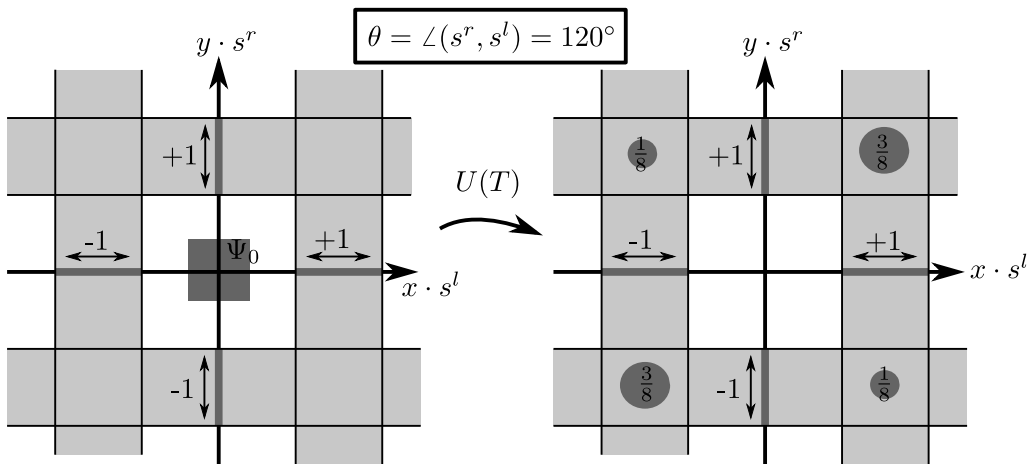
Die Existenz „lokaler“ Zufallsvariable $X_{s^l}^1, X_{s^r}^r : \Omega \rightarrow \{-1, +1\}$ entspricht genau der Vorstellung von Einstein, wie eine vollständige aber lokale Theorie die Statistik beim EPR-Bell-Experiment erklären sollte. Die vollständige Beschreibung des Zustandes $\omega \in \Omega$ legt dann die Ausgänge von allen Spinmessungen fest. Die Lokalitätsannahme könnte man noch präzisieren, indem man z.B. fordert, dass $X_{s^l}^1$ nur von Daten im Rückwärtslichtkegel des linken Experiments und $X_{s^r}^r$ nur von Daten im Rückwärtslichtkegel des rechten Experiments abhängen darf. Um mit dem Bellschen Argument die Existenz solcher Zufallsvariable auszuschließen, reicht es aber anzunehmen, dass $X_{s^r}^r$ nicht von s^l und $X_{s^l}^1$ nicht von s^r abhängt. Es gibt übrigens bis heute keine Einigkeit darüber, was genau die Annahmen des Bellschen Arguments sind. Manche Autoren sprechen davon, dass die Existenz solcher Zufallsvariable auch eine „Realitätsannahme“ beinhaltet. Ihnen zufolge zeigen die experimentellen Ergebnisse, welche die Bellsche Ungleichung verletzen, nicht die Nichtlokalität der Vorgänge, sondern, dass es keine „realistische“ Beschreibung mikroskopischer Vorgänge geben kann. Mir ist nicht klar, was das überhaupt bedeuten soll. Außerdem folgt die Existenz dieser Zufallsvariable ja aus der Lokalitätsannahme und dem EPR-Argument: Es gibt zwei Möglichkeiten, perfekte Antikorrelation zu erklären. Entweder es gibt eine Wechselwirkung auch noch während der Messung (Nichtlokalität), oder nicht (Lokalität). Im zweiten Fall kann perfekte Antikorrelation aber nur erreicht werden, wenn die Ergebnisse zu allen möglichen Spinmessungen schon vorher feststehen, d.h. wenn es die lokalen Zufallsvariable gibt.

Bell selbst sprach übrigens nirgends von einer „Realitätsannahme“ und ich habe versucht, hier Bells Sichtweise zu skizzieren.

Nun haben wir gezeigt, dass es im EPR-Bell-Experiment eine nichtlokale Wechselwirkung zwischen den beiden Teilen geben muss. Anders kann man die experimentellen Befunde nicht erklären. Es ist daher lehrreich, sich zu überlegen, wie in den Theorien Quantenmechanik und Bohmsche Mechanik, welche dieses Experiment ja korrekt beschreiben, die nichtlokale Fernwirkung zustande kommt. Dazu müssen wir uns wieder die Entwicklung der Wellenfunktion im Konfigurationsraum ansehen. Den Träger der Spinorwertigen Wellenfunktion $\Psi : \mathbb{R}_x^3 \times \mathbb{R}_y^3 \rightarrow \mathbb{C}^4$ skizzieren wir in den folgenden Bildern in der $x \cdot s^l - y \cdot s^r$ -Ebene, d.h. wir tragen nur die Komponenten von x und y auf, die durch das inhomogene Magnetfeld aufgespalten werden.



Stellt man den Magneten an beiden Seiten in dieselbe Richtung $s^l = s^r$ ein, so teilt sich die Wellenfunktion im Konfigurationsraum in zwei gleich große Teile (bzgl. der L^2 -Norm) auf, wobei man aus dem oberen Bild direkt abliest, dass (17) und (18) erfüllt sind.



Bei einem Zwischenwinkel $\theta = 120^\circ$ zwischen s^l und s^r ergibt sich ein anderes Bild der Wellenfunktion im Konfigurationsraum. Allerdings sind wieder (17) und (18) erfüllt. Nun kann man aber von der ersten Situation $s^l = s^r$ zur zweiten Situation $\theta = 120^\circ$ kommen, indem man nur einen der beiden Magneten, z.B. den rechten, dreht und den linken unverändert lässt. Dadurch ändert sich zwar die Statistik der Spinmessung auf der linken Seite nicht, es ist immer

noch die eine Hälfte der Wellenfunktion im Streifen $x \cdot s^1 = -1$ und die andere Hälfte der Wellenfunktion im Streifen $x \cdot s^1 = +1$. Der Träger der Wellenfunktion im Konfigurationsraum hat sich aber durch das Drehen des rechten Magneten stark verändert. Daher ist es auch nicht verwunderlich, dass die beiden oben beschriebenen Situationen zu verschiedenen Bohmschen Bahnen auch für das linke Teilchen führen, obwohl nur am rechten Magneten gedreht wurde. Die Nichtlokalität der Bohmschen Mechanik ist allerdings von vornherein leicht zu sehen: Die Geschwindigkeit des linken Teilchens

$$\dot{X}(t) = \text{Im} \frac{\nabla_x \Psi}{\Psi}(t, X(t), Y(t))$$

hängt vom Ort $Y(t)$ des rechten Teilchens ab, egal wie weit dieses entfernt ist. Dreht man am rechten Magneten, so verändert sich sowohl die Wellenfunktion Ψ als auch die Bahn $Y(t)$ und damit auch die Bahn $X(t)$, auch wenn sich lokal im Ortsraum bei $X(t)$ nichts verändert hat. In der Quantenmechanik kommt die Nichtlokalität ganz explizit durch den Kollaps der Wellenfunktion ins Spiel. Stellt man beispielsweise im Fall von $s^r = s^l$ fest, dass das linke Teilchen in Richtung s^1 abgelenkt wird, also s^1 -Spin $+1$ vorliegt, so kollabiert die Wellenfunktion auf den im ersten Bild rechten unteren Teil. Und das geschieht instantan, egal wie weit weg sich das andere Teilchen befindet. Damit verändern sich aber auch sofort die Wahrscheinlichkeitsvorhersagen für das rechte Teilchen. Manchmal liest man, dass der Kollaps kein „Realer“ sei, sondern sich nur unser Wissen über das System verändert hat. Die Vorstellung, dass, wenn wir nur genug wüssten, das Experiment lokal beschreibbar wäre, wird aber gerade durch das Bellsche Argument ausgeschlossen. Nimmt man also die Quantenmechanik mit Kollaps ernst, so geschieht letzterer nichtlokal. Nimmt man sie nicht ernst, so muss man entweder eine andere Theorie ernst nehmen, oder die Frage der Nichtlokalität stellt sich erst gar nicht.

6 Spin (Autor: Dustin Lazarovici)

Bisher haben wir Wellenfunktionen als (quadratintegrierbare) Funktionen $\psi_t : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{C}$ mit Werten in den komplexen Zahlen betrachtet. Tatsächlich werden Elementarteilchen wie Elektronen (allgemein die sogenannten „Fermionen“) aber durch *Spinorwertige* Wellenfunktionen beschrieben. Zunächst sind das, für ein Teilchen, L^2 -Funktionen

$$\Psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}^2, \quad \Psi(x) = \begin{pmatrix} \phi_1(x) \\ \phi_2(x) \end{pmatrix},$$

mit der Normierung

$$\|\Psi\|^2 = \int \bar{\Psi}(x) \Psi(x) dx = \int \begin{pmatrix} \phi_1^*(x) \\ \phi_2^*(x) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \phi_1(x) \\ \phi_2(x) \end{pmatrix} dx = \int (|\phi_1(x)|^2 + |\phi_2(x)|^2) dx = 1.$$

Warum nennen wir solche Wellenfunktionen „Spinorwertig“ und nicht einfach „ \mathbb{C}^2 -wertig“? Weil nicht allein die Zweiwertigkeit entscheidend ist, sondern das *Transformationsverhalten* unter Symmetrietransformationen, namentlich unter *Rotationen*. Damit ist folgendes gemeint: Aus der klassischen Physik kennen wir das Konzept von *Vektorfeldern* (etwa Kraftfelder). Ein

Vektorfeld ist aber nicht bloß eine beliebige Funktion $\mathbf{F} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$. An jedem Punkt x hat ja der Vektor $\mathbf{F}(x) = \begin{pmatrix} F_1(x) \\ F_2(x) \\ F_3(x) \end{pmatrix}$ eine geometrische Bedeutung, nämlich einen Betrag und eine

Richtung. Diese geometrische Bedeutung wird durch das Transformationsverhalten des Vektorfeldes manifestiert. Kurz gesagt: wenn wir das Koordinatensystem drehen, müssen sich die Vektoren an jedem Punkt mitdrehen.

25 Bemerkung. Rotationsinvarianz der Newtonschen Mechanik

Betrachten wir zum Beispiel die Newtonsche Bewegungsgleichung:

$$m\ddot{x} = \mathbf{F}(x)$$

für ein „Kraftfeld“ $\mathbf{F}(x)$. Diese Gleichung sollte *rotationsinvariant* sein. Das bedeutet, ist $x(t), t \in \mathbb{R}$ eine Lösung, dann auch $\tilde{x}(t) := Rx(t)$, wobei R eine dreidimensionale Drehmatrix ist, also $R \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ mit $R^t = R^{-1}$ und $\det(R) = 1$. Wir können das etwa so verstehen, dass $\tilde{x}(t)$ physikalisch *dieselbe* Lösungstrajektorie ist, aber dargestellt in einem mit R^{-1} gedrehtem Koordinatensystem. Die Newtonsche Bewegungsgleichung liefert nun

$$m \frac{d^2}{dt^2} \tilde{x}(t) = m R \ddot{x} = R \mathbf{F}(x) = R \mathbf{F}(R^{-1} \tilde{x}) \stackrel{!}{=} \tilde{\mathbf{F}}(\tilde{x}).$$

Transformieren sich also die Raumkoordinaten mit der Drehmatrix R , d.h. $x \rightarrow \tilde{x} = Rx$, so muss sich auch $\mathbf{F}(x)$ in jedem Punkt mit der Drehmatrix R transformieren, und zwar gemäß $\mathbf{F}(\cdot) \rightarrow \tilde{\mathbf{F}}(\cdot) = R \mathbf{F}(R^{-1} \cdot)$. Ein solches $\tilde{\mathbf{F}}$ nennt man dann Vektorfeld.

