
Prinzipien der Quantentheorie

Hendrik van Hees¹
Justus-Liebig-Universität Gießen
Institut für Theoretische Physik
Heinrich-Buff-Ring 16
D-35392 Gießen
Germany

09. September 2008

¹e-mail: hendrik.vanhees@theo.physik.uni-giessen.de

Inhaltsverzeichnis

1	Klassische Mechanik	5
1.1	Überblick	5
1.2	Klassische Newtonsche Mechanik	6
1.3	Kanonische Transformationen	8
1.4	Infinitesimale kanonische Transformationen	9
1.5	Symmetrietransformationen	9
2	Grundlagen der Quantenmechanik	13
2.1	Quantisierung klassischer nichtrelativistischer Systeme	13
2.2	Realisierung der „Kinematik“	16
2.3	Realisierung als L_2	18
2.4	Unschärferelationen	22
2.5	Die Dynamik	27
2.5.1	Zeitentwicklung der Operatoren	27
2.5.2	Zeitentwicklung der Zustände	31
2.5.3	Die Schrödingergleichung	33
2.5.4	Vollständiger Satz kompatibler Operatoren	34
2.5.5	Das Ehrenfestsche Theorem	35
2.5.6	Bildtransformationen	36
2.5.7	Das Schrödingerbild	37
2.5.8	Das Heisenbergbild	38
2.5.9	Das Wechselwirkungsbild	38
3	Symmetrietransformationen	39
3.1	Das Wignersche Theorem	39
3.2	Lie-Gruppen und ihre Darstellungen	42
3.3	Das quantentheoretische Noethertheorem	49
3.4	Die Galileigruppe	49
3.5	Die Darstellungen der $SU(2)$	54

Inhaltsverzeichnis

4	Zentralkraftprobleme	57
4.1	Zurückführung auf ein Einteilchenproblem	57
4.2	Der Winkelanteil der Eigenfunktionen	61
4.3	Das Coulombproblem	62
4.4	Die Eigenfunktionen	63
A	Einige Spezielle Funktionen	65
A.1	Die Γ -Funktion	65
A.2	Die konfluenten hypergeometrischen Funktionen	73

Kapitel 1

Klassische Mechanik

1.1 Überblick

Die Quantentheorie hat sich aus der Notwendigkeit entwickelt, die physikalische Theorie den experimentellen Tatsachen bzgl. Systemen von atomarer Größenordnung anzupassen. Das wohl schlagkräftigste Argument für das Versagen der klassischen Physik ist die Stabilität der Materie. Seit dem berühmten Goldfolienversuch von Rutherford (1911) müssen wir nämlich annehmen, daß ein Atom aus einem positiv geladenen Kern und um diesen kreisende negativ geladene Elektronen besteht. Die Stabilität der Atome, die sich in der Stabilität der uns umgebenden Materie und der Konstanz ihrer physikalisch-chemischen Eigenschaften manifestiert, ist aber mit der klassischen Elektrodynamik, nach der beschleunigte Ladungen (z.B. die um den Kern kreisenden Elektronen) elektromagnetische Wellen abstrahlen und schließlich in den Kern stürzen müßten, unvereinbar.

Wir wollen uns hier nicht mit den Einzelheiten einer Herleitung der Quantenmechanik aus den experimentellen Tatsachen der Atomphysik aufhalten, sondern vielmehr einen Überblick über die mathematische Struktur der Quantenmechanik geben. Es ist nämlich keineswegs ein geradliniger Weg von den Experimenten zur Quantenmechanik. Im Gegenteil: Die Quantenmechanik erfordert eine mathematische Beschreibung, die durchaus weit weg von der Phänomenologie zu sein scheint. Dies ist ganz simpel dadurch zu erklären, daß unsere Sinnesorgane dafür ausgerichtet sind, unsere alltäglichen Bedürfnisse an Wahrnehmung zu befriedigen und nicht dazu, die dahinterliegende atomare Struktur der Materie aufzuklären. Wir beginnen also sogleich mit einem Überblick über die mathematische Struktur der Quantenmechanik.

Zunächst sei bemerkt, daß wir uns im folgenden auf die nichtrelativistische Quantenmechanik beschränken wollen. Weiter betonen wir, daß vor aller Quantenmechanik eine Theorie von Raum und Zeit postuliert werden muß, d.h. die Quantenmechanik setzt eine mathematische Beschreibung von Raum und Zeit voraus, die nicht durch sie selbst erklärt wird. Das spezielle Aussehen der Quantenmechanik ist jedoch eng mit der gewählten Raum-Zeit-Struktur verknüpft. Das zeigt sich darin, daß eine relativistische Quantentheorie andere wesentlich kompliziertere Eigenschaften besitzt.

Vergegenwärtigen wir uns also die Beschreibung der Raum-Zeit-Struktur innerhalb der Newtonschen Mechanik, die auch der nichtrelativistischen Quantenmechanik zugrundeliegt. Beginnend mit dem einfachsten Bestandteil erklären wir die Zeit als ein eindimensionales gerichtetes (orientiertes) reelles Kontinuum. Die Gerichtetheit bedeutet im Falle der Zeit eine Auszeichnung der

Kausalfolge, d.h. physikalische Größen zur Zeit t_0 hängen stets von dem physikalischen Geschehen zu Zeiten $t < t_0$ ab, sind aber gänzlich unabhängig vom Geschehen zu Zeiten $t > t_0$. Dieses Kausalprinzip ist das wesentliche mit der Zeit verknüpfte Axiom aller physikalischen Theorien. Aufgabe der Theorie ist die Vorhersage des physikalischen Verhaltens von Systemen zur Zeit t_0 , deren Geschichte bis zu diesem Zeitpunkt bekannt ist. Das Erstaunliche ist, daß es (z.B. in der Newtonschen Mechanik) genügt, das System zu einem einzigen Zeitpunkt (vor t_0) zu kennen und die physikalische Theorie aus dieser Kenntnis den weiteren Zeitablauf (wenigstens im Prinzip) zu berechnen gestattet.

1.2 Klassische Newtonsche Mechanik

Wir beginnen nun die ausführliche Begründung der nichtrelativistischen Quantenmechanik mit einer kurzen Erinnerung an die Newtonsche Mechanik in ihrer Formulierung in Form der Hamiltonschen kanonischen Mechanik für n Massepunkte.

Das Newtonsche Raum-Zeitkontinuum ist algebraisch und topologisch durch das direkte Produkt aus \mathbb{R} und einem affinen euklidisch metrisierten \mathbb{R}^3 gegeben. Die Symmetriegruppe dieser Raum-Zeit ist (mindestens) die eigentliche Galileigruppe, die ein semidirektes Produkt aus der Drehgruppe $SO(3)$, der raumzeitlichen Translationsgruppe sowie der speziellen Galileigruppe (Boosts) ist. Eine Gruppenoperation wird durch ihre Wirkung auf die Raum-Zeitvariablen definiert:

$$\vec{x}' = \hat{O}\vec{x} + \vec{v}t + \vec{a}; \quad t' = t + b. \quad (1.1)$$

Dabei ist $\vec{v}, \vec{a} \in \mathbb{R}^3$; $\hat{O} \in SO(3)$; $b \in \mathbb{R}$. Die Gruppenmultiplikation ergibt sich durch Hintereinanderausführung zweier solcher Galileitransformationen. Sie wird im folgenden nicht explizit benötigt, weshalb wir auf die Angabe der entsprechenden Gleichungen an dieser Stelle verzichten wollen.

Daß diese Transformationen eine Symmetriegruppe der Newtonschen Mechanik bilden, bedeutet, daß die Transformation aller Vektoren eines abgeschlossenen Systems und der Zeit gemäß (1.1) die Bewegungsgleichungen forminvariant läßt. Physikalisch bedeutet dies, daß zwei Beobachter, die beide dasselbe System von verschiedenen *Inertialsystemen* aus beschreiben, zu den gleichen Resultaten gelangen, nämlich zu den im folgenden beschriebenen Newtonschen Bewegungsgleichungen des abgeschlossenen Systems. Ein Inertialsystem wird dabei seinerseits durch dieses Bewegungsgesetz definiert.

Das Newtonsche Bewegungsgesetz für ein System von Massepunkten ist durch

$$m_j \frac{d^2 \vec{x}_j}{dt^2} = \sum_{i \neq j} \vec{F}_{ij} \quad (1.2)$$

gegeben, wobei $\vec{x}_j : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$ die Bahnkurve des j -ten Teilchens ($j = 1 \dots N$), parametrisiert durch die Zeit t , beschreibt. \vec{F}_{ij} ist die Wechselwirkungskraft, die vom i -ten auf das j -te Teilchen ausgeübt wird. Weiter nehmen wir an, daß diese Kräfte durch den Gradienten eines Potentials herleitbar sind. Die im Falle der Bewegung elektrischer Teilchen benötigte Erweiterung dieser Annahme werden wir an geeigneter Stelle besprechen¹. Das bedeutet:

$$\sum_{i \neq j} \vec{F}_{ij} = -\nabla_j V(\vec{x}_1; \dots; \vec{x}_N). \quad (1.3)$$

¹Allerdings werden wir dies in moderner Form durch ein *Eichprinzip* tun

Solche Systeme heißen konservativ. Ein konservatives System erlaubt nun die folgende Reformulierung durch ein Variationsprinzip.

Satz 1 (Das Hamiltonsche Prinzip). *Das Wirkungsfunktional ist*

$$S[x] = \int_{t_1}^{t_2} dt L \left[\vec{x}_j, \frac{d\vec{x}_j}{dt} \right]. \quad (1.4)$$

Die Lagrangefunktion ist dabei durch

$$L \left[\vec{x}_j, \frac{d\vec{x}_j}{dt} \right] = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{2} \left(\frac{d\vec{x}_j}{dt} \right)^2 - V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \quad (1.5)$$

definiert. Dann sind die \vec{x}_j genau dann Lösung der Newtonschen Bewegungsgleichungen (1.2), wenn sie die Stationaritätsbedingungen des Wirkungsfunktionalis

$$\forall j = 1 \dots N, k = 1 \dots 3 : \frac{\delta S}{\delta x_j^k} = 0 \quad (1.6)$$

erfüllen. Das Funktional S ist dabei auf der Menge aller C^2 -Kurven $\vec{x}_j : R \rightarrow \mathbb{R}^3$ mit fixierten Randwerten $\vec{x}_j(t_1), \vec{x}_j(t_2)$ definiert.

Zum Beweis muß man nur die Funktionalableitungen bilden. Es folgt sofort, daß die Stationaritätsbedingung äquivalent zu den Euler-Lagrangegleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial (d\vec{x}_j/dt)} - \frac{\partial L}{\partial \vec{x}_j} = 0 \quad (1.7)$$

ist. Setzt man hierin (1.5) ein, erhält man unter Berücksichtigung von (1.3) die Newtonschen Bewegungsgleichungen (1.2). q.e.d.

Durch eine Legendretransformation

$$H = \sum_{j=1}^N \frac{\partial L}{\partial (d\vec{x}_j/dt)} \frac{d\vec{x}_j}{dt} - L \quad (1.8)$$

erhält man die Hamiltonfunktion. Bildung des Differentialis derselben ergibt, daß diese nur von den zu den \vec{x}_j kanonisch konjugierten Impulsen

$$\vec{p}_j = \frac{\partial L}{\partial (d\vec{x}_j/dt)} \quad (1.9)$$

und den Koordinaten \vec{x}_j abhängt:

$$dH = \frac{d\vec{x}_j}{dt} d\vec{p}_j - \frac{\partial L}{\partial \vec{x}_j} d\vec{x}_j. \quad (1.10)$$

Aus dem Satz vom totalen Differential ergibt sich daraus:

$$\frac{\partial H}{\partial \vec{p}_j} = \frac{d\vec{x}_j}{dt}, \quad \frac{\partial H}{\partial \vec{x}_j} = - \frac{\partial L}{\partial \vec{x}_j}. \quad (1.11)$$

Damit sind die Lagrangegleichungen den Hamiltonschen kanonischen Gleichungen

$$\frac{d\vec{x}_j}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_j}; \quad \frac{d\vec{p}_j}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{x}_j} \quad (1.12)$$

und diese wegen Satz 1 den Newtonschen Bewegungsgleichungen (1.2) äquivalent. Die insbesondere im Hinblick auf die allgemeine Behandlung der Symmetrieprinzipien unter Verwendung der allgemeinen Theorie der Liegruppen wichtigste Darstellung der Mechanik ist das folgende erweiterte Hamiltonsche Prinzip:

Satz 2 (Erweitertes Hamiltonsches Prinzip). *Drückt man das Wirkungsfunktional vermöge*

$$S[\vec{x}_j, \vec{p}_j] = \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\sum_{j=1}^N \frac{d\vec{x}_j}{dt} \vec{p}_j - H \right] \quad (1.13)$$

als Funktional auf der Menge der C^2 -Phasenraumkurven (\vec{x}_j, \vec{p}_j) mit vorgegebenen Anfangs- und Endpunkten aus, so sind diese Phasenraumkurven genau dann Lösungen der Hamiltonschen Kanonischen Gleichungen (1.12), wenn sie stationärer Punkt des Wirkungsfunktional sind:

$$\frac{\delta S}{\delta \vec{x}^j} = \frac{\delta S}{\delta \vec{p}^j} = 0. \quad (1.14)$$

Der Beweis ergibt sich unmittelbar durch Berechnung der eben genannten Funktionalableitungen.

Wir bemerken noch, daß diese Betrachtungen auch für explizit zeitabhängige Lagrangefunktionen (bzw. Hamiltonfunktionen) gelten.

1.3 Kanonische Transformationen

Wir bezeichnen nun die Phasenraumkoordinaten der Kürze halber mit (x, p) . Wir wollen jetzt eine Koordinatentransformation zu neuen Koordinaten (x', p') durchführen, so daß die Variation der Wirkung invariant bleibt. Dies verlangt

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt [H' - H - p' \dot{x}' + p \dot{x}] = 0. \quad (1.15)$$

Da die Endpunkte der Phasenraumtrajektorie des Systems festliegen, bedeutet dies, daß der Integrand des unter der Variation stehenden Integrals ein totales Differential einer willkürlichen Phasenraumfunktion F ist:

$$(H' - H)dt - p'dx' + p dx = dF. \quad (1.16)$$

In dieser Schreibweise ist F als Funktion der Variablen x, x' und t aufzufassen. Es folgt aus dieser Gleichung weiter, daß die alten und die neuen kanonischen Variablen in der folgenden Weise aus F bestimmt werden können:

$$H' = H + \frac{\partial F}{\partial t}, \quad p' = -\frac{\partial F}{\partial x'}, \quad p = \frac{\partial F}{\partial x}. \quad (1.17)$$

Man nennt daher F die *Erzeugende der kanonischen Transformation*.

Durch Legendretransformation lassen sich Erzeugende in Abhängigkeit von beliebigen Paaren aus alten und neuen kanonischen Variablen bilden. Setzt man z.B. $F = -p'x' + G(x, p', t)$, so folgt unter Verwendung von (1.16):

$$H' = H + \frac{\partial G}{\partial t}, \quad p = \frac{\partial G}{\partial x}, \quad x' = \frac{\partial G}{\partial p'}, \quad (1.18)$$

mit $F = px - p'x' + G(p, p', t)$

$$H' = H + \frac{\partial G}{\partial t}, \quad x = -\frac{\partial G}{\partial p}, \quad x' = \frac{\partial G}{\partial p'} \quad (1.19)$$

und schließlich mit $F = px + G(x', p, t)$

$$H' = H + \frac{\partial G}{\partial t}, \quad x = -\frac{\partial G}{\partial p}, \quad p' = -\frac{\partial G}{\partial x'}. \quad (1.20)$$

(1.17-1.20) stellen das erzeugende Funktional in Abhängigkeit von allen möglichen Kombinationen jeweils einer neuen und einer alten kanonischen Variable dar. Weiter haben wir berücksichtigt, daß die Erzeugende explizit von der Zeit abhängen kann, wobei sich aber die Hamiltonfunktion nicht einfach als skalares Phasenraumfeld transformiert, sondern die Zeitableitung der Erzeugenden hinzuzufügen ist.

1.4 Infinitesimale kanonische Transformationen

Trivialerweise ist die identische Transformation, d.h. $x' = x$ und $p' = p$, eine kanonische Transformation. Eine mögliche Erzeugende dieser trivialen Transformation ist

$$G_{\text{Id}}(x, p') = xp'. \quad (1.21)$$

Wir betrachten jetzt "infinitesimale kanonische Transformationen", also solche, die sich von der identischen Transformation nur um einen kleinen Beitrag unterscheiden. $G_{\text{inf}} = G_{\text{Id}} + \delta G$. Dann können wir bei Vernachlässigung höherer Potenzen als der ersten der Änderungen $\delta x = x' - x$ und $\delta p = p' - p$ schreiben

$$\delta H = H' - H = \frac{\partial(\delta G)}{\partial t}, \quad \delta x = \frac{\partial \delta G}{\delta p}, \quad \delta p = -\frac{\partial(\delta G)}{\partial x}, \quad (1.22)$$

d.h. in dieser Näherung können wir δG als Funktion der alten Phasenraumvariablen (x, p) ansehen.

Es sei bemerkt, daß sich diese Betrachtungen mathematisch präzisieren lassen indem man die infinitesimale Transformation als Transformation im Tangentialbündel des Phasenraums auffaßt, doch soll uns dies hier nicht weiter beschäftigen.

1.5 Symmetrietransformationen

Wir bezeichnen eine kanonische Transformation als Symmetrietransformation, wenn die transformierte Hamiltonfunktion einfach durch die ursprüngliche Hamiltonfunktion gegeben ist: $H'(x', p', t) = H(x', p', t)$.

In der klassischen Mechanik sind nun vor allem solche Symmetrietransformationen von Interesse, die sich aus infinitesimalen Transformationen zusammensetzen lassen. Wir präzisieren diese Forderung, indem wir annehmen, daß diese Symmetrietransformationen eine Liegruppe bilden, d.h. eine topologische Gruppe, deren Topologie durch eine differenzierbare Mannigfaltigkeit gegeben ist. Die Symmetriebedingung lautet dann:

$$\frac{\partial H}{\partial x} \delta x + \frac{\partial H}{\partial p} \delta p - \frac{\partial(\delta G)}{\partial t} = 0. \quad (1.23)$$

Hierin (1.22) eingetragen ergibt die Forderung

$$\{\delta G, H\}_{\text{pb}} + \frac{\partial(\delta G)}{\partial t} = 0, \quad (1.24)$$

wobei die Poissonklammer zweier Phasenraumfunktionen durch

$$\{f, g\}_{\text{pb}} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial g}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial p} \quad (1.25)$$

definiert ist.

Setzt man hierin für (x, p) eine beliebige Lösung der Hamiltonschen kanonischen Gleichungen ein, also $(x(t), p(t))$, erkennt man, daß

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\}_{\text{pb}} + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (1.26)$$

ist. Ein Blick auf (1.24) lehrt:

Satz 3 (Noethertheorem:). *Ist δG die Erzeugende einer Symmetrietransformation, so ist δG eine Erhaltungsgröße.*

Jetzt spezialisieren wir diese Betrachtungen auf die Galileigruppe, die Symmetrietransformation der Newtonschen Mechanik ist. Wir werden sehen, daß diese Forderung geradezu als Definition dessen dienen kann, was wir als Newtonsche Mechanik bezeichnen.

Wir betrachten im folgenden ein System aus N Massepunkten. Wir parametrisieren den Konfigurationsraum mit \vec{x}_i , also den N kartesischen Orts-Vektoren. Die kanonischen Impulse sind dann die mechanischen Impulse.

Die Galileigruppe wird erzeugt durch die Translationen im Ortsraum, die Drehungen des Ortsraums, die Zeittranslationen und die Galileiboosts. Unter Galileiboost verstehen wir dabei den Wechsel von einem Inertialsystem zu einem anderen dazu gleichförmig geradlinig bewegten Koordinatensystem, das dann nach den Prinzipien der Newtonschen Mechanik wieder ein Inertialsystem ist. Alle diese Transformationen bilden Untergruppen der Galileigruppe, die insgesamt zehndimensional ist. Diese setzt sich als semidirektes Produkt aus den genannten Untergruppen zusammen. Wir verfolgen jetzt folgendes Ziel. Zum ersten wollen wir die allgemeinste Form der Hamiltonfunktion aufsuchen, die mit der Forderung nach Galileiinvarianz verträglich ist. Zum zweiten suchen wir die zur Galileigruppe gehörigen zehn Erhaltungsgrößen auf.

Wir beginnen mit den Translationen im Ortsraum, d.h. wir erteilen jedem der N Ortsvektoren dieselbe Verschiebung $\delta \vec{\alpha}$. Die Erzeugende dieser infinitesimalen Transformation ist offenbar durch

$$\delta G = \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \delta \vec{\alpha} \Rightarrow \delta \vec{x}_i = \delta \vec{\alpha}, \quad \delta \vec{p} = 0 \quad (1.27)$$

gegeben. Damit ist gleichzeitig das Transformationsverhalten der Impulse bestimmt. Die Symmetriebedingung (1.24) verlangt dann, daß

$$\{\delta G, H\}_{\text{pb}} = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^N \frac{\partial H}{\partial \vec{x}_i} \delta \vec{\alpha} = 0. \quad (1.28)$$

Da dies für alle $\delta \vec{\alpha} \in \mathbb{R}^3$ gelten soll, bedeutet dies, daß

$$\sum_{i=1}^N \frac{\partial H}{\partial \vec{x}_i} = 0 \quad (1.29)$$

sein muß. Aus dem gleichen Grunde finden wir nach dem Noethertheorem, daß die Komponenten des Gesamtimpulses

$$\vec{P} = \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \quad (1.30)$$

drei Erhaltungsgrößen sind.

Jetzt betrachten wir die Zeittranslationen, die definitionsgemäß durch

$$\delta \vec{x}_i = \frac{d\vec{x}_i}{dt} \delta t, \quad \delta \vec{p}_i = \frac{d\vec{p}_i}{dt} \delta t \quad (1.31)$$

gegeben ist. Unter Anwendung der Hamiltonschen kanonischen Gleichungen folgt, daß in diesem Fall

$$\delta G = H \delta t \quad (1.32)$$

ist. Dann verlangt die Bedingung (1.24), daß dies eine Symmetrietransformation sein soll, daß H nicht explizit zeitabhängig ist:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0. \quad (1.33)$$

Die dazugehörige Erhaltungsgröße ist die Hamiltonfunktion selbst.

Jetzt betrachten wir die Galileiboosts, die durch

$$\delta \vec{x}_i = t \delta \vec{v}, \quad \delta \vec{p}_i = m_i \delta \vec{v} \quad (1.34)$$

definiert sind. Dabei sind die m_i die Massen der Teilchen und $\delta \vec{v}$ ein beliebiger Vektor in \mathbb{R}^3 . Es folgt, daß

$$\delta G = \delta \vec{v} \left[\sum_{i=1}^N (\vec{p}_i t - m_i \vec{x}_i) \right] \quad (1.35)$$

die Erzeugende dieser Transformation ist. (1.24) verlangt dann, daß

$$\delta \vec{v} \sum_{i=1}^N \left(-m_i \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} + t \frac{\partial H}{\partial \vec{x}_i} + \vec{p}_i \right) = 0 \quad (1.36)$$

ist. Unter Beachtung von (1.29) und (1.30) und der Willkür von $\delta \vec{v}$, folgt als Bedingung, daß

$$\sum_{i=1}^N m_i \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} = \sum_{i=1}^N \vec{p}_i = \vec{P} \quad (1.37)$$

sein muß. Diese Bedingung läßt sich sukzessive hochintegrieren zu

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N), \quad (1.38)$$

wobei wir (1.33) berücksichtigt haben. Die Translationsinvarianz verlangt weiter, daß das Potential V eine beliebige Funktion der Differenzen der Ortskoordinaten sein muß. Die fundamentalen Wechselwirkungen wie z.B. die elektrostatische sind Zweiteilchenwechselwirkungen, die sich durch die folgende Summe darstellen lassen:

$$V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U(\vec{x}_i - \vec{x}_j). \quad (1.39)$$

Die aus der Galileiboostinvarianz folgenden Erhaltungsgrößen sind wegen der Willkür von $\delta\vec{v}$

$$\vec{X} = \frac{\sum_{i=1}^N m_i \vec{x}_i - \vec{P}t}{\sum_{i=1}^N m_i}. \quad (1.40)$$

Dies ist der Schwerpunktsatz, demzufolge das massengewichtete Mittel der Ortsvektoren sich mit der konstanten Geschwindigkeit $\vec{P}/\sum_{i=1}^N m_i$ bewegt.