Ähnlich verhält es sich nun mit der Wellenfunktion eines Elektrons. An jedem Punkt x hat $\Psi(x)$ eine geometrische Bedeutung, eine „Richtung“, und wir müssen angeben, wie sich $\Psi(x)$ „mitdreht“, wenn wir das Koordinatensystem rotieren.

Im Fall von *3-Vektoren* wird die Transformation implementiert durch orthogonale, reelle 3×3 -Matrizen. Diese bilden die Matrixgruppe $SO(3) = \{A \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \mid A^t A = A A^t = E, \det(A) = 1\}$. *Spinoren* transformieren sich durch Anwendung unitärer, komplexer 2×2 -Matrizen, das sind Elemente der Matrixgruppe $SU(2) = \{A \in \mathbb{C}^{2 \times 2} \mid A^* A = A A^* = E, \det(A) = 1\}$.

Transformation von Spinoren unter Rotation

Sei $R(\alpha, \mathbf{n})$ die dreidimensionale Drehmatrix zur Drehung um den Winkel α mit Drehachse $\mathbf{n} \in \mathbb{R}^3, \|\mathbf{n}\| = 1$. Die entsprechende komplexe Drehmatrix für Spinoren ist dann

$$D(\alpha, \mathbf{n}) := \exp\left[-i \frac{\alpha}{2} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}\right].$$

Hierbei sind

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

die berühmten *Pauli-Matrizen* und $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = n_1 \sigma_1 + n_2 \sigma_2 + n_3 \sigma_3 \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$. (Statt $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ schreibt man auch $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$). Bei einer Koordinaten-Transformation $q \rightarrow \tilde{q} = R(\alpha, \mathbf{n})q$ transformiert sich also eine Spinor-Wellenfunktion gemäß:

$$\Psi(x) \rightarrow \tilde{\Psi}(\tilde{q}) = \exp\left[-i\frac{\alpha}{2}\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}\right]\Psi(R^{-1}\tilde{q}).$$

Ein solches Ψ nennen wir ein *Spinor-Feld*. Für jedes feste q ist $\Psi(q) \in \mathbb{C}^2$ ein *Spinor*.

Merke: Die Spinoren „drehen sich mit“ bei Rotationen des dreidimensionalen, physikalischen Raumes. Wenn wir also sagen, ein Spinor, als geometrisches Objekt, habe eine „Richtung“, so meinen wir tatsächlich die üblichen Raumrichtungen des dreidimensionalen, euklidischen Anschauungsraumes. Die komplexe Darstellung durch Elemente in \mathbb{C}^2 – statt durch Vektoren im \mathbb{R}^3 – mag ungewohnt sein, hat darüber hinaus aber nichts Mysteriöses an sich.

26 Bemerkung. Lie-Gruppen, Lie-Algebren und Darstellungen

- (a) Die kontinuierlichen Symmetriegruppen in der Physik, wie die dreidimensionale Drehgruppe, sind sogenannte *Lie-Gruppen*. Eine Lie-Gruppe G ist eine Gruppe mit der geometrischen Struktur einer glatten *Mannigfaltigkeit*. So hat etwa die Drehgruppe der euklidischen Ebene, $SO(2)$, die geometrische Struktur des Einheitskreises $S^1 = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 = 1\}$. Dies sieht man leicht über die komplexe Darstellung $SO(2) \cong \{e^{i\phi} \mid \phi \in [0, 2\pi)\} \subset \mathbb{C}$. Die Gruppe $SU(2)$ hat die geometrische Struktur der 3-dimensionalen Sphäre $S^3 = \{(w, x, y, z) \in \mathbb{R}^4 \mid w^2 + x^2 + y^2 + z^2 = 1\}$. Dies sieht man etwa über die Darstellung mittels *Quaternionen*.
- (b) Eine n -dimensionale reelle/komplexe *Darstellung* einer Lie-Gruppe G ist ein glatter Gruppenhomomorphismus $\rho : G \rightarrow GL(n, \mathbb{R})$, bzw. $\rho : G \rightarrow GL(n, \mathbb{C})$. Die Abbildung erfüllt also

$$\rho(g'g) = \rho(g') \cdot \rho(g), \quad \forall g, g' \in G.$$

Hierbei bezeichnet $GL(n, \mathbb{R})/GL(n, \mathbb{C})$ die Gruppe der invertierbaren, reellen/komplexen $n \times n$ -Matrizen. $\rho(g') \cdot \rho(g)$ ist die bekannte Multiplikation von Matrizen.

Die reellen, orthogonalen 3×3 -Matrizen (mit Determinante 1) entsprechen also einer dreidimensionalen, reellen Darstellung der Drehgruppe. Die komplexen, unitären 2×2 -Matrizen (mit Determinante 1) entsprechen hingegen einer zweidimensionalen, komplexen Darstellung der Drehgruppe, die *Spinor-Darstellung* genannt wird.

Genauer gesagt ist die Spinor-Darstellung keine richtige Darstellung der dreidimensionalen Drehgruppe (sondern eine sogenannte „projektive Darstellung“). Es gilt nämlich bloß $\rho(g' \cdot g) = \pm \rho(g') \cdot \rho(g)$ für beliebige Drehungen g und g' . Dies führt etwa zum bekannten Phänomen, dass eine Drehung um 360° auf den Spinoren nicht wie die Identität wirkt. Für eine beliebige Drehachse \mathbf{n} ist nämlich

$$D(2\pi, \mathbf{n}) = \exp[-i\pi\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}] = -E = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Eine solche konstante Phase hat aber keine physikalische Bedeutung, sodass es sich hier vielmehr um ein mathematisches Artefakt handelt.

(c) Noch genauer ist die Spinor-Darstellung keine Darstellung der $SO(3)$ sondern ihrer *universellen Überlagerungsgruppe* $SU(2)$. $S^3 \cong SU(2) \rightarrow SO(3)$ ist eine zweifache Überlagerung, es werden also jeweils gegenüberliegende Pole auf der S^3 (bzw. A und $-A$ in $SU(2)$) auf das selbe Gruppenelement der $SO(3)$ abgebildet. Formal: $SO(3) \cong SU(2)/\{\pm 1\}$. Dies lässt sich elegant über die Quaternionendarstellung von Drehungen zeigen. Es besteht offenbar ein Zusammenhang zwischen der Zweiwertigkeit der Überlagerungsabbildung $SU(2) \rightarrow SO(3)$ und der Zweiwertigkeit der projektiven Spinor-Darstellung von $SO(3)$, auf den wir hier aber nicht näher eingehen können.

(d) Die Pauli-Matrizen $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ sind *infinitesimale Generatoren* der Lie-Gruppe $SU(2)$. Sie bilden eine Basis der zugehörigen *Lie-Algebra* $\mathfrak{su}(2) = \{X \in \mathbb{C}^{2 \times 2} \mid X^* = -X, \text{tr}(X) = 0\}$ ¹.

Jedes $A \in SU(2)$ ist von der Form $A = e^{iX}$ für geeignetes $X \in \mathfrak{su}(2)$.²

Merke: X selbstadjungiert $\iff e^{iX}$ unitär. $\text{tr}(X) = 0 \iff \det(e^{iX}) = e^{i \text{tr}(X)} = 1$.

Auf einer Lie-Algebra ist eine sogenannte *Lie-Klammer* definiert. In einer Matrixdarstellung entspricht diese einfach dem Kommutator. Die Lie-Algebra muss abgeschlossen sein unter der Lie-Klammer, d.h. der Kommutator zweier Lie-Algebra Elemente ist wieder ein Element der Lie-Algebra. Für die Pauli-Matrizen gelten die Kommutatorrelationen

$$[\sigma_1, \sigma_2] = 2i \sigma_3, \quad [\sigma_2, \sigma_3] = 2i \sigma_1, \quad [\sigma_3, \sigma_1] = 2i \sigma_2.$$

6.1 Die Pauli-Gleichung

Die Spinorwertigkeit fermionischer Wellenfunktionen ist dann relevant, wenn man geladene Teilchen im elektromagnetischen Feld betrachtet, weil das Magnetfeld sozusagen an den Spin-Anteil koppelt. Die Wellengleichung für Teilchen mit Spin in einem externen, elektromagnetischen Feld ist die sogenannte *Pauli-Gleichung*:

$$i \hbar \partial_t \Psi = \left(\frac{1}{2m} (-i \hbar \nabla - e \mathbf{A})^2 + e \Phi \right) \Psi - \frac{e \hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \Psi$$

Hierbei bezeichnen:

- $\Psi(x) = \begin{pmatrix} \phi_1(x) \\ \phi_2(x) \end{pmatrix}$ die Spinor-Wellenfunktion.
- e ein Parameter, der mit der Ladung des Teilchens identifiziert wird.
- \mathbf{A} das Vektorpotential.
- Φ das elektrostatische Potential.
- $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ das Magnetfeld.

¹Hierbei bezeichnet $\text{tr}(X)$ die *Spur* von X , die Summe der Diagonalelemente.

²i.A. gilt dies für jede Lie-Gruppe zumindest *lokal*, also in der Nähe der Identität.

Die Pauli-Gleichung ist nicht gerade das, was man eine schöne Gleichung nennen würde und wir versuchen gar nicht erst, sie im Rahmen unserer Betrachtung „herzuleiten“. Sie ergibt sich vielmehr als nicht-relativistischer Limes der relativistischen *Dirac-Gleichung*, die wiederum eine ausgesprochen schöne Gleichung ist.

Die Pauli-Gleichung ist aber sehr gut geeignet, um den berühmten *Stern-Gerlach-Versuch* zu diskutieren, der bis heute das Paradigma einer „Spin-Messung“ darstellt. Natürlich wissen wir bereits, dass eine solche Sprechweise mit Vorsicht zu genießen ist und bei der nachfolgenden Diskussion wird besonders deutlich werden, warum man über eine „Messung“ des „Spins“ nicht in allzu naiver Weise denken darf.

6.2 Der Stern-Gerlach-Versuch

Experiment: Für den Stern-Gerlach-Versuch werden elektrisch neutrale Teilchen verwendet, die jedoch dieselben „Spin-Freiheitsgrade“ besitzen, wie freie Elektronen, also effektiv auch durch eine zweiwertige Spinor-Wellenfunktionen beschrieben werden. Otto Stern und Walther Gerlach führten ihr Experiment mit Silberatomen durch.

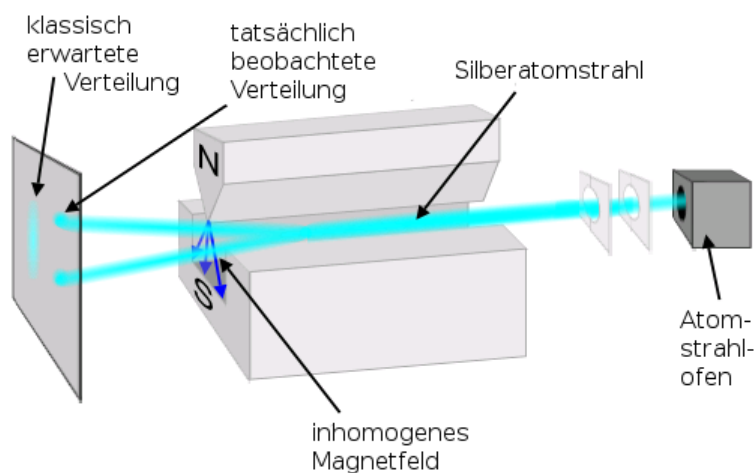


Abbildung 1: Stern-Gerlach Experiment (Grafik von Theresa Knott, Wikipedia Commons).

Ein Teilchenstrahl wird in Richtung eines Schirms geschickt und durchfliegt dabei ein inhomogenes Magnetfeld, dessen Gradient senkrecht zur Flugrichtung ist. Auf dem Schirm wird das Auftreffen der Teilchen registriert. Dabei beobachtet man keine kontinuierliche Ablenkung des Teilchenstrahls im Magnetfeld (wie man erwarten würde, wenn eine klassische Kraft auf die Teilchen mit zufällig verteilten magnetischen Momente wirkt), sondern eine diskrete Aufspaltung in zwei getrennte Teilstrahlen.

Theoretische Beschreibung: Wir wollen uns überlegen, wie die beobachtete Aufspaltung durch die Pauli-Gleichung beschrieben wird. Der Einfachheit halber nehmen wir eine Situation

an, in der das inhomogene Magnetfeld von der Form $\mathbf{B} = (0, 0, bz)$ ist und die Anfangswellenfunktion des Spineilchens von der Form

$$\Psi_0(x, y, z) = \chi(x, y) \begin{pmatrix} \varphi_1(z) \\ \varphi_2(z) \end{pmatrix} = \chi(x, y) \left(\varphi_1(z) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \varphi_2(z) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right).$$

Hier entkoppeln also die x, y -Bewegungen des Wellenpaketes von der z -Bewegung, d.h. die Gleichung für $\chi(x, y)$ ist im wesentlichen die normale Schrödingergleichung. Nur in der Gleichung für den z -Anteil spielt das Magnetfeld und der Spin eine Rolle. Wir nehmen ferner an, dass die Welle gut lokalisiert ist und sich schnell in, sagen wir, die x -Richtung bewegt, sodass das Magnetfeld für eine kurze Zeitspanne $\Delta t = \tau$ wirkt. Zu guter Letzt vergessen wir auch die Verbreiterung der Welle, die durch den Laplace-Anteil in der Pauli-Gleichung entsteht, und betrachten nur die z -Bewegung im Magnetfeld.

Wegen der Linearität der Zeitentwicklung können wir die Anteile $\Phi^{(1)}(z) = \varphi_1(z) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\Phi^{(2)}(z) = \varphi_2(z) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ getrennt betrachten. Die Anfangswellenpakete können wir schreiben als

$$\varphi_n(z) = \int e^{ikz} \hat{\varphi}_n(k) dk, \quad n = 1, 2$$

mit $\hat{\varphi}_n(k)$ konzentriert um $k_0 = 0$. Damit haben wir das Problem reduziert auf die Lösungen von:

$$i\hbar \partial_t \Phi^{(n)}(z, t) = \frac{e\hbar}{2m} (-1)^n b z \Phi^{(n)}(z, t), \quad n = 1, 2.$$

Beim Verlassen des Magnetfeldes, ist also

$$\Phi^{(n)}(z, \tau) = e^{-\frac{i}{\hbar} (-1)^n \mu b \tau z} \Phi^{(n)}(z, 0),$$

mit $\mu := \frac{e\hbar}{2m}$ (Bohr'sches Magneton). Das sind nun Wellenpakete in z -Richtung mit den Wellenzahlen $\tilde{k} = k - (-1)^n \frac{\mu b \tau}{\hbar}$, die sich weiter frei entwickeln. Und als Lösung der freien Wellengleichung ist die Dispersionsrelation, wie üblich, $\omega(\tilde{k}) = \frac{\hbar^2 \tilde{k}^2}{2m}$. Die Gruppengeschwindigkeit dieser Welle ist dann (mit $k_0 = 0$)

$$\frac{\partial \omega(\tilde{k})}{\partial \tilde{k}} = -(-1)^n \frac{\hbar \mu b \tau}{m}.$$

Das Wellenpaket $\Phi^{(1)}$ läuft also in positive z -Richtung (in Richtung des Gradienten von \mathbf{B}) („Spin rauf“) und $\Phi^{(2)}$ läuft in negative z -Richtung („Spin runter“). Dies ist die Aufspaltung der Wellenpakete im Stern-Gerlach Magneten, die - wenn wir sehr viele Teilchen durch das Magnetfeld schicken - der experimentell beobachteten Aufspaltung des Teilchenstrahls entspricht.

Natürlich haben wir aber immer eine *Superposition* der beiden Wellenanteile. Ein einzelnes Teilchen kommt aber *entweder* oben *oder* unten auf dem Schirm an - aber nicht sowohl als auch, oder halb-halb. Das ist also wieder das bekannte Messproblem!

Am einfachsten gelingt die vollständige Beschreibung der physikalischen Situation in der Bohmschen Mechanik. Demnach wird das Teilchen von einem der beiden Wellenanteile geführt. Es folgt also entweder dem Wellenpaket, das nach oben wandert - dann sagen wir es

habe „Spin rauf“ – oder es folgt dem Wellenpaket, das nach unten wandert und man sagt es habe „Spin runter“. Wir sehen aber ganz deutlich, dass der „Spin“ eigentlich *keine* Eigenschaft des Teilchens ist, sondern, wenn überhaupt, eine Eigenschaft der Welle. Ob für ein Teilchen „Spin rauf“ oder „Spin runter“ gemessen wird, ist in der Bohm’schen Beschreibung allein durch den Anfangsort festgelegt, den das Teilchen im Träger der Wellenfunktion hatte. Die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen nach oben/unten läuft, entspricht nun einfach der Wahrscheinlichkeit, dass sich das Teilchen (bzw. seine z -Koordinate) im Träger von $\Phi^{(1)}$ bzw. $\Phi^{(2)}$ befindet, nachdem sich die Wellenpakete hinreichend räumlich aufgespalten haben. Also:

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(\text{„Spin rauf“}) &= \int |\varphi_1(z)|^2 dz \\ \mathbb{P}(\text{„Spin runter“}) &= \int |\varphi_2(z)|^2 dz.\end{aligned}$$

Ordnen wir „Spin rauf“/„Spin runter“ die Werte $+1/-1$ zu, so ist der *Erwartungswert* folglich

$$\int |\varphi_1(z)|^2 - |\varphi_2(z)|^2 dz = \langle \Psi | \sigma_3 | \Psi \rangle,$$

sodass hier die bekannten Pauli-Matrizen als „Spin-Observablen“ auftauchen.

6.3 Eine zweite Spin-Messung

Nehmen wir an das Teilchen sei wie beschrieben durch einen Stern-Gerlach Magneten geflogen und wurde im Magnetfeld nach oben abgelenkt. Es hat also „ z -Spin nach oben“. Das bedeutet, dass es nun (effektiv) durch eine Wellenfunktion der Form

$$\Psi(q) = \chi(x, y)\varphi(z) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \psi(q) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

beschrieben wird. Das besondere an einer solchen Wellenfunktion ist offenbar, dass der sogenannte *Ortsanteil* und der *Spinanteil* entkoppelt sind. Dies gilt auch für Überlagerungen solcher Wellenfunktionen, die von der Form

$$\Psi'(q) = \psi'(q) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}; \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1,$$

sind. Möchten wir nun eine weitere „Spin-Messung“ mit einer derartigen Wellenfunktion beschreiben, so können wir für praktische Zwecke den Ortsanteil vergessen und nur mit dem Spinor $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ arbeiten. Für Spin-Experimente im Labor werden Wellenfunktionen denn auch häufig in derartige Spin-Zustände präpariert. Man darf aber nicht vergessen, dass solche Wellenfunktion nicht generisch sind, sondern speziell. Es ist nämlich ein weit verbreitetes Missverständnis, Spin als „diskreten Freiheitsgrad“ zu begreifen. Wie wir gesehen haben, tritt Spin in der Quantenmechanik in der Form auf, dass Wellenfunktion (für gewisse Arten von Teilchen) Spinorwertig sind, mit anderen Worten: Spinorfelder. Insbesondere kann der Spinoranteil im

allgemeinen von Punkt zu Punkt variieren. Daran ist also nichts „diskret“.

Kommen wir nun aber zurück zu unserem Teilchen mit „z-Spin nach oben“ und schauen, was bei einer anschließenden Spin-Messung in anderer Richtung passiert. Das Teilchen durchfliege also einen zweiten Stern-Gerlach Magneten, der, sagen wir, in x-Richtung orientiert ist, d.h. das Magnetfeld ist nun von der Form $\mathbf{B}' = (bx, 0, 0)$. Der relevante Wechselwirkungsanteil in der Pauli-Gleichung ist dann $H_\sigma = -\mu bx \sigma_x$.

Die Aufspaltung der Wellenpakete geschieht nun analog zu obiger Betrachtung, jedoch nicht gemäß der „oberen“ und „unteren“ Spinoreinträge (die gehörten bloß zufällig zu den Eigenvektoren von σ_z), sondern gemäß der *Eigenvektoren* von $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. Diese sind:

$$|\uparrow\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad |\downarrow\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Wir schreiben nun die Spinoren in dieser neuen Basis, also unsere Wellenfunktion als

$$\Psi(q) = \psi(q) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \psi(q) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_x + |\downarrow\rangle_x).$$

Dann läuft, gemäß der vorigen Betrachtung, der Anteil $\Psi^+(q) = \psi(q) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle_x$ in positive x -Richtung und der Anteil $\Psi^-(q) = \psi(q) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle_x$ in negative x -Richtung. Die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen in positive/negative x -Richtung abgelenkt wird ist jeweils

$$\int \overline{\Psi^\pm} \Psi^\pm d^3q = \int \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 |\psi(q)|^2 d^3q = \frac{1}{2} \int |\psi(q)|^2 d^3q = \frac{1}{2},$$

und wir sehen, dass wir den Ortsanteil hier tatsächlich umsonst „mitgeschleppt“ haben. Sind nämlich Spin- und Ortsanteil entkoppelt, so können wir die Wahrscheinlichkeiten auch direkt aus den Spinor-Skalarprodukten berechnen:

$$\mathbb{P}(\sigma_x = +1) = \left| \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\rangle \right|^2 = |\langle \uparrow_x | \uparrow_z \rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

$$\mathbb{P}(\sigma_x = -1) = \left| \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\rangle \right|^2 = |\langle \downarrow_x | \uparrow_z \rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

Der Erwartungswert berechnet sich als:

$$\mathbb{E}(\sigma_x) = \langle \uparrow_z | \sigma_x | \uparrow_z \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0.$$

Es mag zunächst überraschen, dass die Pauli-Matrizen, die wir als infinitesimale Generatoren der Drehgruppe eingeführt haben, bei der statistischen Beschreibung von Spin-Messungen als „Spin-Observable“ auftreten. Allerdings ist dies schon aus Symmetrieüberlegungen überaus

plausibel. Eine Wellenfunktion mit definiertem Spin in eine bestimmte Richtungen – sagen wir in x -Richtung – sollte invariant sein unter Rotationen um die x -Achse. Es sollte also gelten:

$$D(\alpha, \mathbf{e}_x) \Psi^+ = e^{-i\frac{\alpha}{2}\sigma_1} \Psi^+ = e^{i\xi} \Psi^+, \quad \forall \alpha \in [0, 2\pi[$$

mit einer konstanten Phase $e^{i\xi}$ (die vom Drehwinkel α abhängen kann). Dies ist aber äquivalent zu:

$$\sigma_1 \Psi^+ = \lambda \Psi^+, \quad \text{mit } \lambda = \frac{2\xi}{\alpha} \in \mathbb{C}.$$

Das heißt Ψ^+ (bzw. der Spinoranteil davon) muss ein Eigenzustand von σ_1 sein, bzw. dem infinitesimalen Generator der entsprechenden Drehung. Die Pauli-Matrizen haben nun die Eigenwerte ± 1 , die zu den beiden möglichen Spin-Einstellungen in der jeweiligen Richtung gehören (in der Tat ist also $e^{-i\frac{\alpha}{2}\sigma_1} |\uparrow\rangle_x = e^{-i\frac{\alpha}{2}} |\uparrow\rangle_x$).