Zum Schluß betrachten wir noch Drehungen. Diese wirken vermöge einer orthogonalen 3×3 -Matrix

$$\vec{x}'_i = O\vec{x}_i, \quad \vec{p}'_i = O\vec{p}_i \quad (1.41)$$

auf die Vektoren \vec{x}_i und \vec{p}_i . Damit H invariant unter Drehungen ist, muß U in (1.39) ein Skalarfeld sein. In infinitesimaler Form schreibt sich eine Drehung wie folgt:

$$\delta\vec{x}_i = \delta\vec{\omega} \times \vec{x}_i, \quad \delta\vec{p}_i = \delta\vec{\omega} \times \vec{p}_i. \quad (1.42)$$

Die dazugehörige Erzeugende ist

$$\delta G = \sum_{i=1}^N (\delta\vec{\omega} \times \vec{x}_i) \vec{p}_i = - \sum_{i=1}^N (\delta\vec{\omega} \times \vec{p}_i) \vec{x}_i = \delta\vec{\omega} \sum_{i=1}^N \vec{x}_i \times \vec{p}_i. \quad (1.43)$$

Da $\delta\vec{\omega}$ wieder beliebig in \mathbb{R}^3 ist, ist die dazugehörige Erhaltungsgröße der Gesamtdrehimpuls

$$\vec{J} = \sum_{i=1}^N \vec{x}_i \times \vec{p}_i. \quad (1.44)$$

Damit ist gezeigt, daß die Annahme der Galileiinvarianz die vollständige Rekonstruktion der Newtonschen Mechanik gestattet.

Kapitel 2

Grundlagen der Quantenmechanik

2.1 Quantisierung klassischer nichtrelativistischer Systeme

Im vorigen Kapitel haben wir gesehen, daß ein klassisches System durch einen Phasenraum und eine Hamiltonfunktion H , die die Dynamik des Systems, also die zeitliche Änderung der Koordinaten und Impulse, bestimmt, eindeutig festgelegt ist. Diese Dynamik erfährt durch die Formulierung mit Hilfe von Poissonklammern einen algebraischen Charakter.

Die Entwicklung der Quantenmechanik zu Beginn unseres Jahrhunderts hat gezeigt, daß die anschaulichen Vorstellungen, die der Newtonschen Mechanik zugrundeliegen, im Bereich der atomaren Systeme nicht gültig sind. Insbesondere ist die Beschreibung eines Massepunktes durch die Zuordnung eines Orts-Impuls-Vektors unzutreffend, also der Begriff der Bahnkurve der Beschreibung eines Systems atomarer Größenordnung nicht adäquat.

Das bedeutet aber nicht, und das ist die wesentliche Aussage der hier vertretenen Auffassung der Quantenmechanik, daß eine raum-zeitliche Beschreibung atomarer Vorgänge unmöglich sei. Vielmehr bedeutet gerade die Formulierung der Quantenmechanik eine solche raum-zeitliche Beschreibung, nur daß die Objekte, die der Beschreibung des Systems dienen, selbstadjungierte Operatoren eines Hilbertraums sind, wobei die (komplexen) Strahlen dieses Hilbertraums eine statistische Bedeutung haben. Wir wollen diese Formulierung der Quantenmechanik axiomatisch an die Spitze stellen.

Demnach wird ein quantenmechanisches System durch einen projektiven Hilbertraum (den Raum der Zustände des Systems) $[\mathcal{H}]$, eine Observablenalgebra und einen selbstadjungierten Operator \mathbf{H} , den Hamiltonoperator, definiert. Dies soll im folgenden ausformuliert werden.

Der Zustand des Systems ist eindeutig definiert durch einen (komplexen) Strahl $[[\psi]]$ eines Hilbertraums \mathcal{H} . Diese Strahlen bilden den zu \mathcal{H} gehörigen projektiven Raum $[\mathcal{H}]$. Sie sind die folgenden Teilmengen des Hilbertraums:

$$[[\psi]] = \{c|\psi\rangle \mid c \in \mathbb{C}^*\} \text{ mit } \mathbb{C}^* = \mathbb{C} \setminus \{0\}. \quad (2.1)$$

Wesentlich für die Quantentheorie ist weiter, daß die Funktion

$$W : [\mathcal{H}]^2 \rightarrow \mathbb{R} : W([[\psi]], [[\phi]]) = \begin{cases} 0 & \text{falls } |\psi\rangle = 0 \vee |\phi\rangle = 0 \\ \frac{|\langle \psi | \phi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle} & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.2)$$

auf dem Strahlraum $[\mathcal{H}]$ wohldefiniert ist, d.h. sie ist unabhängig von den in der Definition gewählten Repräsentanten seiner Argumente.

Wir zeigen, daß W tatsächlich wohldefiniert ist, d.h. daß W unabhängig von der Wahl der Repräsentanten der Strahlen ist. Zunächst ist klar, daß aufgrund der Definition (2.1) $|\psi\rangle \in [0]$ genau dann zutrifft, wenn $|\psi\rangle = 0$ ist. Falls hingegen $|\psi'\rangle \in [|\psi\rangle]$ und $|\phi'\rangle \in [|\phi\rangle]$, so existieren nach eben dieser Definition zwei von 0 verschiedene komplexe Zahlen c_1 und c_2 , so daß $|\psi'\rangle = c_1|\psi\rangle$ und $|\phi'\rangle = c_2|\phi\rangle$. Dies in (2.2) eingesetzt ergibt, daß W , wie behauptet, nicht von der Wahl der Strahlrepräsentanten abhängt.

Jetzt können wir die Postulate der Quantenmechanik formulieren:

- **Postulat 1:** Der Zustand eines abgeschlossenen quantenmechanischen Systems wird vollständig durch einen Strahl $[\psi] \in [\mathcal{H}]$ beschrieben. Diese Zustände lassen sich durch *Präparation* des Systems (zumindest prinzipiell) objektiv zuordnen.
- **Postulat 2 (Korrespondenzprinzip):** Jeder Observablen A (d.h. meßbaren Größe) eines abgeschlossenen quantenmechanischen Systems wird ein auf einem dichten Teilraum von \mathcal{H} definierter selbstadjungierter Operator \mathbf{A} zugeordnet. Insbesondere korrespondiert den Paaren zueinander kanonisch konjugierter kartesischer Phasenraumkoordinaten (x_i, p_i) ein Fundamentalsystem selbstadjungierter Operatoren, die die Heisenbergalgebra aufspannen:

$$\frac{1}{i} [\mathbf{x}_j, \mathbf{p}_k] = \delta_{jk}, \quad [\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k] = 0, \quad [\mathbf{p}_j, \mathbf{p}_k] = 0. \quad (2.3)$$

Die Klammer bedeutet den Kommutator zweier Operatoren:

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A}. \quad (2.4)$$

- **Postulat 3 (Bornsche Regel):**

Sei A eine Observable und \mathbf{A} der dazugehörige selbstadjungierte Operator. Weiter bezeichne $\{|n, r\rangle\}$ ein orthonormiertes verallgemeinertes Eigensystem von \mathbf{A}^1 zum Spektralwert a_n . Dabei können sowohl n als auch r diskrete und kontinuierliche Teile enthalten. Für festes n "numeriert" r ein beliebiges verallgemeinertes Orthonormalsystem durch, das $\text{Eig}(\mathbf{A}, a_n)$ aufspannt.

Wird nun an dem System die Observable A gemessen, so ist das Resultat der Messung stets ein (verallgemeinerter) Eigenwert des ihr zugeordneten selbstadjungierten Operators \mathbf{A} . Die Wahrscheinlichkeit bzw. Wahrscheinlichkeitsdichte, einen bestimmten Wert a_n im diskreten bzw. kontinuierlichen Teil des Spektrums von \mathbf{A} zu messen, ist

$$p(a_n) = \int dr S(n, r) \langle \psi | n, r \rangle \langle n, r | \psi \rangle, \quad (2.5)$$

wobei wir $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ vorausgesetzt haben.

Hierin bedeutet $S(n, r)$ die Spektraldistribution des Operators \mathbf{A} , die wir weiter unten noch genauer spezifizieren werden.

Wir bemerken weiter, daß die Wahrscheinlichkeit, überhaupt einen Spektralwert von \mathbf{A} zu messen, 1 sein muß, weil bei der Messung der Observablen A nach dem Postulat 3 stets ein Wert aus dem Spektrum des dazugehörigen Operators resultieren muß. Für jeden normierten Zustandsket $|\psi\rangle$ muß also

$$\int dndr S(n, r) \langle \psi | n, r \rangle \langle n, r | \psi \rangle = 1 \quad (2.6)$$

¹Dies wird weiter unten noch näher ausgeführt

gelten. Das bedeutet die *Vollständigkeit* des verallgemeinerten orthonormierten Eigensystems:

$$\int dndr S(n, r) |n, r\rangle \langle n, r| = \mathbf{1}. \quad (2.7)$$

- **Postulat 4:** Die Dynamik des quantenmechanischen Systems wird durch den selbstadjungierten Hamiltonoperator \mathbf{H} , der eine Funktion der kanonisch konjugierten Fundamentaloperatoren ist, bestimmt. Ist ein Operator \mathbf{A} eine Funktion der Fundamentaloperatoren und der Zeit, der der Observablen A zugeordnet ist, so ist

$$\dot{\mathbf{A}} = \frac{1}{i} [\mathbf{A}, \mathbf{H}] + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (2.8)$$

der Operator, der der Zeitableitung der Observablen, also dA/dt , zugeordnet ist. Dabei bezeichnet der Ring über dem Operator i.a. nicht die totale Ableitung nach der Zeit. Wir werden weiter unten sehen, daß die Verteilung der Zeitabhängigkeit auf Operatoren und Zustände weitgehend willkürlich ist.

Wir bemerken noch, daß wir hier ein Einheitensystem verwenden, das der Quantenmechanik angepaßt ist. Die Wirkung wird in Einheiten der durch 2π dividierten Planckschen Konstanten \hbar gemessen. Entsprechend besitzen zueinander konjugierte Variablen zueinander reziproke Dimensionen.

Wie bereits oben betont, folge ich der Interpretation der Quantenmechanik, daß dieses Axiomensystem die vollständigste mögliche Erkenntnis über die Physik eines Quantensystems wiedergibt, die sog. *Minimale Statistische Interpretation*. Wir werden in einem späteren Kapitel, wenn wir den formalen Apparat der Quantentheorie vollständig ausgearbeitet haben, auf solche Interpretationsprobleme noch zurückkommen, insbesondere auf die Frage, in welchem Sinne und unter welchen Umständen die klassische Theorie sich als Näherung der Quantentheorie.

Ferner sei schon hier erwähnt, daß analog zur klassischen statistischen Mechanik auch die Quantenstatistik entwickelt wurde, die wir jedoch in einem späteren Kapitel genauer beschreiben werden und die stets angewandt wird, wenn der Systemzustand nicht genau bekannt ist. Die durch die oben angegebenen Postulate definierten Wahrscheinlichkeitsaussagen in der Quantenmechanik sind allerdings von grundlegend anderer Art als die der klassischen Statistik. Während nämlich über die quantentheoretischen Wahrscheinlichkeitsaussagen hinaus prinzipiell keine Aussagen über ein Quantensystem möglich sind, die Festlegung des Quantensystems durch einen Zustand also die weitestgehende überhaupt ist, ist ein klassisches System stets durch die exakte Angabe des Anfangszustandes in seinem Phasenraum vollständig determiniert; wir benötigen also im klassischen Fall dann keinerlei Wahrscheinlichkeitsaussagen um das Verhalten des Systems zu beschreiben. Das Resultat einer jeden Messung an diesem System ist dann zu jeder Zeit vollständig determiniert.

In der Quantenmechanik ändert sich dies nun grundlegend. Gemäß Postulat 3 ist nämlich klar, daß Meßergebnisse auch nach der Präparation des Systems in einem wohldefinierten Zustand $|\psi\rangle$ (auch als vollständige Präparation des Systems bezeichnet) nur dann durch eben diesen Systemzustand determiniert sind, wenn eine Observable gemessen wird, für die $|\psi\rangle$ ein Eigenzustand des ihr zugeordneten selbstadjungierten Operators ist. Die Quantentheorie gibt also die deterministische Beschreibungsweise des Naturgeschehens durch die klassische Physik auf.

2.2 Realisierung der „Kinematik“

Im folgenden haben wir zu zeigen, daß die Postulate in sich konsistent sind. In diesem Abschnitt konstruieren wir den Hilbertraum, so daß die Postulate 1 und 2 erfüllt sind. Das heißt im wesentlichen, daß wir einen Darstellungsraum der Heisenbergalgebra (2.3) finden müssen. Wir hoffen, eine irreduzible Darstellung dieser Algebra finden zu können, weil andernfalls der Hilbertraum in die orthogonale Summe von Hilberträumen zerfällt, die vollständig unabhängig voneinander sind, und das System durch die Wirkung von Operatoren, die sich als Funktionen der Fundamentaloperatoren schreiben lassen, also auch Wechselwirkungsoperatoren, nie von einem dieser Teilräume in den anderen gelangen kann. Das bedeutet, daß die Dynamik schon auf einem dieser Teilräume realisierbar ist, und die übrigen Teilräume nichts zur Beschreibung des Systems beitragen.