In der Physik ordnet man den Spin-Einstellungen üblicherweise die Werte $\pm \frac{\hbar}{2}$ zu, die Spin-Observablen sind dann $\frac{\hbar}{2}\sigma_k$. Man spricht dann bei Fermionen von "halbzahligem Spin", in unserem Fall konkret von „Spin-1/2-Teilchen“. Dies hängt mit der Zweiwertigkeit der Spinordarstellung der Rotationsgruppe zusammen, die Details hier sind aber nicht entscheidend.

Übungsaufgabe: Berechnen Sie für den Spin-Zustand $\chi = \alpha |\uparrow\rangle_z + \beta |\downarrow\rangle_z = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ die Wahrscheinlichkeiten $\mathbb{P}(\sigma_x = +1)$ und $\mathbb{P}(\sigma_x = -1)$, sowie den Erwartungswert $\mathbb{E}(\sigma_x) = \langle \chi | \sigma_1 | \chi \rangle$.

6.4 N Teilchen mit Spin

Bislang haben wir nur Spinorwellenfunktionen für ein einzelnes Teilchen betrachtet. Zum Abschluss sei noch kurz erwähnt, wie ein System von N Teilchen mit Spin beschrieben wird. Eine Spinorwellenfunktion für N Spin-1/2-Teilchen ist eine normierte, quadratintegrierbare Funktion:

$$\Psi : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \bigotimes_N \mathbb{C}^2$$

Hierbei ist \mathbb{R}^{3N} wie üblich der Konfigurationsraum von N Teilchen. $\bigotimes_N \mathbb{C}^2 = \underbrace{\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \dots \otimes \mathbb{C}^2}_{N \text{ mal}}$

bezeichnet das N -fache *Tensorprodukt* von \mathbb{C}^2 . Das Tensorprodukt können wir hier nicht im Detail besprechen, möchten aber dennoch versuchen in aller Kürze eine Intuition dafür zu vermitteln. Wichtig ist, dass das N -fache Tensorprodukt *nicht* dasselbe ist, wie das N -fache kartesische Produkt $\mathbb{C}^2 \times \dots \times \mathbb{C}^2 = \mathbb{C}^{2N}$. \mathbb{C}^{2N} ist ein $2N$ -dimensionaler, komplexer Vektorraum, das Tensorprodukt $\bigotimes_N \mathbb{C}^2$ hingegen ist ein 2^N -dimensionaler komplexer Vektorraum!

Wie Sie wissen, wird der Raum der L^2 -Funktionen auf dem Konfigurationsraum \mathbb{R}^{3N} aufgespannt von Produktwellenfunktionen der Form $\psi(q_1, q_2, \dots, q_N) = \varphi_1(q_1) \cdot \varphi_2(q_2) \cdot \dots \cdot \varphi_N(q_N)$. Sie wissen aber auch, dass solche Produktwellenfunktionen sehr speziell sind. Generische Wellenfunktionen sind *keine* Produkte, sondern (ggf. unendliche) Linearkombinationen davon,

mit anderen Worten, sie sind *verschränkt*. Genauso verhält es sich mit den Spinoren.

$\bigotimes_N \mathbb{C}^2$ wird als Vektorraum aufgespannt von reinen Tensorprodukten der Form

$$\chi = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} \alpha_N \\ \beta_N \end{pmatrix},$$

typische Elemente sind aber *keine* Produkte, sondern Linearkombinationen davon. Eine generische Wellenfunktion für N Teilchen mit Spin ist also sowohl in ihrem Ortsanteil, als auch in ihrem Spinanteil verschränkt! Sie können sich denken, dass das schnell kompliziert wird und unhandlich in der Notation. In der Praxis genügt es aber häufig wieder den Spinanteil alleine zu betrachten. Und hier werden die Verschränkungen recht „gutmütig“, wenn man Zustände mit festem *Gesamtspin* betrachtet.

Schauen wir uns diese Situation für ein Zweiteilchensystem an, wie es etwa im EPR-Bohm-Experiment verwendet wird. Zustände mit festem „Gesamtspin“ sind Eigenzustände des Operators

$$\Sigma = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}^{(1)} + \boldsymbol{\sigma}^{(2)})^2,$$

wobei $\sigma_i^{(1)} = \sigma_i \otimes 1$ auf die erste Spinorkomponente wirkt und $\sigma_j^{(2)} = 1 \otimes \sigma_j$ auf die zweite. Dieser Operator hat zwei Eigenwerte, 1 und 0, und der Spinorraum $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ zerfällt in die entsprechenden Eigenräume³. Ist $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ eine beliebige Basis des \mathbb{C}^2 , so wird der Eigenraum mit Gesamtspin 1 aufgespannt von den Spin-Zuständen:

$$\left. \begin{array}{l} |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle) \\ |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \end{array} \right\} \Sigma = 1$$

Dies ist das sogenannte *Spin-Triplett*. Der Eigenraum von Σ zum Eigenwert 0 ist entsprechend nur 1-dimensional. Er wird aufgespannt vom rotationssymmetrischen *Spin-Singulett* Zustand

$$\left. \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle) \right\} \Sigma = 0.$$

Hat man also einen Zweiteilchen-Zustand mit Gesamtspin 0, so weiß man, dass es sich um den Singulett-Zustand handelt. In diesem ergibt eine Spin-Messung an beiden Teilchen immer eine jeweils *entgegengesetzte* Spin-Orientierung, wenn der Spin in selber Richtung gemessen wird. Es ist nämlich (etwa für eine Messung in z-Richtung):

$$(\sigma_z^{(1)} \otimes 1 + 1 \otimes \sigma_z^{(2)}) (|\uparrow\rangle_z \otimes |\downarrow\rangle_z - |\downarrow\rangle_z \otimes |\uparrow\rangle_z) = 0.$$

Übungsaufgabe: Zeigen Sie obige Gleichung. Zeigen Sie ferner, dass der Singulett-Zustand rotationssymmetrisch ist, also bezüglich jeder (orthonormalen) Basis des \mathbb{C}^2 die gleiche Form hat.

³in irreduzible Darstellungen der Drehgruppe

7 Atomaufbau und Quantenmechanik (Autor: Jonas Lampart)

In diesem Abschnitt werden Methoden diskutiert, mit denen Eigenschaften von Atomen ausgehend von der Schrödingergleichung berechnet werden können. Nur für das Wasserstoffatom ist eine explizite Lösung möglich. In allen anderen Fällen können quantitative Aussagen durch Näherungsmethoden und numerische Berechnung, sowie qualitative Aussagen durch Symmetriebetrachtungen gewonnen werden.

Alle Probleme werden unter Vernachlässigung der Kernbewegung, das heißt in der Näherung unendlich schwerer (im Vergleich zu den Elektronen) Kerne, behandelt.

7.1 Die Struktur des Wasserstoffproblems

Wir betrachten ein Elektron im Potential eines Kerns mit Ladungszahl Z . Der Hamiltonoperator des Problems ist

$$H = -\Delta_x - \frac{Z}{|x|},$$

mit Definitionsbereich $D(H) = H^2(\mathbb{R}^3) \subset L^2(\mathbb{R}^3)$. Von Interesse sind besonders die *gebundenen Zustände*, das heißt Lösungen der stationären Gleichung

$$H\psi = E\psi$$

mit $\psi \in D(H)$ und $E \in \mathbb{R}$. Das kleinste E , für das diese Gleichung eine Lösung hat, ist die *Grundzustandsenergie*. Sie ist (falls sie existiert) gegeben durch

$$E_0 = \min_{\psi \neq 0} \frac{\langle \psi, H\psi \rangle}{\|\psi\|^2}.$$

Rotationsinvarianz des Zentralkraftproblems

Für ihre Bestimmung ist, wie beim Zentralkraftproblem in der klassischen Mechanik, die Ausnutzung der Rotationssymmetrie des Problems von entscheidender Bedeutung. In der Quantenmechanik werden Symmetrietransformationen wie Rotationen durch eine Darstellung der Symmetriegruppe ($SO(3)$) als lineare Abbildungen auf dem Raum der Zustände ($L^2(\mathbb{R}^3)$) beschrieben. Wir haben eine unitäre Darstellung von $SO(3)$ auf $L^2(\mathbb{R}^3)$ (siehe Kapitel 8)

$$\begin{aligned} \Gamma : SO(3) &\rightarrow \mathcal{U}(L^2(\mathbb{R}^3)) \\ (\Gamma(R)f)(x) &= f(R^{-1}x), \end{aligned}$$

welche eine Drehung des Koordinatensystems mit der Rotationsmatrix R beschreibt.

Die Rotationsinvarianz des Problems äußert sich nun dadurch, dass für jede Drehung R

$$H\Gamma(R)\psi = \Gamma(R)H\psi$$

gilt. Für das Coulomb-Potential $V(x) = Z/|x|$ ausgeschrieben lautet diese Gleichung

$$V(x)\Gamma(R)\psi(x) = \frac{Z}{|x|}\psi(R^{-1}x) = \frac{Z}{|R^{-1}x|}\psi(R^{-1}x) = \Gamma(R)(V(x)\psi(x)).$$

Sie gilt also, weil das Potential invariant unter Drehungen ist.

Symmetrien und Erhaltungsgrößen in der Quantenmechanik

Ist nun ψ ein stationärer Zustand mit Energie E , so folgt aus der Rotationsinvarianz:

$$H\Gamma(R)\psi = \Gamma(R)H\psi = \Gamma(R)E\psi = E\Gamma(R)\psi.$$

Für jede Drehmatrix R ist also $\psi(R^{-1}x)$ wieder ein stationärer Zustand mit der gleichen Energie, auch wenn nicht notwendigerweise $\psi(x) = \psi(R^{-1}x)$ gilt. Ein Eigenzustand von H muss also nicht rotationsinvariant sein, wohl aber der Eigenraum zum Eigenwert E .

Die eben durchgeführte Rechnung zeigt auch, dass wenn ψ ein Eigenzustand von $\Gamma(R)$ mit Eigenwert λ ist (also zum Beispiel rotationsinvariant, was $\lambda = 1$ entspricht), dann ist auch $H\psi$ Eigenzustand von $\Gamma(R)$ zu λ . Damit ist auch $e^{-iHt}\psi$ Eigenzustand mit Eigenwert λ , dieser Wert ist also unter der Zeitentwicklung erhalten. Solche erhaltenen Eigenwerte werden oft „Quantenzahlen“ genannt.

Dies ist die quantenmechanische Entsprechung des Noether-Theorems der klassischen Mechanik, also der Aussage dass zu jeder (kontinuierlichen) Symmetrie eines Systems eine Erhaltungsgröße gehört.

Erzeuger von Rotationen und Drehimpuls

Zu der Darstellung Γ gehören ihre Erzeuger oder Generatoren, die gewöhnlich „Drehimpulsoperatoren“ genannt werden. Für Drehungen $R(\alpha, n)$ um die Achse $n \in \mathbb{R}^3$ mit Winkel α ist der Erzeuger definiert durch

$$L_n\psi(x) := -i\frac{d}{d\alpha}\Big|_{\alpha=0} \Gamma(R(\alpha, n))\psi(x) = -i\frac{d}{d\alpha}\Big|_{\alpha=0} \psi(R(-\alpha, n)x).$$

L_3 beschreibt also zum Beispiel eine Ableitung von ψ nach dem Drehwinkel um die x_3 -Achse, also (in Kugelkoordinaten (r, φ, ϑ))

$$L_3 = i\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

und erzeugt Drehungen um die x_3 -Achse in dem Sinne, dass $e^{-i\alpha L_3} = \Gamma(R(\alpha, e_3))$. Mit diesen Operatoren definiert man den Gesamtdrehimpuls-Operator

$$L^2 := L_1^2 + L_2^2 + L_3^2.$$

Diese Operatoren kommutieren natürlich ebenfalls mit H .