Wir zeigen im folgenden:

Satz 4 (Der Hilbertraum). *Die Heisenbergalgebra besitzt eine irreduzible Darstellung auf einem separablen Hilbertraum. Dieser Hilbertraum läßt sich als Hilbertscher Funktionenraum L_2 oder als Hilbertscher Folgenraum ℓ_2 realisieren und ist bis auf Isomorphie eindeutig.*

Zunächst bemerken wir, daß die Liealgebra in die direkte Summe von Unterliealgebren zerfällt. Jede dieser Unterliealgebren wird von einem Paar kanonisch konjugierter Fundamentaloperatoren erzeugt. Der Darstellungsraum zerfällt entsprechend in ein Tensorprodukt aus identischen Darstellungsräumen einer solchen Unterliealgebra. Es genügt also, den irreduziblen Darstellungsraum dieser Unterliealgebra zu realisieren. Dies entspricht dem Hilbertraum eines Massepunktes, der sich auf einer Geraden bewegen kann (ein Freiheitsgrad).

Wir suchen also einen Darstellungsraum für die durch

$$\frac{1}{i} [\mathbf{x}, \mathbf{p}] = \mathbf{1}, \quad \mathbf{x}^\dagger = \mathbf{x}, \quad \mathbf{p}^\dagger = \mathbf{p} \quad (2.9)$$

definierte Liealgebra. Wir stellen fest, daß diese Algebra von den folgenden nichtselbstadjungierten Operatoren erzeugt wird:

$$\mathbf{a} = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}}(\mathbf{x} + i\alpha\mathbf{p}), \quad \mathbf{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}}(\mathbf{x} - i\alpha\mathbf{p}). \quad (2.10)$$

Dabei ist α eine beliebige von 0 verschiedene Konstante.

Wegen (2.9) gilt

$$[\mathbf{a}, \mathbf{a}^\dagger] = \mathbf{1}. \quad (2.11)$$

Weiter sei

$$\mathbf{n} = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}. \quad (2.12)$$

Mit Hilfe von (2.11) finden wir

$$[\mathbf{n}, \mathbf{a}] = -\mathbf{a}, \quad [\mathbf{n}, \mathbf{a}^\dagger] = \mathbf{a}^\dagger. \quad (2.13)$$

Jetzt nehmen wir an, es existiere eine irreduzible Darstellung dieser Liealgebra auf einem Hilbertraum. Wir zeigen, daß dieser Hilbertraum notwendig separabel ist. Gleichzeitig wird sich eine spezielle Orthonormalbasis dieses Hilbertraums ergeben.

Nun ist \mathbf{n} ein positiver Operator, d.h.

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} : \langle \psi | \mathbf{n} | \psi \rangle \geq 0. \quad (2.14)$$

Das folgt sofort aus der Definition des adjungierten Operators und der positiven Definitheit des Skalarprodukts:

$$\langle \psi | \mathbf{n} | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} | \psi \rangle = \langle \mathbf{a}\psi | \mathbf{a}\psi \rangle \geq 0.$$

Damit ist auch jeder Eigenwert von \mathbf{n} positiv. Ist nämlich $|u_\lambda\rangle$ ein normierter Eigenvektor von \mathbf{n} zum Eigenwert λ , so ist wegen (2.14)

$$0 \leq \langle u_\lambda | \mathbf{n} | u_\lambda \rangle = \lambda. \quad (2.15)$$

Jetzt betrachten wir $\mathbf{a}|u_\lambda\rangle$. Es gilt

$$\mathbf{n}\mathbf{a}|u_\lambda\rangle = ([\mathbf{n}, \mathbf{a}] + \mathbf{a}\mathbf{n})|u_\lambda\rangle = (\lambda - 1)\mathbf{a}|u_\lambda\rangle, \quad (2.16)$$

d.h. $\mathbf{a}|u_\lambda\rangle$ ist Eigenvektor von \mathbf{n} zum Eigenwert $\lambda - 1$ oder der Nullvektor.

Wegen der positiven Semidefinitheit des Operators \mathbf{n} ist klar, daß es ein $k \in \mathbb{N}$ geben muß, so daß

$$\mathbf{a}^k |u_\lambda\rangle = 0. \quad (2.17)$$

Andernfalls wäre nämlich der links stehende Vektor nach dem Vorstehenden Eigenvektor von $\lambda - k$, und k könnte beliebig groß gemacht werden. Dann hätte aber \mathbf{n} negative Eigenwerte, und das kann, wie oben gezeigt, nicht sein. Damit folgt

$$\exists 0 \neq |u_0\rangle \in \mathcal{H} : \mathbf{a}|u_0\rangle = 0, \quad (2.18)$$

und \mathbf{n} besitzt genau das Spektrum $N = \{0, 1, 2, \dots\}$. Wie oben zeigt man nun, daß $\mathbf{a}^\dagger |u_\lambda\rangle$ Eigenvektor von \mathbf{n} zum Eigenwert $\lambda + 1$ ist.

Damit führt die Anwendung der Operatoren \mathbf{a} und \mathbf{a}^\dagger nicht aus der orthogonalen Summe aller Eigenräume von \mathbf{n} hinaus, und diese orthogonale Summe ist folglich der gesuchte Hilbertraum. Wir zeigen nun, daß die Eigenräume von \mathbf{n} eindimensional sind, wenn wir annehmen, daß die Darstellung der Heisenbergalgebra irreduzibel ist. Sei also $\dim \text{Eig}(\mathbf{n}, k) = r_k$ und $\{|u_k^l\rangle\}_{l=1\dots r_k}$ ein vollständiges Orthonormalsystem von $\text{Eig}(\mathbf{n}, k)$. Man zeigt nun, daß $\{\mathbf{a}|u_k^l\rangle\}_{l=1\dots r_k}$ für $k \geq 1$ ein Satz orthogonaler linear unabhängiger Vektoren in $\text{Eig}(\mathbf{n}, k - 1)$ ist:

$$\langle \mathbf{a}u_k^{l'} | \mathbf{a}u_k^l \rangle = \langle u_k^{l'} | \mathbf{n} | u_k^l \rangle = k \langle u_k^{l'} | u_k^l \rangle = k\delta_{l'l'}. \quad (2.19)$$

Daraus ersieht man, daß diese Vektoren für $k \geq 1$ von 0 verschieden und zueinander orthogonal sind. Folglich sind sie auch linear unabhängig. Oben haben wir gesehen, daß sie allesamt Eigenvektoren von \mathbf{n} zum Eigenwert $k - 1$ sind. Daraus folgt $r_{k-1} \geq r_k$.

In analoger Weise zeigt man, daß für $k \in \mathbb{N}$ die Vektoren $\{\mathbf{a}^\dagger |u_k^l\rangle\}_{l=1\dots r_k}$ einen Satz linear unabhängiger Vektoren in $\text{Eig}(\mathbf{n}, k+1)$ bilden und folglich $r_{k+1} \geq r_k$ ist. Zusammen mit der oben hergeleiteten Ungleichung ist also $r_{k+1} = r_k$ für alle $k \in \mathbb{N}$. Das bedeutet, daß alle Eigenräume von \mathbf{n} die gleiche Dimension r besitzen.

Wir betrachten nun den Projektionsoperator

$$\mathbf{P}_l = \sum_{k=0}^{\infty} |u_k^l\rangle \langle u_k^l|. \quad (2.20)$$

Dieser Operator ist offenbar selbstadjungiert, und es gilt $\mathbf{P}_l^2 = \mathbf{P}_l$, weil die Eigenvektoren des selbstadjungierten Operators \mathbf{n} zueinander orthogonal sind. Außerdem sind sie per definitionem normiert. Wir wählen nun die orthonormierten Basisvektoren der Eigenräume von \mathbf{n} so, daß

$$\mathbf{a} |u_k^l\rangle = \sqrt{k} |u_{k-1}^l\rangle. \quad (2.21)$$

Wir haben oben gesehen, daß dies möglich ist, weil alle Eigenräume die gleiche Dimension besitzen und die von \mathbf{a} abgebildeten Basisvektoren von $\text{Eig}(\mathbf{n}, k)$ ein orthogonales System in $\text{Eig}(\mathbf{n}, k-1)$, d. h. insgesamt eine Orthogonalbasis von $\text{Eig}(\mathbf{n}, k-1)$ bilden. Durch Hinzufügen des Faktors \sqrt{k} sind die Vektoren wegen (2.19) auch normiert. Mit dieser Konvention gilt dann auch

$$\mathbf{a}^\dagger |u_k^l\rangle = \sqrt{k+1} |u_{k+1}^l\rangle. \quad (2.22)$$

Dann berechnet man für den Projektor (2.20) die Kommutatorrelationen

$$[\mathbf{P}_l, \mathbf{a}] = 0, \quad [\mathbf{P}_l, \mathbf{a}^\dagger] = 0, \quad (2.23)$$

indem man die Definition (2.20) des Projektors und die Festlegung (2.22) der Basisvektoren benutzt. Das bedeutet, daß alle \mathbf{P}_l mit \mathbf{a} und \mathbf{a}^\dagger kommutieren. Da die Darstellung der Liealgebra voraussetzungsgemäß irreduzibel ist, sind die Projektoren folglich proportional der Identität (Schursches Kommutatorlemma):

$$\mathbf{P}_l = c_l \mathbf{1} \text{ mit } c_l \in \mathbb{C}. \quad (2.24)$$

Wegen $\mathbf{P}_l^2 = \mathbf{P}_l$ ist $c_l^2 = c_l$, also $c_l = 1 \vee c_l = 0$. Weiter wird aber nach Konstruktion der Hilbertraum durch die Eigenvektoren von \mathbf{n} orthogonal erzeugt und folglich ist $\sum_{l=1}^r \mathbf{P}_l = \mathbf{1}$. Damit ist aber $c_l = 1$ für genau ein $l \in 1, 2, \dots, r$, und alle übrigen c_l verschwinden. Es folgt $r = 1$, und wir haben die Behauptung bewiesen: Die Eigenvektoren von \mathbf{n} erzeugen den Hilbertraum \mathcal{H} orthogonal. Da diese abzählbar sind, ist der Hilbertraum separabel.

2.3 Realisierung als L_2

Bis jetzt haben wir nur gezeigt, daß der Hilbertraum separabel ist, falls er existiert. Weiter haben wir gesehen, wie die Operatoren \mathbf{a} und \mathbf{a}^\dagger auf eine Orthonormalbasis, die durch die Eigenvektoren des selbstadjungierten positiven Operators \mathbf{n} gegeben sind, wirken müssen. Wir wollen in diesem Abschnitt diese Operatoren auf L_2 dicht definieren und zeigen, daß sie all die Eigenschaften besitzen, die wir oben benutzt haben. Die Wahl des Hilbertschen Funktionenraums L_2 zur Realisierung von \mathcal{H} ist bequem aber nicht entscheidend, weil man aus der Mathematik der Hilberträume weiß, daß es bis auf Isomorphie nur einen separablen Hilbertraum gibt.

Der Schlüssel zum Verständnis des L_2 aus unserem postulierten abstrakten Hilbertraum heraus ist die Betrachtung des Spektrums des Ortsoperators \mathbf{x} . Wir bemerken, daß das Spektrum eines Operators \mathbf{A} als diejenigen Werte $\lambda \in \mathbb{C}$ definiert sind, für die $\mathbf{A} - \lambda \mathbf{1}$ nicht invertierbar ist. In einem endlichdimensionalen Vektorraum ist das Spektrum eines Operators identisch mit der Menge der Eigenwerte. In einem unendlichdimensionalen Hilbertraum muß dies nicht der Fall sein. Vielmehr kann es Spektralwerte eines Operators geben, zu denen kein Eigenvektor existiert. Es gibt dann aber sog. Eigenvektoren im schwachen Sinne oder verallgemeinerte Eigenvektoren.

Wir bemerken nun, daß sich folgendes zeigen läßt: Sei \mathbf{A} ein selbstadjungierter Operator, der auf einer dichten Teilmenge $D(\mathbf{A})$ des Hilbertraums definiert ist, d.h. für $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in D(\mathbf{A})$ gilt

stets $\langle \psi_1 | \mathbf{A} \psi_2 \rangle = \langle \mathbf{A} \psi_1 | \psi_2 \rangle$. Dann ist das Spektrum eine Teilmenge von \mathbb{R} . Ist $\lambda \in \text{Spec}(\mathbf{A})$ und existiert kein Eigenvektor endlicher Vielfachheit zu λ , so kann man eine Folge $\{|\lambda_k\rangle\}_{k \in \mathbb{N}}$ finden, die keine konvergente Teilfolge enthält, für die aber gilt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (\mathbf{A} - \lambda) |\lambda_k\rangle = 0 \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \langle \lambda_k | (\mathbf{A} - \lambda)^2 | \lambda_k \rangle = 0. \quad (2.25)$$

I.a. existiert dann zu jedem $|\psi\rangle \in D(A)$ der Limes

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \langle \lambda_k | \psi \rangle := \langle \lambda | \psi \rangle \quad (2.26)$$

Dann definieren wir den schwachen limes in dem Sinne, daß $|\lambda\rangle$ eine Distribution auf $D(A)$ ist, die auf $D(A)$ durch (2.26) definiert ist. Diesen schwachen Limes bezeichnen wir auch als (*verallgemeinerten Eigenvektor*):

$$\text{w-lim}_{k \rightarrow \infty} |\lambda_k\rangle = |\lambda\rangle, \quad (2.27)$$

und wir schreiben in dem soeben genau definierten Sinne $\mathbf{A} |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle$.