Separation in Winkel- und Radialgleichung

In Kugelkoordinaten hat H die Form

$$H = -\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right)^2 + \frac{L^2}{r^2} - \frac{Z}{r}.$$

Wie wir gesehen haben, sind die Eigenräume von L^2 invariant unter H . Wir können also zunächst die möglichen Werte des Gesamtdrehimpulses bestimmen und dann die stationäre Schrödingergleichung bei festem Eigenwert λ von L^2 lösen. Das entspricht einem Ansatz $\psi(r, \varphi, \vartheta) = \rho(r)\Theta(\varphi, \vartheta)$. Da L^2 nur Winkelableitungen enthält, lautet das Eigenwertproblem

$$L^2\Theta(\varphi, \vartheta) = \lambda\Theta(\varphi, \vartheta).$$

Die möglichen Eigenwerte haben die Form $l(l+1)$ mit $l \in \mathbb{N}_0$. Die zugehörigen Eigenfunktionen sind die Kugelflächenfunktionen Y^l .

Die radiale Gleichung bei festem Gesamtdrehimpuls ist gegeben durch

$$\left(- \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \right)^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{Z}{r} \right) \rho(r) = E\rho(r).$$

Substitution $\rho(r) = u(r)/r$ bringt sie auf die Form einer eindimensionalen Schrödingergleichung

$$\left(- \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{Z}{r} \right) u(r) = Eu(r),$$

mit der Randbedingung $u(0) = 0$, die aus der ursprünglichen Bedingung $\psi \in H^2(\mathbb{R}^3)$ folgt. Durch Substitution $y = Zr$ kann man leicht sehen, dass wenn $u(r)$ die Gleichung mit $Z = 1$ und Eigenwert E löst, so ist $u(Zr)$ eine Lösung mit beliebigem $Z > 0$ und Eigenwert $Z^2 E$. Die Eigenwerte bei gegebenem l und $Z = 1$ sind $-1/n^2$ mit $n \geq l + 1$ mit zugehörigen Eigenfunktionen der Form $p(r)e^{-cr}$ mit einem Polynom p und einer Konstanten c , die von l und n abhängen können.

Der Hamiltonoperator des Wasserstoffproblems hat also Grundzustandsenergie $E_0 = -1$ und unendlich viele negative Eigenwerte. Der Eigenraum zu gegebenem n und l hat Dimension $2l + 1$. Da die Energie unabhängig von l ist, hat also der Eigenraum zum Eigenwert $E = -Z^2/n^2$ die Dimension $\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$.

7.2 Hamiltonoperatoren für Atome

Für ein Atom mit Kernladung Z und N Elektronen ist der Hamiltonoperator gegeben durch

$$H = \sum_{i=1}^N -\Delta_{q_i} - \frac{Z}{|q_i|} + \sum_{i < j \leq N} \frac{1}{|q_i - q_j|}.$$

Dabei bezeichnet $q_i \in \mathbb{R}^3$ die Koordinaten des i -ten Elektrons. Der Operator setzt sich zusammen aus der Summe der Einteilchenoperatoren $H_i = -\Delta_{q_i} - \frac{Z}{|q_i|}$ und der Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen.

Für Helium mit $Z = 2$ und $N = 2$ haben wir nach Umbenennung $x := q_1$, $y := q_2$:

$$H = -\Delta_x - \frac{2}{|x|} - \Delta_y - \frac{2}{|y|} + \frac{1}{|x - y|}.$$

Wegen seiner einfacheren Form wird im Folgenden in erster Linie dieser Operator behandelt. Alle Aussagen gelten aber in analoger Form für beliebige $N \leq Z$. Wir behandeln nun die Symmetrieeigenschaften des Problems und die Frage, welche Zustände den physikalischen Definitionsbereich von H bilden.

Rotationssymmetrie

Wellenfunktionen, die von den Koordinaten mehrerer Teilchen abhängen, tragen mehrere verschiedene Darstellungen der Drehgruppe. So können zum einen die Koordinaten nur eines einzelnen, zum Beispiel des ersten, Teilchens transformiert werden:

$$\Gamma_1(R)f(x, y) = f(R^{-1}x, y).$$

Zum anderen können alle Koordinaten gleichzeitig transformiert werden, also

$$\Gamma_g(R)f(x, y) = f(R^{-1}x, R^{-1}y).$$

Wegen der Wechselwirkung ist der Hamiltonoperator nicht invariant unter den Darstellungen für einzelne Teilchen, denn im Allgemeinen ist $|R^{-1}x - y| \neq |x - y|$. Da aber $|R^{-1}(x - y)| = |x - y|$, ist H invariant unter Γ_g .

Zu jeder dieser Darstellungen gehören wieder ihre Erzeuger. Wir bezeichnen mit L_i^2 den aus Γ_i konstruierten Gesamtdrehimpuls des i -ten Teilchens und mit Λ^2 den zur Darstellung Γ_g gehörigen. Die eben diskutierten Invarianzeigenschaften bedeuten für diese Folgendes: Startet das System zum Zeitpunkt $t = 0$ in einem Zustand ψ mit Eigenwerten $L_1^2\psi = l_1(l_1 + 1)\psi$, $L_2^2\psi = l_2(l_2 + 1)\psi$ und $\Lambda^2\psi = \lambda(\lambda + 1)\psi$, dann ist λ unter der Zeitentwicklung erhalten, l_1 und l_2 hingegen nicht.

Spin

Bisher wurde der Spin der Elektronen vernachlässigt. Für das Wassertoffproblem spielen die Spin-Freiheitsgrade keine Rolle, da der Hamiltonoperator invariant unter Spinrotationen ist. Im Allgemeinen sind sie aber wichtig, wie wir im Folgenden sehen werden. Die Wellenfunktion für ein Elektron nimmt Werte in \mathbb{C}^2 an. Wir können das mit einer zusätzlichen Variable $s \in \{\pm 1/2\}$ umschreiben als $\psi = \psi(x, s)$ mit

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi(x, +1/2) \\ \psi(x, -1/2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_+(x) \\ \psi_-(x) \end{pmatrix}.$$

Die Wellenfunktion für zwei Elektronen hängt nun von der Gesamtkonfiguration $(x, s_1), (y, s_2)$ ab. Es gibt insgesamt vier Einstellungsmöglichkeiten in $\{\pm 1/2\}^2$, je zwei für gleiche und verschiedene Werte von s . Wir schreiben die Wellenfunktion dann als Matrix

$$\Psi(x, y) = \begin{pmatrix} \Psi(x, y, s_1 = s_2 = +1/2) & \Psi(x, y, s_1 = +1/2, s_2 = -1/2) \\ \Psi(x, y, s_1 = -1/2, s_2 = +1/2) & \Psi(x, y, s_1 = s_2 = -1/2) \end{pmatrix}.$$

Für Einteilchenwellenfunktionen $\psi(x, s_1), \varphi(y, s_2)$ identifizieren wir den Produktzustand aus beiden mit der Matrix

$$\psi(x)\varphi(y)^T = \begin{pmatrix} \psi_+(x)\varphi_+(y) & \psi_+(x)\varphi_-(y) \\ \psi_-(x)\varphi_+(y) & \psi_-(x)\varphi_-(y) \end{pmatrix}. \quad (21)$$

27 Bemerkung. Der Zustandsraum für N Teilchen

Der Zustandsraum für ein System aus zwei Teilchen, deren Zustand als isoliertes Teilchen durch ein Element eines Hilbertraumes \mathcal{H} (also zum Beispiel $L^2(\mathbb{R}^3)$) beschrieben wird, ist das Tensorprodukt $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$. Für N Teilchen ist der Zustandsraum entsprechend das N -fache Tensorprodukt $\mathcal{H}^{\otimes N}$. Das Schreiben von $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2) \otimes L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$ als matrixwertige Wellenfunktionen auf \mathbb{R}^6 entspricht der Identifikation $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \cong \text{Mat}(2 \times 2, \mathbb{C})$ durch Gleichung (21)

Um $|\Psi(x, y)|^2$ in der Matrixform zu berechnen, müssen wir das Skalarprodukt für Matrizen definieren. Die natürliche Wahl ist

$$\langle \Psi, \Phi \rangle := \text{tr}(\Psi^* \Phi),$$

wobei tr die Spur und $\Psi^* = \overline{\Psi}^T$ die adjungierte Matrix bezeichnet. Dies ist auch die richtige Wahl, denn für Produktzustände ergibt sich

$$\langle \psi_1 \varphi_1^T, \psi_2 \varphi_2^T \rangle = \text{tr}((\psi_1 \varphi_1^T)^* \psi_2 \varphi_2^T) = \text{tr}(\overline{\varphi_1} \overline{\psi_1}^T \psi_2 \varphi_2^T) = \langle \psi_1, \psi_2 \rangle \text{tr}(\overline{\varphi_1} \varphi_2^T) = \langle \psi_1, \psi_2 \rangle \langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle$$

was dem Bild von unabhängigen Teilchen im Produktzustand entspricht.

Die Wirkung von $SU(2)$ auf den Einteilchenwellenfunktionen induziert eine zu Γ_g analoge Darstellung auf Zweielektronenzuständen: Für $A \in SU(2)$ ist der Produktzustand aus $A\psi$ und $A\varphi$ gegeben durch

$$A\psi(A\varphi)^T = A\psi\varphi^T A^T,$$

was sich als $A\Psi A^T$ auf allgemeine 2×2 -Matrizen fortsetzen Ψ lässt. Diese Darstellung ist unitär bezüglich des eben definierten Skalarprodukts, da $A^* = A^{-1}$ und die Spur zyklische Vertauschung zulässt:

$$\text{tr}((A\Psi A^T)^* A\Phi A^T) = \text{tr}((A^*)^T \Psi^* A^* A\Phi A^T) = \text{tr}(A^T (A^*)^T \Psi^* \Phi) = \text{tr}(\Psi^* \Phi).$$

28 Bemerkung. Spinsingulett und -triplett in Matrixform

So wie Λ^2 den Gesamtdrehimpuls des Atoms definiert, kann diese Darstellung benutzt werden, um den Gesamtspin einer Wellenfunktion für zwei Elektronen zu definieren. Dabei werden Ergebnisse und Notationen aus Kapitel 6 verwendet. Zur Bestimmung des Gesamtspins für Singulett und Triplet berechnen wir zunächst die Erzeuger

$$\begin{aligned} \Sigma_1 \Psi &:= -i \frac{d}{d\alpha} \Big|_{\alpha=0} e^{i\alpha\sigma_1/2} \Psi (e^{i\alpha\sigma_1/2})^T = \frac{1}{2} (\sigma_1 \Psi + \Psi \sigma_1), \\ \Sigma_2 \Psi &= \frac{1}{2} (\sigma_2 \Psi + \Psi \sigma_2^T) = \frac{1}{2} (\sigma_2 \Psi - \Psi \sigma_2) = \frac{1}{2} [\sigma_2, \Psi], \\ \Sigma_3 \Psi &= \frac{1}{2} (\sigma_3 \Psi + \Psi \sigma_3). \end{aligned}$$

Der Gesamtspin-Operator ist dann wieder gegeben durch

$$\Sigma^2 = \Sigma_1^2 + \Sigma_2^2 + \Sigma_3^2.$$

Der Zustand mit Spinanteil $|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle$, also das Singulett, schreibt sich in der Matrixform als

$$|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = i\sigma_2. \quad (22)$$

Damit kann die Wirkung der Erzeuger auf den Zustand leicht aus den Relationen der Pauli-matrizen

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \quad \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}$$

berechnet werden und man findet

$$\Sigma_1 i\sigma_2 = \Sigma_2 i\sigma_2 = \Sigma_3 i\sigma_2 = 0.$$

Also $\Sigma^2 i\sigma_2 = S(S+1)i\sigma_2 = 0$ und dieser Zustand hat tatsächlich Gesamtspin $S = 0$.