Wir bemerken noch, daß es zu $\lambda \in \text{Spec}(\mathbf{A})$ nicht nur einen verallgemeinerten Eigenvektor zu geben braucht. Vielmehr kann es auch sein, daß zu einem Spektralwert beliebig viele verallgemeinerte oder gar echte linear unabhängige Eigenvektoren gibt.

Wenden wir uns nun dem Ortsoperator \mathbf{x} zu.

Als erstes zeigen wir, daß kein einziger Spektralwert von \mathbf{x} Eigenwert ist und, daß ganz \mathbb{R} das Spektrum des Ortsoperators ist, wenn dieser nur einen reellen Spektralwert besitzt. Sei also $|x_0\rangle$ ein verallgemeinerter Eigenvektor zum Spektralwert x_0 , d.h. es gilt im schwachen Sinne

$$\mathbf{x} |x_0\rangle = x_0 |x_0\rangle \text{ mit } x_0 \in \mathbb{R}. \quad (2.28)$$

Jetzt betrachten wir den Translationsoperator

$$\mathbf{T}_\xi = \exp(-i\xi\mathbf{p}) \quad (2.29)$$

und zeigen, daß

$$[\mathbf{x}, f(\mathbf{p})] = i f'(\mathbf{p}), \quad (2.30)$$

wobei f eine durch eine (formale) Potenzreihe definierte Funktion von \mathbf{p} und f' die (formale) Ableitung dieser Potenzreihe ist. Es genügt dazu schon, daß die Behauptung für Potenzen des Operators \mathbf{p} zutrifft. Für \mathbf{p} ist die Behauptung durch die Heisenbergalgebra selbst bewiesen. Angenommen, sie gilt für $k - 1 \in \mathbb{N}$, so folgt

$$[\mathbf{x}, \mathbf{p}^k] = [\mathbf{x}, \mathbf{p}^{k-1}] \mathbf{p} + \mathbf{p}^{k-1} [\mathbf{x}, \mathbf{p}] = ik \mathbf{p}^{k-1}.$$

Damit ist die Behauptung nach dem Prinzip der vollständigen Induktion bereits bewiesen. Wir wenden dies nun auf (2.29) an:

$$[\mathbf{x}, \mathbf{T}_\xi] = \xi \mathbf{T}_\xi. \quad (2.31)$$

Folglich gilt

$$\mathbf{x} \mathbf{T}_\xi |x_0\rangle = ([\mathbf{x}, \mathbf{T}_\xi] + \mathbf{T}_\xi \mathbf{x}) |x_0\rangle = (\xi + x_0) \mathbf{T}_\xi |x_0\rangle. \quad (2.32)$$

Falls also \mathbf{x} überhaupt einen reellen Spektralwert besitzt, so gehört die gesamte reelle Achse zu seinem Spektrum. Da \mathbf{x} selbstadjungiert ist, kann er nur reelle Spektralwerte besitzen, und \mathbb{R} ist das gesamte Spektrum.

Wir demonstrieren weiterhin, daß \mathbf{x} zum Spektralwert 0 keinen Eigenvektor besitzt: Nehmen wir an, es sei $|u\rangle$ doch ein Eigenvektor von \mathbf{x} zum Eigenwert 0, dann muß sich dieser Vektor, wie jeder Vektor des Hilbertraums nach der im vorigen Abschnitt konstruierten Eigenbasis von \mathbf{n} entwickeln lassen:

$$|u\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} c_k |u_k\rangle. \quad (2.33)$$

Nun ist wegen (2.10)

$$\mathbf{x} = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}(\mathbf{a} + \mathbf{a}^\dagger), \quad (2.34)$$

und die Anwendung von (2.21) und (2.22) ergibt

$$\mathbf{x} |u\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \left(\sum_{k=0}^{\infty} c_{k+1} \sqrt{k+1} |u_k\rangle + \sum_{k=1}^{\infty} c_{k-1} \sqrt{k} |u_k\rangle \right) = 0, \quad (2.35)$$

wobei letzteres aus der Annahme folgt, $|u\rangle$ sei Eigenvektor von \mathbf{x} zum Eigenwert 0. Durch Koeffizientenvergleich erhält man die Rekursionsformel

$$c_{k+2} = -\sqrt{\frac{k}{k+1}} c_k, \quad c_1 = 0. \quad (2.36)$$

Diese ergibt

$$c_{2k} = (-1)^k \sqrt{\frac{(2k-1)!!}{(2k)!!}} c_0; \quad c_{2k-1} = 0. \quad (2.37)$$

Damit ist aber $\{c_{2k}\} \notin \ell_2$, so daß $|u\rangle$ keine endliche Norm besitzt. Also existiert kein Ortseigenvektor zum Eigenwert 0. Wir können nun zeigen, daß es dann auch keinen Eigenvektor zu irgendeinem reellen Eigenwert gibt. Wäre nämlich $|u_x\rangle$ Eigenvektor von \mathbf{x} zum Eigenwert x , so wäre nach (2.32) $\mathbf{T}_x^{-1} |u_x\rangle$ Eigenvektor von \mathbf{x} zum Eigenwert 0 und dieser existiert nicht, wie wir eben gezeigt haben. Damit ist klar, daß $|x\rangle$ Eigenvektoren im verallgemeinerten Sinne sein müssen.

Mit Hilfe dieser zunächst nur postulierten verallgemeinerten Eigenvektoren können wir nun den Anschluß an die Formulierung der Quantenmechanik mit Hilfe des L_2 finden. Die Spektraldarstellung eines Hilbertraumvektors lautet

$$|\psi\rangle = \int dx |x\rangle \langle x | \psi\rangle = \int dx |x\rangle \psi(x). \quad (2.38)$$

Dabei ersetzt (2.38) eine Entwicklung nach Eigenfunktionen durch ein Integral über verallgemeinerte Eigenfunktionen im kontinuierlichen Spektrum der Operatoren. Wir können nun im schwachen Sinne auch die Skalarprodukte zwischen verallgemeinerten Eigenvektoren des Ortsoperators bilden, wie $\langle x_1 | x_2\rangle$. Nun gilt wegen der Hermitezität

$$\langle x_1 | \mathbf{x} | x_2\rangle = x_2 \langle x_1 | x_2\rangle = \langle \mathbf{x} x_1 | x_2\rangle = x_1 \langle x_1 | x_2\rangle. \quad (2.39)$$

Für $x_1 \neq x_2$ folgt dann $\langle x_1 | x_2\rangle = 0$. Andererseits muß aber, damit (2.38) für alle Hilbertraumvektoren $|\psi\rangle$ gültig ist, die verallgemeinerte Vollständigkeitsrelation

$$\int dx |x\rangle \langle x| = \mathbf{1} \quad (2.40)$$

gelten. Insbesondere gilt

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle = \int dx' \langle x | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle = \int dx' \langle x' | x \rangle \psi(x'). \quad (2.41)$$

Zusammen mit (2.39) besagt das aber, daß $\langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$ sein muß. Hier ist die Diracsche δ -Distribution aufgetaucht. Es war ja auch zu erwarten, daß verallgemeinerte Funktionen im Zusammenhang mit den verallgemeinerten Eigenvektoren auftreten werden.

In diesem Sinne können wir nun schreiben:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int dx \langle \psi_1 | x \rangle \langle x | \psi_2 \rangle = \int dx \psi_1^*(x) \psi_2(x). \quad (2.42)$$

Das bedeutet aber, daß sich das Skalarprodukt zweier Hilbertraumvektoren aus der Spektraldarstellung dieser beiden Vektoren durch Bildung des Skalarprodukts des L_2 berechnen läßt. D.h. durch die Abbildung

$$\mathcal{H} \ni |\psi\rangle \mapsto \psi(x) = \langle x | \psi \rangle \in L_2 \quad (2.43)$$

ist ein Isomorphismus vom abstrakten Hilbertraum \mathcal{H} in den Hilbertschen Funktionenraum L_2 gegeben.

Die Wirkung des Ortsoperators ist

$$\mathbf{x}|\psi\rangle = \int dx \mathbf{x} |x\rangle \langle x | \psi \rangle = \int dx |x\rangle x \langle x | \psi \rangle, \quad (2.44)$$

d.h. der obige Isomorphismus bildet $\mathbf{x}|\psi\rangle$ in $x\psi(x)$ ab.

Hier wird nun weiter folgendes deutlich. Der Operator \mathbf{x} ist nicht auf dem ganzen Hilbertraum definiert. Denn obwohl durch $\psi(x) = \sin x/x$ eine quadratintegrale Funktion gegeben ist, ist die dem Vektor $\mathbf{x}|\psi\rangle$ zugeordnete Funktion $x\psi(x) = \sin x$ gewiß nicht quadratintegrale. Andererseits ist aber \mathbf{x} dicht definiert, d.h. es existiert ein dichter Unterraum in L_2 , in dem \mathbf{x} definiert ist. Ein solcher Raum ist z.B. der sog. Schwartzsche Raum, der aus allen beliebig oft differenzierbaren Funktionen besteht, deren Betrag für $x \rightarrow \pm\infty$ schneller fällt als jede Potenz. Dieser Raum liegt dicht in L_2 , und eine Funktion dieses Raumes multipliziert mit x gehört zu eben demselben Raum. D.h. \mathbf{x} ist auf \mathcal{H} selbst nur im schwachen Sinne definiert.

Andererseits reicht aber auch die Festlegung der Wirkung des Operators auf einem dichten Unterraum von L_2 aus, weil der topologische Abschluß des dichten Unterraums in L_2 (mit kanonischer Fortsetzung der Vektoralgebra und des Skalarprodukts) wieder L_2 ist und die Operatoren in kanonischer Weise im schwachen Sinne auf ganz L_2 fortsetzbar sind.

Als nächstes wollen wir die Wirkung des Impulsoperators im Hilbertschen Funktionenraum bestimmen. Wie wir oben gesehen haben, gilt für den verallgemeinerten Ortseigenvektor

$$|x\rangle = \exp(-i\mathbf{p}x) |0\rangle \Rightarrow \frac{d}{dx} |x\rangle = -i\mathbf{p} \exp(-i\mathbf{p}x) |0\rangle = -i\mathbf{p} |x\rangle, \quad (2.45)$$

und damit folgt

$$\mathbf{p}|\psi\rangle = \int dx \mathbf{p} |x\rangle \psi(x) = i \int dx \frac{d}{dx} |x\rangle \psi(x) = \int dx |x\rangle \frac{1}{i} \frac{d}{dx} \psi(x). \quad (2.46)$$

Damit ist im Sinne unseres Isomorphismus

$$\mathbf{p}|\psi\rangle \mapsto \frac{1}{i} \frac{d}{dx} \psi(x). \quad (2.47)$$

Das zeigt sofort, daß auch der Impulsoperator nur dicht definiert ist, und zwar auf dem oben beschriebenen Schwartzschen Funktionenraum. Ferner rechnet man sofort nach, daß die beiden Operatoren \mathbf{x} und \mathbf{p} auf diesem dichten Teilraum definierte selbstadjungierte Operatoren im Sinne des L_2 sind. Damit ist gezeigt, daß der im vorigen Abschnitt postulierte Darstellungsraum des Heisenbergalgebra tatsächlich existiert und durch den Hilbertschen Funktionenraum L_2 realisiert werden kann. Die mathematisch exakte Entwicklung des hier mehr oder weniger naiv angewandten Formalismus der verallgemeinerten Eigenfunktionen ist ziemlich umfangreich und kann nicht Gegenstand einer physikalisch orientierten Behandlung der Quantenmechanik sein.

Man bezeichnet die vorstehend auf der Verwendung verallgemeinerter Ortseigenvektoren beruhende Realisierung des Hilbertraums als Ortsdarstellung. Zum Abschluß dieses Abschnittes über die Realisierung des Hilbertraums betrachten wir noch die Impulsdarstellung. Jetzt haben wir aber die Ortsdarstellung zur Verfügung und können in ihr rechnen.

Zunächst bestimmen wir die verallgemeinerten Impulseigenvektoren

$$\langle x | \mathbf{p} | p \rangle = p \langle x | p \rangle = \langle \mathbf{p} x | p \rangle = \frac{1}{i} \frac{d}{dx} u_p(x) \quad (2.48)$$

Diese Gleichung wird gelöst durch

$$u_p(x) = N_p \exp(ipx). \quad (2.49)$$

Das bedeutet, daß $p \in \mathbb{R}$ sein muß, weil sonst die verallgemeinerte Impulseigenvektoren nicht auf die δ -Distribution normierbar wären. Dies ist aber dann durch geeignete Wahl des Normierungsfaktors N_p möglich:

$$\delta(p - p') = \int dx u_{p'}^*(x) u_p(x) = N_{p'}^* N_p \int dx \exp i(p - p')x = |N_p|^2 2\pi \delta(p' - p). \quad (2.50)$$

Bis auf einen irrelevanten Phasenfaktor ist also

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ipx), \quad (2.51)$$

und die Umrechnung von der Orts- in die Impulsdarstellung und vice versa ist durch die wohlbekanntere Fouriertransformation in L_2 gegeben:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \int dp \langle x | p \rangle \psi(p) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi}} \exp(ipx) \psi(p), \\ \psi(p) &= \int dx \langle p | x \rangle \psi(x) = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \exp(-ipx) \psi(x). \end{aligned} \quad (2.52)$$

Wir bemerken dazu, daß die Fouriertransformation zunächst auf dem Schwartzschen Raum dicht definiert ist, wie Orts- und Impulsoperator, im Gegensatz zu diesen sich jedoch als auf diesem dichten Prähilbertraum unitäre (also insbesondere auch isometrische) lineare Transformation auf kanonische Art und Weise zu einem unitären (also automatisch auch stetigen) Operator in ganz L^2 fortsetzen läßt.

2.4 Unschärferelationen

Nachdem wir den quantenmechanischen Hilbertraum konstruiert haben, betrachten wir eine erste einfache physikalisch äußerst wichtige Folgerung. Seien \mathbf{A} und \mathbf{B} zwei selbstadjungierte

Operatoren, die Observablen A und B repräsentieren. Diese beiden Observablen sind nach Postulat 3 zugleich exakter Meßwerte a und b fähig, wenn es einen beiden Operatoren gemeinsamen Eigenvektor gibt. Sollen die beiden Observablen unabhängig vom zuvor präparierten Zustandes des Systems zugleich scharf meßbar sein, müssen alle Eigenwerte von \mathbf{A} und \mathbf{B} simultane Eigenvektoren besitzen. Das ist aber nur dann möglich, wenn die beiden Operatoren vertauschen. Es ist nämlich klar, daß dies auf der orthogonalen Summe der simultanen Eigenräume der Fall ist, und das ist schon der ganze Hilbertraum.

I. a. besteht das Spektrum der selbstadjungierten Operatoren sowohl aus einem diskreten als auch einem kontinuierliches Teil. Dann zerfällt die Spektraldarstellung der Hilbertraumvektoren in eine Summe (Reihe) über die zum diskreten Spektrum gehörigen Eigenvektoren und ein Integral über die zum kontinuierlichen Spektrum gehörigen verallgemeinerten Eigenvektoren im Sinne des vorigen Abschnitts. Zur Vereinfachung der Schreibweise wollen wir hier nur Integrale schreiben. Wir können dann das diskrete Spektrum mit Hilfe von δ -Distributionen mit berücksichtigen. Besitze etwa \mathbf{A} das diskrete Spektrum a_1, a_2, \dots , und das kontinuierliche Spektrum sei die Menge S_A , dann ist die Spektraldarstellung durch die Formel

$$\sum_{k=1}^{\infty} |a_k\rangle \langle a_k| + \int_{S_A} da |a\rangle \langle a| = \int da \left(\sum_{k=1}^{\infty} \delta(a - a_k) + \chi_{S_A}(a) \right) |a\rangle \langle a| = \mathbf{1} \quad (2.53)$$

gegeben. Dafür schreiben wir kurz

$$\mathbf{1} = \int da S_A(a) |a\rangle \langle a|. \quad (2.54)$$

S_A heißt die zu \mathbf{A} gehörige Spektralfunktion. Insbesondere gilt

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{1} = \int da a S_a(a) |a\rangle \langle a|, \quad (2.55)$$

was sofort aus der Bedeutung der (verallgemeinerten) Eigenvektoren von \mathbf{A} durch Ersetzen des Einsoperators gemäß (2.54) folgt.

Nach Postulat 4 berechnet sich der Erwartungswert für die Observable A , wenn sich das System im Zustand $|\psi\rangle$ befindet, zu

$$\langle A \rangle = \sum_k a_k |\langle \psi | a_k \rangle|^2 + \int_{S_A} da a |\langle \psi | a \rangle|^2 = \int da S(a) a |\psi(a)|^2 = \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle. \quad (2.56)$$

Die Standardabweichung oder Unschärfe ΔA von A definieren wir (wie in der mathematischen Statistik üblich) durch

$$\Delta A^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \langle \psi | \mathbf{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle^2. \quad (2.57)$$

Wir betonen nochmals, daß im folgenden $|\psi\rangle$ einen echten Hilbertraumvektor, nicht etwa einen verallgemeinerten Eigenvektor bezeichnet, also einen Repräsentanten für einen tatsächlich realisierbaren Zustand des Systems. Statt \mathbf{A} und \mathbf{B} betrachten wir nun die Operatoren

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \langle A \rangle \mathbf{1}, \quad \mathbf{B}' = \mathbf{B} - \langle B \rangle \mathbf{1}. \quad (2.58)$$

Für diese Operatoren verschwindet der Erwartungswert, und es gilt

$$\Delta A = \Delta A' = \sqrt{\langle \psi | \mathbf{A}'^2 | \psi \rangle}, \quad \Delta B = \Delta B' = \sqrt{\langle \psi | \mathbf{B}'^2 | \psi \rangle}. \quad (2.59)$$

Aufgrund der positiven Definitheit des Skalarprodukts gilt nun

$$\langle (\mathbf{A}' - i\lambda\mathbf{B}')\psi | (\mathbf{A}' - i\lambda\mathbf{B}')\psi \rangle \geq 0. \quad (2.60)$$

Wälzt man den Operator vom linken Argument des Skalarprodukts mittels Adjunktion auf das rechte, so erhält man für reelle λ

$$\Delta A^2 + \Delta B^2 \lambda^2 + i\lambda \langle [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \rangle \geq 0. \quad (2.61)$$

Man beachte dabei, daß aufgrund von (2.58) $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = [\mathbf{A}', \mathbf{B}']$ ist und das Binom auf der linken Seite der Ungleichung (2.61) reell ist. Das Minimum dieses Polynoms wird angenommen für

$$\lambda = -\frac{i}{2\Delta B^2} \langle [\mathbf{B}, \mathbf{A}] \rangle \in \mathbb{R}, \quad (2.62)$$

wobei wir $\Delta B \neq 0$ angenommen haben. Dies in (2.61) eingesetzt ergibt nach einfachen Umformungen

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \rangle|. \quad (2.63)$$

Jetzt ist auch klar, daß im Fall $\Delta B = 0$ der Erwartungswert des Kommutators verschwinden muß, was man auch schon aus Ungleichung (2.61), die für alle $\lambda \in \mathbb{R}$ gilt, ersieht. Daraus folgert man

Satz 5 (Heisenbergsche Unschärferelationen). *Für zwei Observablen A und B gilt stets die Heisenbergsche Unschärferelation (2.63). Die Observablen sind unabhängig vom Systemzustand genau dann simultan scharf meßbar, wenn die ihnen entsprechenden Operatoren kommutieren.*

Besonders einschneidende Konsequenzen für unsere physikalische Vorstellung von einem quantenmechanischen System hat die Unschärferelation für Ort und Impuls. Wegen der Heisenbergalgebra lautet diese nämlich

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}, \quad (2.64)$$

und das bedeutet, daß weder Ort und Impuls für sich scharf meßbar sind. Außerdem hat eine sehr genaue Ortsmessung eine große Ungenauigkeit des Impulswertes zur Folge. Das bedeutet, daß wir uns ein Teilchen nicht als punktförmiges Objekt, das sich auf einer Bahnkurve bewegt, vorstellen dürfen, denn wir können über Ort und Impuls des Teilchens nicht mehr wissen als es die Unschärferelation erlaubt. Entscheidet man sich für eine sehr genaue Ortsmessung, etwa indem man einen Zähler mit einem sehr kleinen Fenster aufstellt, weiß man so gut wie nichts über den Impuls, mit dem das Teilchen in den Zähler gelangt ist. Bestimmt man hingegen sehr genau seinen Impuls, weiß man so gut wie nichts über den Ort des Teilchens, an dem die Impulsmessung erfolgt ist.

Es ist zu betonen, daß dies der physikalische Einfluß der Meßapparatur auf das zu messende quantenphysikalische System ist. Es ist dabei unerheblich, ob von der Messung Kenntnis genommen wurde oder nicht. Es bedeutet insbesondere nicht, daß der Zustand des Systems von unserer Kenntnis desselben abhängt. Wir werden später sehen, daß bei Unkenntnis des Systemzustandes ähnlich wie in der statistischen Mechanik eine Beschreibung des Systems durch statistische Methoden sinnvoll sein kann, wobei die Elementarereignisse durch die Zustände des Systems, die durch die Basisvektoren einer beliebigen orthonormalen Basis des Hilbertraums definiert sind, gegeben sind. In der klassischen Statistik ist hingegen ein Elementarereignis durch Mengen, die genau einen Punkt des Phasenraums enthalten, gegeben. Das bedeutet nun aber weder

im quantenmechanischen noch im klassischen Fall, daß der Systemzustand im jeweiligen Sinne indeterminiert ist.

Die statistische Beschreibung durch die reinen Zustände der Quantenmechanik ist aber von anderer Natur. Sie bezieht sich auf die prinzipiell mögliche Zuordnung von Eigenschaften durch Messung von Observablen zu diesem System. Insbesondere ist ein quantenmechanisches Objekt (z.B. ein Elementarteilchen oder Atom) nicht als klassisches Punktteilchen in dem Sinne idealisierbar, daß ihm eine bestimmte Trajektorie im Phasenraum zukommt, weil Ort und Impuls keine verträglichen Observablen sind.

Dies bedeutet aber nicht, daß dadurch das Verhalten des Systems akausal wäre. Wir werden nämlich im nächsten Abschnitt zeigen, daß durch die oben formulierten Postulate das vollständige Verhalten des Systems, d.h. die nach einer Präparation desselben durch Messung eines vollständigen Satzes kompatibler Observabler, überhaupt sinnvoll zu treffenden Aussagen, vollständig determiniert werden. Über Messungen, die nicht mit dem Zustand des Systems kompatibel sind, sind allerdings nur Wahrscheinlichkeitsaussagen möglich, weil eben die durch sie beschriebenen Eigenschaften dem System vermöge der Präparation gar nicht mit Sicherheit (sondern eben nur mit der durch die Bornregel, Postulat 3, gegebenen Wahrscheinlichkeit) zukommen.

Die oft betonten Interpretationsprobleme der Quantentheorie rühren also eigentlich nur daher, daß wir immer wieder versucht sind, unsere Alltagsvorstellungen in die mikroskopische Welt der Quantensysteme übertragen wollen. Es hat sich nun aber einmal gezeigt, daß diese Vorstellungen, deren physikalische Präzisierung wir als “klassische Physik” bezeichnen, zum Widerspruch mit den Experimenten führen, wenn wir sie über ihren Gültigkeitsbereich hinaus auch auf Quantensysteme anwenden wollen.

Das gilt auch für die ursprüngliche Formulierung der 1925 von Heisenberg als *Matrizenmechanik* und von Schrödinger als *Wellenmechanik* aufgestellte Theorie. In der hier vertretenen modernen Sichtweise, die durch Dirac initiiert ist und *Allgemeine Transformationstheorie* genannt wurde, handelt es sich bei der Heisenbergschen Formulierung um die Realisierung des Hilbertraums als l_2 und der Schrödingerschen um die Ortsdarstellung in L^2 . Viele Physiker wandten sich sogleich der Schrödingerschen Wellenmechanik zu, weil sie mit den dort benötigten mathematischen Methoden, nämlich das Lösen von Eigenwertproblemen eines Differentialoperators vertrauter waren als mit dem Matrixformalismus Heisenbergs. Es stand allerdings noch die physikalische Interpretation von Schrödingers “Wellenfunktion” aus.

Die Idee, Teilchen durch Wellen zu beschreiben, stammte von de Broglie, der in einem kühnen Analogieschluß zur Teilcheninterpretation der Lichtquanten durch Einstein umgekehrt den Teilchen Wellencharakter zuschrieb. Andererseits ergab sich die begriffliche Schwierigkeit, daß Teilchen eben als solche detektiert werden, z.B. in Form eines Teilchenstrahls in einem Kathodenstrahlrohr, und z.B. die Messungen Thomsons zeigten eindeutig typische Teilcheneigenschaften dieser von ihm sog. Elektronen.