Wir bestimmen nun den Wert von S für einen der Triplettzustände

$$|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma_1.$$

Auf diesem wirken die Erzeuger und ihre Quadrate

$$\begin{aligned} \Sigma_1 \sigma_1 &= \frac{1}{2}(\sigma_1^2 + \sigma_1^2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & \Sigma_1^2 \sigma_1 &= \sigma_1, \\ \Sigma_2 \sigma_1 &= \frac{1}{2}[\sigma_2, \sigma_1] = -i\sigma_3, & \Sigma_2^2 \sigma_1 &= -i\Sigma_2 \sigma_3 = -\frac{i}{2}[\sigma_2, \sigma_3] = \sigma_1, \\ \Sigma_3 \sigma_1 &= 0, & \Sigma_3^2 \sigma_1 &= 0. \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich $\Sigma^2 \sigma_1 = 2\sigma_1 = S(S+1)\sigma_1$, also $S = 1$. Die Darstellungstheorie von $SU(2)$ (siehe Kapitel 8) impliziert nun, dass der Vektorraum, der von der Bahn von σ_1 , also von $\{A\sigma_1 A^T | A \in SU(2)\}$, aufgespannt wird, die Dimension $2S+1 = 3$ hat, weswegen man von einem *Triplet* spricht. Da die Darstellung unitär und der Vektorraum der 2×2 -Matrizen insgesamt vierdimensional ist, ist der Raum mit $S = 1$ genau das orthogonale Komplement des vom *Singulett* aufgespannten eindimensionalen Raumes.

Fermionische Vertauschungsrelationen und das Pauliprinzip

Bisher haben wir die Elektronen mit $i = 1, \dots, N$ durchnummeriert. Da die Elektronen als solche aber nicht voneinander unterschieden werden können, muss der physikalische Zustand in gewisser Weise unabhängig von der Nummerierung sein. Genauer gesagt sollte es, zum Beispiel für zwei Elektronen, einen Zusammenhang zwischen den Zuständen $\Psi((x, s_1), (y, s_2))$ und $\Psi((y, s_2), (x, s_1))$ geben. Dieser muss dergestalt sein, dass die physikalische Interpretation durch $|\Psi|^2$ für beide Zustände gleich und damit unabhängig von der Nummerierung ist. Für Elektronen stellt sich die Relation

$$\Psi((x, s_1), (y, s_2)) = -\Psi((y, s_2), (x, s_1))$$

als die Richtige heraus. Man nennt sie die fermionische Vertauschungsrelation und Teilchen, deren gemeinsame Wellenfunktionen ihr genügen, *Fermionen*. Diese Relation entspricht dem Pauliprinzip, denn aus ihr folgt:

$$\Psi((x, s), (x, s)) = 0.$$

Zwei Fermionen mit gleicher Spinkonfiguration können sich also nicht am selben Ort aufhalten. In der oben eingeführten Matrix-Schreibweise bedeutet die Relation:

$$\Psi(x, y) = -\Psi(y, x)^T. \quad (23)$$

Daraus ist ersichtlich, dass sie im Wesentlichen auf zwei Arten erfüllt werden kann: Entweder ist Ψ eine antisymmetrische Matrix, deren Einträge sich bei Vertauschung von x und y nicht ändern, oder aber die Matrix ist symmetrisch und die Einträge wechseln ihr Vorzeichen. Insbesondere muss für eine Wellenfunktion mit Spin im Singulettzustand, also

$$\Psi(x, y) = \psi(x, y)i\sigma_2,$$

der Ortsanteil $\psi(x, y) = \psi(y, x)$ erfüllen.

29 Zusammenfassung. Physikalischer Definitionsbereich

Für zwei Elektronen ist H nur auf solchen Wellenfunktionen

$$\Psi : \mathbb{R}^6 \rightarrow \text{Mat}(2 \times 2, \mathbb{C})$$

definiert, die $\Psi(x, y) = -\Psi(y, x)^T$ erfüllen.

Für $N \geq 2$ ist der Definitionsbereich enthalten im N -fachen antisymmetrischen Tensorprodukt von $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$.

7.3 Die Hartree-Fock Näherung

Der Produktzustand $\Psi(x, y) = \psi(x)\varphi(y)^T$ aus $\psi(x)$ und $\varphi(y)$ erfüllt im Allgemeinen nicht die Vertauschungsrelation (23) und ist damit kein Element des physikalischen Definitionsbereichs. Wir können aber aus den Einteilchenfunktionen einen Zustand mit der richtigen Symmetrie konstruieren. Die sogenannte *Slaterdeterminante* ist definiert als:

$$\Psi_S(\psi, \varphi) := \frac{1}{\sqrt{2}} \det \begin{pmatrix} \psi(x, s_1) & \varphi(x, s_1) \\ \psi(y, s_2) & \varphi(y, s_2) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(x)\varphi(y)^T - \varphi(x)\psi(y)^T).$$

Sind ψ und φ normiert und orthogonal in $L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2)$, so ist auch $\|\Psi_S\| = 1$. Dies wird im Folgenden stets angenommen.

Wir berechnen nun die Energie eines solchen Zustandes

$$E(\Psi_S) = \langle \Psi_S, H\Psi_S \rangle = \int_{\mathbb{R}^6} \text{tr}(\Psi_S^*(x, y)H\Psi_S(x, y)) \, dx dy.$$

Da für den wechselwirkungsfreien Teil von $H = H_1(x) + H_2(y) + 1/|x - y|$

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^6} \text{tr}(\bar{\psi}(y)\bar{\varphi}(x)^T(H_1 + H_2)\psi(x)\varphi(y)^T) \, dx dy \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \underbrace{\int_{\mathbb{R}^3} \langle \psi(y), \varphi(y) \rangle dy}_{=0} \langle \varphi(x), H_1\psi(x) \rangle dx + \int_{\mathbb{R}^3} \underbrace{\int_{\mathbb{R}^3} \langle \varphi(x), \psi(x) \rangle dx}_{=0} \langle \psi(y), H_2\varphi(y) \rangle dy = 0 \end{aligned}$$

wegen der Orthogonalität von φ und ψ gilt, ist

$$E(\Psi_S) = \langle \psi, H_1\psi \rangle + \langle \varphi, H_1\varphi \rangle + \int_{\mathbb{R}^6} \text{tr} \left(\Psi_S^*(x, y) \frac{1}{|x - y|} \Psi_S(x, y) \right) \, dx dy.$$

Da das Potential skalar ist, erhalten wir für den Wechselwirkungsterm WW

$$\begin{aligned} WW &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^6} \frac{1}{|x-y|} \left(|\psi(x)|^2 |\varphi(y)|^2 + |\varphi(x)|^2 |\psi(y)|^2 \right. \\ &\quad \left. - \langle \varphi(y), \psi(y) \rangle \langle \psi(x), \varphi(x) \rangle - \langle \varphi(x), \psi(x) \rangle \langle \psi(y), \varphi(y) \rangle \right) dx dy \\ &= \int_{\mathbb{R}^6} \frac{1}{|x-y|} \left(|\varphi(y)|^2 |\psi(x)|^2 - \langle \varphi(x), \psi(x) \rangle \langle \psi(y), \varphi(y) \rangle \right) dx dy. \end{aligned}$$

Der erste der beiden Terme lässt sich als potentielle Energie des ersten Elektrons im *mittleren Feld* des zweiten (oder umgekehrt) schreiben

$$\int_{\mathbb{R}^3} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\varphi(y)|^2}{|x-y|} dy \right) |\psi(x)|^2 dx.$$

Er ist immer positiv und eine direkte Konsequenz der abstoßenden Elektron-Elektron Wechselwirkung. Der zweite Term

$$- \int_{\mathbb{R}^6} \frac{1}{|x-y|} \langle \varphi(x), \psi(x) \rangle \langle \psi(y), \varphi(y) \rangle dx dy$$

wird *Austauschterm* genannt und hat im Allgemeinen kein festes Vorzeichen. Die Skalarprodukte unter dem Integral zeigen, dass er explizit von der relativen Konfiguration der Spins abhängt.

Wir sehen, dass, obwohl der Operator H nicht von der Spinkonfiguration der einzelnen Elektronen abzuhängen scheint, die Energie dies sehr wohl tut. Das liegt an der besonderen Wahl des Definitionsbereichs. Da der Austauschterm negativ sein kann, können wir vermuten, dass Konfigurationen mit „parallelen“ Spins, also z.B. Triplettzustände, geringere Energie haben.

Was die Transformationseigenschaften unter Spinrotationen angeht, haben wir eine ähnliche Situation wie für die verschiedenen Darstellungen Γ_i der räumlichen Rotationen: Die Energie einer Slaterdeterminante ist nicht invariant unter der Ersetzung von ψ durch $A\psi$ mit $A \in SU(2)$, aber unter der Ersetzung von $(\psi, \varphi) \mapsto (A\psi, A\varphi)$, also $\Psi_S \mapsto A\Psi_S A^T$. So wie die Eigenwerte $\lambda(\lambda+1)$ von Λ^2 sind also auch die Eigenwerte $S(S+1)$ von Σ^2 unter der Zeitentwicklung erhalten.

Unter allen Funktionen im Definitionsbereich von H sind die Slaterdeterminanten besonders einfach. Die Hartree-Fock-Methode zur näherungsweise Bestimmung der Grundzustandsenergie E_0 besteht nun darin,

$$E_{\text{HF}} := \inf \{ \langle \Psi_S, H\Psi_S \rangle \mid \|\Psi_S\| = 1, \Psi_S \text{ ist eine Slaterdeterminante} \}$$

zu berechnen. Es ist klar, dass $E_{\text{HF}} \geq E_0$, da über weniger Funktionen minimiert wird.

Diese Methode kann zumindest für nicht zu großes N mit Hilfe numerischer Berechnungen angewandt werden. Sie nutzt allerdings die Symmetrien des Problems nicht aus und ist daher aufwendig und gibt wenig Information über die Struktur des Grundzustandes.

7.4 Das Orbitalmodell

Die Symmetrie des Problems unter den Rotationen aller Teilchenkoordinaten und Spinrotationen für alle Teilchen bringt (wie beim Wassertstoffproblem) die Möglichkeit, sich auf feste Eigenräume von Λ^2 und Σ^2 einzuschränken. Diese können unabhängig voneinander gewählt werden, da beide Operatoren kommutieren.

Die allgemeine Lösung von $\Lambda^2\Psi = \lambda(\lambda + 1)\Psi$ ist aber für sich genommen schon schwierig, weswegen man wieder den Weg über Slaterdeterminanten von Einteilchenfunktionen wählt. Dabei werden immer Eigenfunktionen der Einteilchenoperatoren L_i^2 und mit getrenntem Spin- und Ortsanteil verwendet. Diese Bedingung entspricht keiner Symmetrie des Problems, ist also auch nicht unter der Zeitentwicklung erhalten. Sie dient ausschließlich der einfacheren Bestimmung möglicher Energieniveaus.