Es war Born, der 1927 in seiner berühmten Arbeit zur Streutheorie in einer Fußnote die heute noch akzeptierte Interpretation der Wellenfunktion gab, nämlich, daß durch deren Betragsquadrat $|\psi(x)|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte für das Auftreten eines Teilchens am Ort x gegeben ist.

Mit dieser Interpretation konnten sich nun viele (auch bedeutende) Physiker nicht anfreunden unter ihnen auch Einstein und Schrödinger, die an der Entwicklung der Quantentheorie einen maßgeblichen Anteil hatten! Die Aufstellung der Unschärferelationen durch Heisenberg brachte dann Nils Bohr, mit dem er ständig in Kontakt stand und der neben Sommerfeld als einer sei-

ner geistigen Väter gelten darf, zu der auch heute noch in den meisten Vorlesungen gelehrten *Kopenhagener Deutung* der Quantenmechanik. Der Kern dieser Deutung war ein recht „unscharfer“ philosophischer Begriff, nämlich der der *Komplementarität*. Damit wurde ausgedrückt, daß es unvereinbare Observablen und Eigenschaften von Quantensystemen gibt, die aber doch alle zusammen das System charakterisieren. Die Unvereinbarkeit rührte für Bohr von der Notwendigkeit her, Experimente mit der Sprache der klassischen Physik und mit klassischen Meßapparaturen durchzuführen, und die Wahl des Meßapparats bestimmte den Charakter der dem System zugeordneten Eigenschaften. Ein Beispiel für komplementäre Eigenschaften war der von Bohr geprägte Begriff vom „Welle-Teilchendualismus“. So äußerte sich z.B. Licht einmal als Welle (etwa bei der Beugung an Spalt oder Gitter) und einmal als Teilchenstrom (z.B. beim Photo- oder Comptoneffekt).

In diesen Notizen folge ich der sog. *Minimalen Statistischen Interpretation*, die allein durch die oben angegebenen Postulate impliziert ist. Insbesondere versuche ich, Quantensysteme nicht mit klassischen Begriffen wie „Welle“ oder „Teilchen“ zu beschreiben sondern durch den abstrakten Hilbertraumformalismus der Quantentheorie selbst. Über 70 Jahre nach der Entwicklung der Quantentheorie hat sie alle experimentellen Tests überstanden, und zwar sind auch Experimente möglich geworden, die mit einzelnen Quanten operieren, die zur Zeit Bohrs gar nicht denkbar gewesen wären. Man denke nur an das sich stürmisch entwickelnde Gebiet der Quantenoptik und der Teilchenfallen. Die uns bizarr anmutenden Aussagen der Quantentheorie haben sich stets auch in diesen extrem „quantigen“ Situationen blendend bewährt. Dies macht uns bewußt, daß alle Naturwissenschaften nur im Kontakt zwischen Experiment und Theorie überhaupt möglich ist, und das gilt auch für die klassische Physik. Die experimentellen Resultate, ja schon die Definition der zu messenden Größen selbst, bedürfen der theoretischen Interpretation, damit sie physikalisch relevante Aussagen zulassen. Umgekehrt ist die Theorie physikalisch nur dann sinnvoll, wenn sie experimentelle Tests ihrer Gültigkeit zuläßt, d.h. sie muß Aussagen über reale Experimente treffen können. All diese Anforderungen erfüllt die Quantentheorie, und sie konnte trotz großer experimentiertechnischer Anstrengungen bisher nicht widerlegt werden. Wir müssen also Quantensysteme durch die abstrakte Quantentheorie beschreiben, weil wir für ihre Eigenschaften gar keine klassischen Begriffe haben.

Der einzige Unterschied zu Bohrs Auffassung liegt nicht allein in dieser rein begrifflichen Sprachdefinition, sondern auch in der Auffassung des „klassischen Meßapparates“. Nach dem soeben beschriebenen experimentellen Tatbestand zu schließen müssen wir davon ausgehen, daß alle physikalischen Systeme im Rahmen der Quantentheorie beschreibbar sind, während die klassische Physik eine auf makroskopische Körper anwendbare Näherung darstellt.

Als Theoretiker haben wir uns also zwei Problemen zu stellen. Von fundamentaler Seite her müssen wir eine generisch quantentheoretische Formulierung der Quantentheorie angeben. Bisher haben wir ja klassische Systeme in dem physikalisch nicht näher begründbaren ad hoc-Verfahren der „kanonischen Quantisierung“ quantentheoretisch beschrieben. Dieses werden wir im nächsten Kapitel lösen, indem wir uns der im ersten Kapitel für die klassische Mechanik angedeuteten Theorie der Symmetriegruppen bedienen um physikalische Darstellungen dieser Symmetrien zur Definition von Observablen und deren Beschreibung im Hilbertraum zu erhalten. Der Bezug zum entsprechenden klassischen System ist nur über diese abstrakte Symmetriegruppe gegeben, es ist aber keine wie auch immer geartete „Quantisierung“ dieses klassischen Systems mehr notwendig. Diese Auffassung führt auch zu typisch quantentheoretischen Observablen wie dem Teilchenspin, der klassisch gar nicht adäquat zu fassen ist.

Die zweite Aufgabe ist die, zu erklären, wie unser „klassisches“ Alltagsleben zustande kommt.

Dazu ist genau zu zeigen, in welchem Sinne eine klassische Näherung der Quantentheorie existiert und in welchen physikalischen Situationen sie gültig ist. Unsere Erfahrung sagt, daß dies für makroskopische Systeme, die sich aus einer riesigen Anzahl von Atomen konstituieren (die sich wiederum als zusammengesetzt aus Kern (der sich selbst letztlich aus einem komplizierten Vielteilchenzustand von Quarks und Gluonen konstituiert) und Elektronen erwiesen haben usw.), der Fall ist. Es zeigt sich in der Tat, daß mit Hilfe der Quantenstatistik das klassische Verhalten solcher Systeme erklärbar ist: Aufgrund der großen Anzahl von Freiheitsgraden der Systeme ist eine vollständige Beschreibung gar nicht realisierbar, und die relevante Information über das System ist über die statistische Mittelung sehr vieler Quantenzustände gegeben. Auch die Wechselwirkung der Quantensysteme mit den makroskopischen Meßapparaten läßt sich auf diese Weise quantentheoretisch erfassen, und dies macht die Quantentheorie zu einer konsistenten Erklärung unserer physikalischen Realität.

Wir zeigen jetzt noch, daß es Zustände gibt, für die in (2.64) das Gleichheitszeichen gilt, wobei man die Ortsunschärfe (oder die Impulsunschärfe) willkürlich (positiv) wählen kann. Es ist klar, daß in der Unschärferelation (2.64) das Gleichheitszeichen genau dann gilt, wenn es in (2.60) gilt, wobei der Ortserwartungswert $\langle x \rangle = 0$ ist. Wegen der positiven Definitheit des Skalarprodukts folgt schon, daß

$$(\mathbf{x} - i\lambda\mathbf{p})|\psi\rangle = 0. \quad (2.65)$$

In der Ortsdarstellung lautet diese Gleichung

$$\psi'(x) = \frac{x}{\lambda}\psi(x), \quad (2.66)$$

die durch

$$\psi(x) = C \exp\left(\frac{x^2}{2\lambda}\right) \quad (2.67)$$

gelöst wird. Es folgt, daß für $\lambda = -2\sigma^2 < 0$: $\psi \in L_2$ ist, also einen Repräsentant eines Zustandes in L_2 ist. C wird so bestimmt, daß ψ auf 1 normiert ist:

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right). \quad (2.68)$$

Die Ortsunschärfe ist

$$\Delta x^2 = \int dx x^2 \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) = \sigma^2. \quad (2.69)$$

Es ist klar, daß σ , also Δx beliebig wählbar ist. Man rechnet auch sofort nach, daß in (2.60) tatsächlich das Gleichheitszeichen gilt:

$$\Delta p^2 = \int \exp\left(-\frac{x^2}{4\Delta x^2}\right) \left(\frac{1}{i} \frac{d}{dx}\right)^2 \exp\left(-\frac{x^2}{4\Delta x^2}\right) \frac{1}{\Delta x\sqrt{2\pi}} = \frac{1}{4\Delta x^2}. \quad (2.70)$$

2.5 Die Dynamik

2.5.1 Zeitentwicklung der Operatoren

Die Zeitabhängigkeit der Operatoren ist so zu bestimmen, daß diese zu jedem Zeitpunkt selbstadjungiert sind und die Kommutatorrelationen der Heisenbergalgebra zeitlich forminvariant bleiben. Wie wir oben gesehen haben, bestimmen sich der Hilbertraum und die Eigenwerte der

Operatoren aus diesen Kommutatorrelationen, so daß auch diese zu jedem Zeitpunkt gleich bleiben. Insbesondere bleibt das Eigenvektorsystem von \mathbf{n} stets eine Orthonormalbasis des Hilbertraums \mathcal{H} . Damit ist die Zeitentwicklung bis auf einen willkürlichen zeitabhängigen Phasenfaktor äquivalent einer Basistransformation des Hilbertraums, die die Orthonormalbasis bestehend aus Eigenvektoren von \mathbf{n} wieder in eine Orthonormalbasis überführt.

Daraus folgt aber, daß die Zeitentwicklung der Fundamentaloperatoren \mathbf{x} und \mathbf{p} durch eine unitäre Abbildung $\mathbf{A}(t, t_0)$ des Hilbertraums \mathcal{H} in sich gegeben sein muß:

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{A}(t, t_0)\mathbf{x}(t_0)\mathbf{A}^\dagger(t, t_0), \quad \mathbf{p}(t) = \mathbf{A}(t, t_0)\mathbf{p}(t_0)\mathbf{A}^\dagger(t, t_0). \quad (2.71)$$

Ist nun \mathbf{A} eine Funktion von \mathbf{x} , \mathbf{p} und ggf. explizit von der Zeit t , so gilt

$$\mathbf{A}[\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t), t] = \mathbf{A}(t, t_0)O[\mathbf{x}(t_0), \mathbf{p}(t_0), t]\mathbf{A}^\dagger(t, t_0), \quad (2.72)$$

was man sofort aus (2.71) folgert, wobei man sich die Operatorfunktion als Potenzreihe in \mathbf{x} und \mathbf{p} vorzustellen hat.

Um jetzt den Zusammenhang mit der Zeitentwicklung des Zustandes $[|\psi, t\rangle]$ herzustellen, wählen wir einen normierten Vektor $|\psi, t\rangle$ als Repräsentanten. Auch dieser ist nicht eindeutig durch den Strahl bestimmt, sondern enthält noch einen willkürlichen Phasenfaktor. Diesen können wir dadurch eliminieren, daß wir den Zustand umkehrbar eindeutig durch einen Projektionsoperator der Form

$$\mathbf{P}_\psi(t) = |\psi, t\rangle\langle\psi, t| \quad (2.73)$$

darstellen können. Wir werden später sehen, daß dies der Spezialfall eines allgemeinen statistischen Operators ist. Man bezeichnet $\mathbf{P}_\psi(t)$ auch als statistischen Operator des reinen Zustandes $[|\psi\rangle]$. Im Gegensatz dazu sagt man, daß ein statistischer Operator, der kein Projektionsoperator ist, einen *gemischten Zustand* beschreibt. Dieser Operator enthält die Wahrscheinlichkeiten (bzw. Wahrscheinlichkeitsdichten) dafür, daß sich das System in bestimmten orthogonalen (verallgemeinerten) Zuständen befindet. Wir verschieben die mathematische Ausformulierung dieses Sachverhalts auf später und konzentrieren uns zunächst auf die Realisierung der Zeitentwicklung. Die physikalische Zuordnung des Zustandes zum System ist ein für allemal gegeben, so daß die physikalische Änderung dieses Operators verschwindet, d.h.

$$\dot{\mathbf{P}}_{|\psi\rangle} = \frac{1}{i} [\mathbf{P}_\psi, \mathbf{H}] + \frac{\partial \mathbf{P}_\psi}{\partial t} = 0. \quad (2.74)$$

Jetzt definieren wir durch

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(t, t_0) = -\frac{1}{i} \mathbf{X} \mathbf{A}(t, t_0) \quad (2.75)$$

den Operator \mathbf{X} und zeigen, daß er unabhängig von t_0 und selbstadjungiert ist. Letzteres folgt aus der Unitarität von $\mathbf{A}(t, t_0)$. Es bedeutet dies nämlich $\mathbf{A}^\dagger \mathbf{A} = \mathbf{A} \mathbf{A}^\dagger = \mathbf{1}$. Damit folgt

$$\mathbf{X} = -i \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{A}^\dagger = -i \frac{\partial (\mathbf{A} \mathbf{A}^\dagger)}{\partial t} + i \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{A}^\dagger}{\partial t} = +i \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{A}^\dagger}{\partial t}. \quad (2.76)$$