Wie bei der Diskussion von Spinsingulett und -triplett gesehen, können sich zwei Funktionen mit Spin $s = 1/2$ (also $\sigma^2\psi = s(s + 1)\psi = 3/4\psi$) zu einem Paar mit $S = 0$ oder $S = 1$ kombinieren. Zur Berücksichtigung des Ortsanteils und der Vertauschungsrelation soll eine Funktion mit $S = 0$ als Linearkombination von Slaterdeterminanten geschrieben werden. Eine Möglichkeit ist durch

$$\Psi_S \left(\left(\begin{array}{c} \psi \\ 0 \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} 0 \\ \varphi \end{array} \right) \right) + \Psi_S \left(\left(\begin{array}{c} \varphi \\ 0 \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} 0 \\ \psi \end{array} \right) \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(x)\varphi(y) + \varphi(x)\psi(y)) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

gegeben. Diese Kombination von Slaterdeterminanten ist ein Spinsingulett, hat also $S = 0$ (22), während jede für sich genommen kein Eigenzustand von Σ^2 ist. Wählt man nun zum Beispiel ψ und φ rotationssymmetrisch (entspricht $l = 0$), so hat dieser Zustand auch $\lambda = 0$. Allgemein gibt es für Drehimpulse l_1, l_2 von ψ und φ Linearkombinationen mit Gesamtdrehimpuls

$$|l_1 - l_2| \leq \lambda \leq l_1 + l_2. \quad (24)$$

Energiebestimmung für Elektronenkonfigurationen

Üblicherweise gibt man für Atome eine Elektronenkonfiguration an. Das entspricht zunächst einer Angabe der Werte von l für die Einteilchenwellenfunktionen. Statt l wird allerdings das sogenannte *Orbital* angegeben, dabei entsprechen s -Orbitale $l = 0$, p -Orbitale $l = 1$ und so weiter für d, f, g . Die Nummerierung der Orbitale mit demselben l wie zum Beispiel $1s, 2s, 3s, \dots$ entspricht Anregungszuständen des Radialteils der Wellenfunktionen. Die Konfiguration $1s^2$ mit 2 Elektronen im Zustand „ $1s$ “ bedeutet also, dass der Zustand aufgebaut wird aus zwei Wellenfunktionen mit $l = 0$ und dem gleichen Radialanteil, also mit gleichem Ortsanteil. Dieser ist also zwangsläufig symmetrisch und um die Vertauschungsrelation zu erfüllen muss der Spinanteil antisymmetrisch, also der Singulettzustand sein. Eine dieser Konfiguration entsprechende Wellenfunktion ist dann gegeben durch

$$\Psi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi(|x|)\psi(|y|) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Angabe dieser Konfiguration reduziert also die Freiheitsgrade von Ψ auf eine Funktion $\psi : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{C}$. Die Energie der Konfiguration ist nun das Minimum von $\langle \Psi, H\Psi \rangle$ unter allen

Ψ dieser Form, wird also durch Anwendung der Hartree-Fock-Methode nur auf den Radialteil der Wellenfunktion gewonnen.

Für die Konfiguration $1s^1 2s^1$ sind zwei radiale Funktionen, die orthogonal zu einander sein müssen, zu bestimmen. In dieser Konfiguration sind sowohl $S = 1$ als auch $S = 0$ möglich. Der Austauschterm der Energie lässt vermuten, dass Zustände mit $S = 1$ niedrigere Energie haben als solche mit $S = 0$.

30 Zusammenfassung. Energien im Orbitalmodell

Die Bestimmung von Energieniveaus erfolgt nach folgendem Schema

- (1) Wahl von Z und N , es kann zum Beispiel $N < Z$ gewählt werden um Energieniveaus in Ionen und daraus Differenzen zu den Niveaus im neutralen Atom zu bestimmen.
- (2) Wahl einer Konfiguration für die N Elektronen. Dies legt die Werte von l und Orthogonalitätsrelationen für die Einteilchenzustände fest.
- (3) Bestimmung aller möglichen Werte von (λ, S) , die mit Hilfe von Linearkombinationen von Slaterdeterminanten von solchen Einteilchenzuständen erzeugt werden können.
- (4) Wahl von einem möglichen Paar (λ, S) .
- (5) Bestimmung des Energieminimums bei fester Konfiguration und festen (λ, S) mit der Hartree-Fock-Methode.

Wir diskutieren dieses Schema und danach gewonnene Ergebnisse anhand der Beispiele Helium und Kohlenstoff. Die Zahlenwerte stammen aus verschiedenen Veröffentlichungen, die unter [9] zusammengefasst sind. Die Hamiltonoperatoren, die zu diesen Zahlen führen, beinhalten zusätzliche Terme für Effekte wie Spin-Bahn Kopplung und relativistische Korrekturen, das qualitative Verhalten kann aber ohne diese diskutiert werden.

Die Einheit der Energie ist durch $E_0(\text{Wasserstoff}) = -1$ festgelegt.

Helium

Wir haben $N = 2$, $Z = 2$.

- $1s^2$: Wie bereits diskutiert ist nur $\lambda = 0$, $S = 0$ möglich. Die berechnete Energie ist

$$E(1s^2) = -5,81.$$

- $1s2s$: Wir haben für nur $\lambda = 0$ mit $S = 1$ sowie $S = 0$ zur Auswahl. Die berechneten Energien sind:

$$E(1s2s, S = 1) = -4,35,$$

$$E(1s2s, S = 0) = -4,29.$$

- $1s2p$: Da eine der Einteilchenfunktionen vollständig Rotationssymmetrisch ($l = 0$) ist und die andere $l = 1$ hat, kommt für das Produkt nach Formel (24) nur $\lambda = 1$ in Frage. Dies kann in diesem Fall leicht durch Berechnung von Λ^2 gesehen werden. Da die Einteilchenfunktionen orthogonal sind, ist wie im vorherigen Fall sowohl $S = 1$ als auch $S = 0$ möglich. Die Energien sind:

$$\begin{aligned} E(1s2p, S = 1) &= -4,27, \\ E(1s2p, S = 0) &= -4,25. \end{aligned}$$

Wie erwartet sind die Zustände mit höherem Spin, also symmetrisch ausgerichteten Spins, energetisch etwas günstiger. Zudem sehen wir, dass $E(1s2p) > E(1s2s)$, wohingegen bei Wasserstoff noch $E(2s) = E(2p)$ galt.

Kohlenstoff

Es ist $N = Z = 6$. Den Orbitalen $1s$ und $2s$ können jeweils höchstens zwei Elektronen zugeordnet werden. Denn die Spins von drei Teilchen können nicht alle orthogonal zueinander sein und die Einteilchenfunktionen, aus denen die Slaterdeterminanten gebildet werden, müssen orthogonal sein.

- $1s^2 2s^2 2p^2$: Die Paare von Elektronen in $1s$, $2s$ müssen im Singulettzustand des Spins sein, deswegen ist die Wirkung der Symmetriegruppe auf diese Teile trivial (sie sind invariant sowohl unter räumlichen als auch Spinrotationen) und für die Werte von (λ, S) sind nur die beiden p -Wellenfunktionen relevant. Wir müssen also die Frage klären, welches Transformationsverhalten unter Rotationen Produkte von Kugelflächenfunktionen mit $l = 1$ zeigen können. Grundsätzlich wissen wir ((24)), dass für λ alle ganzen Zahlen von null bis zwei möglich sind. Es ist aber wichtig zu wissen, welche Symmetrie bezüglich Vertauschung von x und y den Werten von λ entspricht, da daraus resultierend nicht alle Paare (λ, S) möglich sind.

Eine Basis für den dreidimensionalen Raum dieser Funktionen ist durch die reellen Funktionen

$$p_1(x) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{\langle e_1, x \rangle}{|x|}, \quad p_2(x) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{\langle e_2, x \rangle}{|x|}, \quad p_3(x) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{\langle e_3, x \rangle}{|x|}$$

gegeben. Wegen

$$\Gamma(R)p_i(x) = p_i(R^{-1}x) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{\langle Re_i, x \rangle}{|x|}$$

transformiert sich diese Basis genau wie die Basis des euklidischen Raumes. Wir können eine Linearkombination $\sum v_i p_i(x)$ also genau wie den Vektor $v = \sum v_i e_i \in \mathbb{R}^3$ mit der üblichen Wirkung der Drehgruppe behandeln. Wir haben folgende Möglichkeiten für Produkte von Linearkombinationen von $p_i(x)$, $p_i(y)$ und Transformationsverhalten unter Γ_g :

Das Skalarprodukt

$$\langle v, w \rangle = \langle Rv, Rw \rangle$$

ist invariant unter Γ_g , hat also $\lambda = 0$. Die entsprechende Kombination von Kugelflächenfunktionen lautet $p_1(x)p_1(y) + p_2(x)p_2(y) + p_3(x)p_3(y)$ und ist symmetrisch.

Das Kreuzprodukt

$$v \times w \quad \text{mit} \quad (Rv) \times (Rw) = R(v \times w)$$

transformiert sich wie ein Vektor, $\lambda = 1$, und ist antisymmetrisch. Eine Basis des entsprechenden Raumes ist gegeben durch $p_i(x)p_j(y) - p_j(x)p_i(y)$ mit $i \neq j$.

Diese beiden Räume zusammen sind vierdimensional, der Gesamttraum hat Dimension 9 (man denke an 3×3 Matrizen). Damit verbleiben also fünf Dimensionen. Insgesamt ist der Raum der antisymmetrischen Kombinationen dreidimensional (bei einer Matrix kann man nur die Einträge über der Diagonalen frei wählen), die Verbleibenden müssen also symmetrisch sein. Da auch $\lambda = 2$ vorkommen muss und der entsprechende Raum der Darstellung Dimension fünf hat, sind damit alle wichtigen Eigenschaften bestimmt. Damit der Zustand insgesamt antisymmetrisch ist, sind nur solche Paare (λ, S) möglich, bei denen symmetrische Kombinationen im Raumanteil auf antisymmetrische im Spinanteil treffen und umgekehrt. Diese sind $(0, 0)$, $(1, 1)$, $(2, 0)$. Die zugehörigen Energien sind:

$$\begin{aligned} E(2s^2 2p^2, \lambda = 1, S = 1) &= -38,62, \\ E(2s^2 2p^2, \lambda = 2, S = 0) &= -38,53, \\ E(2s^2 2p^2, \lambda = 0, S = 0) &= -38,42. \end{aligned}$$

- $1s^2 2s 2p^3$: Die Bestimmung aller möglichen Werte (λ, S) ist in diesem Fall relativ aufwendig da vier Elektronen ($2s 2p^3$) berücksichtigt werden müssen. Die Energien der günstigsten Wahlen sind

$$\begin{aligned} E(2s 2p^3, \lambda = 0, S = 2) &= -38,32, \\ E(2s 2p^3, \lambda = 2, S = 1) &= -38,04. \end{aligned}$$

- $1s^2 2s^2 2p 3s$: Wie bei der Heliumkonfiguration $1s 2p$ sind alle Möglichkeiten durch $(\lambda, S) = (1, 1), (1, 0)$ gegeben.

$$\begin{aligned} E(2s^2 2p 3s, \lambda = 1, S = 1) &= -38,07 \\ E(2s^2 2p 3s, \lambda = 1, S = 0) &= -38,05. \end{aligned}$$

An diesen Werten kann die Wichtigkeit der Werte von λ und S erkannt werden, verschiedene Werte führen zu Energieunterschieden, die größer sein können als die zwischen verschiedenen Konfigurationen. Bei der Angabe von Konfigurationen im Periodensystem der Elemente werden diese Werte jedoch nie erwähnt. Der Grund hierfür sind die „Hundschen Regeln“, die angeben welcher Gesamtdrehimpuls bzw. Gesamtspin bei einer festen Konfiguration optimal sein sollte. Bei der Angabe einer Konfiguration ist also oft implizit auch das Paar (λ, S) gemeint, das von den Hundschen Regeln bestimmt wird.

8 Die Gruppen $SO(3)$, $SU(2)$ und ihre Darstellungen (Autor: Jonas Lampart)

Hier soll die allgemeine Klassifikation der unitären Darstellungen von $SO(3)$ und $SU(2)$ vorgestellt werden. Da jede Darstellung dieser Gruppen unitär bezüglich eines geeignet gewählten Skalarproduktes ist, beinhaltet dies sogar die Klassifikation aller Darstellungen.

Die Konzepte können in diesem Rahmen leider nicht genügend motiviert und erklärt werden. Für eine Einführung in die Darstellungstheorie für Physiker sei daher auf [8] verwiesen.

31 Definition. Eine unitäre Darstellung einer Liegruppe auf einem Hilbertraum V (V darf unendliche Dimension haben) ist eine stetige Abbildung

$$\Gamma : G \rightarrow \mathcal{U}(V)$$

in unitären Abbildungen auf V , die $\Gamma(gh) = \Gamma(g)\Gamma(h)$ erfüllt.

Ein Untervektorraum $W \subset V$ heißt invariant unter Γ , falls $\Gamma(g)w \in W$ für jedes $w \in W$ und $g \in G$. Für einen solchen Untervektorraum ist dann $\Gamma_W(g) = \Gamma(g)P_W$ eine unitäre Darstellung von G auf W wenn P_W die orthogonale Projektion auf W ist.

Eine Darstellung auf V heißt irreduzibel, falls für jeden invarianten Unterraum $W = V$ oder $W = \{0\}$ gilt. Das bedeutet, dass sie keine echten Unterdarstellungen hat. Zwei Darstellungen Γ und Γ' heißen (unitär) äquivalent, wenn es eine unitäre Abbildung U gibt mit $\Gamma = U^{-1}\Gamma'U$. Bis auf solche Äquivalenz kann man irreduzible Darstellungen von $SO(3)$ vollständig beschreiben.

Darstellungen von $SO(3)$

32 Satz. Irreduzible Darstellungen von $SO(3)$

- (1) Zu jedem $l \in \mathbb{N}_0$ gibt es einen Vektorraum V_l der Dimension $2l + 1$ und eine irreduzible Darstellung Γ^l von $SO(3)$ auf V_l .
- (2) Ist Γ eine irreduzible Darstellung, dann ist V von endlicher ungerader Dimension und es gibt eine unitäre Abbildung $U : V \rightarrow V_l$ mit $\Gamma(R) = U^{-1}\Gamma^l(R)U$.

33 Bemerkung. Der Vektorraum V_l und die Darstellung Γ^l können explizit angegeben werden. Man kann zum Beispiel als V_l den Raum der total symmetrischen Tensoren der Stufe l über \mathbb{C}^3 nehmen, deren Spur (über jedes Paar von Faktoren) null ergibt. Auf \mathbb{C}^3 wirkt $SO(3)$ durch die üblichen 3×3 -Matrizen, die Wirkung auf V_l ist die durch die Wirkung auf die einzelnen Faktoren definierte.

34 Beispiel. Für $l = 2$ ist

$$V_l \cong \left\{ \left(\begin{array}{ccc} a & d & e \\ d & b & f \\ e & f & c \end{array} \right) \mid a, b, \dots, f \in \mathbb{C}; a + b + c = 0 \right\}.$$

Darauf wirkt $SO(3)$ durch Konjugation $\Gamma^l(R)A = RAR^{-1}$.

Für eine Drehung $R(\alpha, n)$ um die Achse n ist der Erzeuger in der Darstellung Γ gegeben durch

$$L_n := -i \frac{d}{d\alpha} \Big|_{\alpha=0} \Gamma(R(\alpha, n)).$$

Dieser erfüllt

$$e^{-i\alpha L_n} = \Gamma(R(\alpha, n)).$$

Zusätzlich führt man noch

$$L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$$

ein.

Mit Hilfe dieser Operatoren kann man leicht nachrechnen, dass die Dimension einer endlich dimensionalen, irreduziblen Darstellung ungerade sein muss. Diese Rechnung ist zum Beispiel in [1] im Kapitel über Drehimpuls ausgeführt.

Außerdem charakterisiert L^2 die irreduziblen Darstellungen eindeutig, was für Rechnungen sehr nützlich ist.

35 Proposition. Sei Γ eine irreduzible Darstellung von $SO(3)$ auf V . Γ ist genau dann äquivalent zu Γ^l , wenn

$$L^2 = l(l+1)E.$$

Hat man nun eine beliebige Darstellung auf V , so ist diese entweder irreduzibel oder man kann sie in mehrere Darstellungen auf invarianten Unterräumen zerlegen, also $V = V_1 \oplus V_2$. Das kann man so lange tun bis die Darstellungen alle irreduzibel sind. Jede Darstellung ist also eine direkte Summe von irreduziblen Darstellungen. Die irreduzible Darstellung Γ^l operiert genau auf dem Eigenraum von L^2 zum Eigenwert $l(l+1)$.

Projektive Darstellungen und $SU(2)$

Betrachtet man Darstellungen von $SO(3)$ unter Vernachlässigung von globalen Phasen, so sind dies genau Darstellungen von $SU(2)$. Diese können genau wie die Darstellungen von $SO(3)$ untersucht werden. Der einzige Unterschied ist, dass nun auch halbzahlige l vorkommen. Eine übliche Konvention ist dann, S statt l und Σ^2 statt L^2 zu schreiben.

36 Satz. Irreduzible Darstellungen von $SU(2)$

- (1) Für jedes S mit $2S \in \mathbb{N}_0$ gibt es einen Vektorraum V_S der Dimension $2S+1$ und eine irreduzible Darstellung Γ_S auf V_S .
- (2) Ist Γ eine irreduzible Darstellung von $SU(2)$ auf V , dann hat V endliche Dimension. Γ ist genau dann äquivalent zu Γ_S , wenn $\Sigma^2 = S(S+1)E$.

Die Darstellungen mit $S \in \mathbb{N}$ erfüllen $\Gamma(A) = \Gamma(-A)$ und sind genau die Darstellungen von $SO(3)$ mit $l = S$.

9 Lösungsvorschläge zu einigen Übungsaufgaben

Aufgabe 1: Sei $Z(t) = (Q(t), P(t))$ Lösung der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{Q} = \frac{\partial H}{\partial p}(Q, P), \quad \dot{P} = -\frac{\partial H}{\partial q}(Q, P),$$

dann gilt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}H(Z(t)) &= \frac{\partial H}{\partial q}(Q, P) \cdot \dot{Q} + \frac{\partial H}{\partial p}(Q, P) \cdot \dot{P} \\ &= \frac{\partial H}{\partial q}(Q, P) \cdot \frac{\partial H}{\partial p}(Q, P) - \frac{\partial H}{\partial p}(Q, P) \cdot \frac{\partial H}{\partial q}(Q, P) = 0, \end{aligned}$$

also Energieerhaltung. Die Translationsinvarianz impliziert

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial}{\partial a}H(q, p) = \frac{\partial}{\partial a}H(q_1 + a, q_2 + a, \dots, q_N + a, p) \\ &= \sum_{j=1}^N \frac{\partial H}{\partial q_j}(q_1 + a, q_2 + a, \dots, q_N + a, p) = \sum_{j=1}^N \frac{\partial H}{\partial q_j}(q, p) \end{aligned}$$

für alle $(q, p) \in \mathbb{R}^{6N}$ und damit die Gesamtimpulserhaltung,

$$\frac{d}{dt}\Pi(Z(t)) = \sum_{j=1}^N \dot{P}_j(Z(t)) = \sum_{j=1}^N \frac{\partial H}{\partial q_j}(Z(t)) = 0.$$

Die Energieerhaltung folgt also aus der Zeitunabhängigkeit der Hamiltonfunktion, d.h. der Invarianz unter Translationen in der Zeit, und die Gesamtimpulserhaltung aus der Invarianz unter Translationen im Ort. In beiden Fällen geht aber auch die spezielle Form der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen ein.

Aufgabe 2: Sei $\psi(t, x)$ Lösung der Schrödingergleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = -\frac{1}{2} \Delta_x \psi(t, x) + V(x) \psi(t, x).$$

Man mache sich klar, dass dann wegen $V(x) \in \mathbb{R}$ die komplex konjugierte Wellenfunktion $\overline{\psi(t, x)}$ die Gleichung

$$-i \frac{\partial}{\partial t} \overline{\psi(t, x)} = -\frac{1}{2} \Delta_x \overline{\psi(t, x)} + V(x) \overline{\psi(t, x)}$$

löst. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho^{\psi(t)}(x) &= \frac{\partial}{\partial t} \overline{\psi(t, x)} \psi(t, x) = \\ &= \left(-\frac{i}{2} \Delta_x \overline{\psi(t, x)} + iV(x) \overline{\psi(t, x)} \right) \psi(t, x) + \overline{\psi(t, x)} \left(\frac{i}{2} \Delta_x \psi(t, x) - iV(x) \psi(t, x) \right) \\ &= -\frac{1}{2i} \left(\overline{\psi(t, x)} \Delta_x \psi(t, x) + \left(\Delta_x \overline{\psi(t, x)} \right) \psi(t, x) \right) \\ &= -\frac{1}{2i} \nabla_x \cdot \left(\overline{\psi(t, x)} \nabla_x \psi(t, x) + \left(\nabla_x \overline{\psi(t, x)} \right) \psi(t, x) \right) = -\nabla_x \cdot j^{\psi(t)}(x). \end{aligned}$$

Aufgabe 3: Ableiten von (12) nach der Zeit ergibt

$$i \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{t^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i \frac{|x-y|^2}{2t}} \psi_0(y) \, dy \right) = \frac{1}{t^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} \left(-\frac{in}{2t} + \frac{|x-y|^2}{2t^2} \right) e^{i \frac{|x-y|^2}{2t}} \psi_0(y) \, dy$$

und mit $\nabla_x x = \sum_{j=1}^n \frac{\partial x_j}{\partial x_j} = n$ auch

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \Delta_x \left(\frac{1}{t^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{i \frac{|x-y|^2}{2t}} \psi_0(y) \, dy \right) &= -\frac{1}{2} \nabla_x \cdot \left(\frac{1}{t^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} i \frac{x-y}{t} e^{i \frac{|x-y|^2}{2t}} \psi_0(y) \, dy \right) \\ &= \frac{1}{t^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} \left(-\frac{in}{2t} + \frac{|x-y|^2}{2t^2} \right) e^{i \frac{|x-y|^2}{2t}} \psi_0(y) \, dy. \end{aligned}$$

Literatur

- [1] Franz Schwabl, *Quantenmechanik (QM I): Eine Einführung*, Springer-Lehrbuch, 6. Auflage, 2002.
- [2] Michael Reed and Barry Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics, Volume 1: Functional Analysis*, Academic Press, 2. Auflage, 1981.
- [3] Detlef Dürr und Stefan Teufel, *Bohmian Mechanics: The Physics and Mathematics of Quantum Theory*, Springer, 2009.
- [4] Detlef Dürr und Dustin Lazarovici, *Quantenphysik ohne Quantenphilosophie*, in Esfeld (Hg.) „Philosophie der Physik“, Berlin, Suhrkamp (2012).
- [5] Stefan Teufel und Roderich Tumulka, *A simple proof for global existence of Bohmian trajectories*, Commun. Math. Phys. 258 (2005), 349–365.
- [6] Detlef Dürr, Sheldon Goldstein und Nino Zanghi, *Quantum equilibrium and the origin of absolute uncertainty*, J. Statist. Phys. 67 (1992), 843–907.
- [7] Detlef Dürr, Sheldon Goldstein, Roderich Tumulka und Nino Zanghi, *John Bell and Bell's Theorem*, in Encyclopedia of Philosophy, D.M. Borchert (Hg.), 2005. (Preprint Version unter <http://www.mathematik.uni-muenchen.de/~bohmmech/rt/bbt.pdf>)
- [8] Wu-Ki Tung, *Group theory in physics*, World Scientific Publishing, 1985.
- [9] <http://nlte.nist.gov/MCHF/>