Schreiben wir den unitären Operator mit Hilfe einer zeitunabhängigen Orthonormalbasis $\{|n\rangle\}_{n=1,2,\dots}$ in der Form

$$\sum_{m,n=1}^{\infty} |m\rangle \langle m | \mathbf{A} | n\rangle \langle n|, \quad (2.77)$$

erkennen wir, daß selbstadjungierte Konjugation und Zeitableitung miteinander vertauschen, weil die Zeitableitung der Matrixelemente mit der komplexen Konjugation vertauschbar ist. Konjugation der Gleichung (2.76) ergibt damit die Hermitezität von \mathbf{X} :

$$\mathbf{X}^\dagger = -i \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{A}^\dagger = \mathbf{X}. \quad (2.78)$$

Sei nun $t_0 < t_1 < t$. Dann gilt aufgrund von (2.71)

$$\mathbf{A}(t, t_0) = \mathbf{A}(t, t_1) \mathbf{A}(t_1, t_0), \quad (2.79)$$

denn der rechts stehende Operator auf der rechten Seite dieser Gleichung leistet die Zeitentwicklung von t_0 nach t_1 , der linke die Zeitentwicklung von t_1 nach t . Partielle Ableitung dieser Gleichung nach t ergibt die Behauptung:

$$\mathbf{X} = -i \frac{\partial \mathbf{A}(t, t_0)}{\partial t} \mathbf{A}(t, t_0)^\dagger = -i \frac{\partial \mathbf{A}(t, t_1)}{\partial t} \mathbf{A}(t, t_1)^\dagger. \quad (2.80)$$

Zusammenfassend können wir sagen, daß die Zeitentwicklung der Zustände durch einen unitären Operator $\mathbf{A}(t, t_0)$ gegeben ist, der sich seinerseits durch das Anfangswertproblem

$$\frac{\partial \mathbf{A}(t, t_0)}{\partial t} = i \mathbf{X}(t) \mathbf{A}(t, t_0), \quad \mathbf{A}(t_0, t_0) = \mathbf{1} \quad (2.81)$$

bestimmen läßt. Bisher haben wir von der Unitarität abgesehen keinerlei Bedingungen an \mathbf{A} gestellt. Das bedeutet, daß dieser Zeitentwicklungsoperator, also der selbstadjungierte Operator \mathbf{X} , willkürlich ist. Man nennt eine bestimmte Wahl des Operators \mathbf{X} die Wahl des Bildes der quantenmechanischen Dynamik. Es ist klar, daß die physikalischen Aussagen der Quantenmechanik von der Wahl des Bildes unabhängig sind. Diese bestehen nämlich in der Bildung von Skalarprodukten zur Berechnung von Wahrscheinlichkeiten (bzw. Wahrscheinlichkeitsdichten im Falle verallgemeinerter Eigenvektoren) für das Eintreten bestimmter Meßwerte beim Messen einer Observablen, also auch der Berechnung von Erwartungswerten und Matrixelementen, und diese sind, wie wir weiter unten sehen werden, unabhängig von der Wahl des Bildes der quantenmechanischen Dynamik. Daß die Wahl des Bildes physikalisch irrelevant ist, folgt schon daraus, daß all die genannten Größen unabhängig von einer unitären Transformation der Zustände und Operatoren \mathbf{U} ist, und diese unitäre Transformation kann zeitabhängig gewählt werden. Wir werden im folgenden zeigen, daß der Wechsel von einem Bild zu einem anderen durch solch eine zeitabhängige unitäre Transformation gegeben ist.

Bevor wir die Zeitentwicklung der Zustandsvektoren des Systems bestimmen, wollen wir die formale Lösung des Anfangswertproblems (2.81) angeben. Das zentrale Problem besteht dabei in der eventuellen Zeitabhängigkeit des Operators $\mathbf{X}(t)$ und daß der Operator zu einer Zeit t_1 nicht mit dem zu einer anderen Zeit t_2 kommutieren muß. Wir können also das Anfangswertproblem nicht wie eine Differentialgleichung von komplexwertigen Funktionen lösen.

Zunächst können wir aber die Zeitableitung unter Berücksichtigung der Anfangsbedingung hochintegrieren:

$$\mathbf{A}(t, t_0) = \mathbf{1} + i \int_{t_0}^t d\tau \mathbf{X}(\tau) \mathbf{A}(\tau, t_0). \quad (2.82)$$

Diese Integralgleichung läßt sich in iterativer Form lösen

$$\mathbf{A}_n(t, t_0) = \mathbf{1} + i \int_{t_0}^t d\tau \mathbf{X}(\tau) \mathbf{A}_{n-1}(\tau, t_0), \quad \mathbf{A}_0(t, t_0) = \mathbf{1}. \quad (2.83)$$

Durch vollständige Induktion folgt daraus, daß sich die Integration (formal) durch die folgende Reihe darstellen läßt:

$$\mathbf{A}(t, t_0) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{A}^{(k)}(t, t_0) \text{ mit} \quad (2.84)$$

$$\mathbf{A}^{(k)}(t, t_0) = \int_{t_0}^t d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_{t_0}^{\tau_{k-1}} d\tau_k \mathbf{X}(\tau_1) \mathbf{X}(\tau_2) \dots \mathbf{X}(\tau_k).$$

Wir wollen diese Reihe noch in eine einfachere Gestalt bringen. Dazu betrachten wir $\mathbf{A}^{(2)}(t, t_0)$:

$$\int_{t_0}^t d\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 \mathbf{X}(\tau_1) \mathbf{X}(\tau_2). \quad (2.85)$$

Das Integrationsgebiet ist das folgende Dreieck in der $\tau_1\tau_2$ -Ebene:

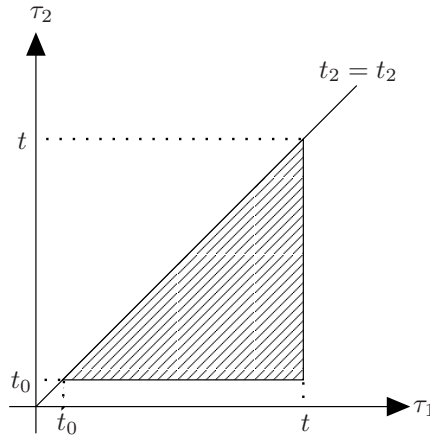


Abbildung 2.1: Zur Integration des der Operatorzeitentwicklung

Nach dem Satz von Fubini können wir die Reihenfolge der Integrationen vertauschen:

$$\mathbf{A}^{(2)} = \int_{t_0}^t d\tau_1 \int_{\tau_1}^t d\tau_2 \mathbf{X}(\tau_1) \mathbf{X}(\tau_2). \quad (2.86)$$

Die entscheidende Beobachtung ist, daß sowohl in der ursprünglichen Form (2.85) als auch in der Form (2.86) die Operatoren in der Ordnung auftreten, in der die Operatoren von rechts nach links zu wachsenden Zeiten zu stehen kommen. Dafür definiert man den kausalen Zeitordnungsoperator T_c , der stets auf ein Produkt von Operatoren wirkt und für die Zeitordnung sorgt, in der die Zeiten von rechts nach links in wachsender Folge stehen. Sind die Operatoren in dem Produkt zeitunabhängig vereinbaren wir, daß der Zeitordnungsoperator die Reihenfolge der Operatoren ungeändert läßt.

Mit Hilfe dieses Ordnungsoperators können wir dann in (2.86) durch Umbenennen der Integrationsvariablen τ_1 und τ_2 vertauschen. Mit Hilfe des Zeitordnungsoperators lassen sich die beiden Gleichungen addieren, so daß auf der linken Seite $2\mathbf{A}^{(2)}$ entsteht und auf der rechten das Integral über das gesamte Quadrat $(t_0, t) \times (t_0, t)$ integriert wird:

$$2\mathbf{A}^{(2)}(t, t_0) = T_c \int_{t_0}^t d\tau_1 \int_{t_0}^t d\tau_2 \mathbf{X}(\tau_1) \mathbf{X}(\tau_2). \quad (2.87)$$

Wir behaupten nun, daß im allgemeinen Fall

$$\mathbf{A}^{(k)}(t, t_0) = \frac{1}{k!} T_c \int_{t_0}^t d\tau_1 \cdots \int_{t_0}^t d\tau_n \mathbf{X}(\tau_1) \cdots \mathbf{X}(\tau_n) \quad (2.88)$$

ist. Zum Beweis nehmen wir an, die Behauptung sei für $k = n - 1$ wahr. In (2.84) setzen wir $k = n$. Darin ergeben die $n - 1$ innersten Integrale definitionsgemäß $\mathbf{A}^{(n-1)}(\tau_1, t_0)$. Nach Induktionsannahme ist für dieses Integral die Behauptung wahr, d.h. es gilt

$$\mathbf{A}^{(n)}(t, t_0) = \frac{1}{(n-1)!} \int_{t_0}^t d\tau_1 \mathbf{X}(\tau_1) T_c \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_n \mathbf{X}(\tau_2) \cdots \mathbf{X}(\tau_n). \quad (2.89)$$

Jetzt denken wir uns die Rechnung, die wir schon für $\mathbf{A}^{(2)}$ ausgeführt haben, nacheinander jeweils für das äußerste und eines der innersten Integrale ausgeführt und die Ergebnisse der entstehenden Gleichungen addiert. Dann erhält man nach Division durch n

$$\mathbf{A}^{(n)}(t, t_0) = \frac{1}{n!} T_c \int_{t_0}^t d\tau_1 \cdots \int_{t_0}^t d\tau_n \mathbf{X}(\tau_1) \cdots \mathbf{X}(\tau_n), \quad (2.90)$$

und dies ist die Behauptung für $k = n$, so daß diese nach dem Prinzip der vollständigen Induktion bewiesen ist.

Wir können damit die Reihe (2.84) symbolisch in der folgenden Form schreiben

$$\mathbf{A}(t, t_0) = T_c \exp \left[i \int_{t_0}^t d\tau \mathbf{X}(\tau) \right]. \quad (2.91)$$

Damit ist aber gezeigt, daß wenigstens formal die Integration des Anfangswertproblems (2.81) durchführbar ist, d.h. das Bild genauso gut durch den lokalen Zeitoperator $\mathbf{X}(t)$ definiert ist wie durch den Zeitentwicklungsoperator $\mathbf{A}(t, t_0)$ selbst. Das bedeutet aber, daß die Quantenmechanik als lokaler Vorgang in der Zeit formulierbar ist. Wir werden sehen, daß die grundlegende Struktur der Quantenmechanik auch noch wesentlich vom Raum-Zeit-Kontinuum als ganzem abhängt. Entscheidend wird dies allerdings erst bei der Spezifizierung der physikalisch sinnvollen Hamiltonoperatoren.

2.5.2 Zeitentwicklung der Zustände

Bis jetzt haben wir das Bild nur zur Hälfte festgelegt, nämlich durch Wahl eines willkürlichen selbstadjungierten zeitlich lokalen Operators \mathbf{X} , aus dem wir mit Hilfe der Reihe (2.91) den Zeitentwicklungsoperator für die Operatoren berechnen können. Als nächstes müssen wir einen entsprechenden Entwicklungsoperator für die Zustände, die dem System zugeordnet werden können, finden.

Dazu verwandeln wir die Information, die in der grundlegenden Gleichung (2.71) liegt, unter Verwendung von (2.75) in ein Anfangswertproblem zur Berechnung der Operatoren. Durch Produktdifferentiation finden wir unmittelbar die Bewegungsgleichung für die Operatoren

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{1}{i} [\mathbf{A}, \mathbf{X}] + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \quad (2.92)$$

Der Zusammenhang zwischen der “physikalischen Zeitableitung” (2.8) und der “mathematischen Zeitableitung” (2.92) wird deutlich, wenn wir in (2.92) die explizite Zeitableitung mit Hilfe von (2.8) eliminieren. Wir schreiben das Ergebnis sofort in Kommutatoren um:

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \dot{\mathbf{A}} - \frac{1}{i} [\mathbf{A}, \mathbf{H} - \mathbf{X}]. \quad (2.93)$$

Wir wenden uns jetzt der Zeitentwicklung der Zustände zu. Dabei tritt das Problem auf, daß diese durch den Strahl $[[\psi\rangle]$ und nicht durch die Hilbertraumvektoren selbst gegeben sind. Mit den Strahlen kann man aber nicht gerade bequem rechnen. Dieses Problem wird, wie immer in der Physik, durch Auszeichnung eines besonders bequem zu handhabenden Repräsentanten, nämlich eines normierten Zustandsvektors $|\psi\rangle$ und einer bequemen Wahl der durch die Normierungsbedingung noch nicht festgelegten Phase dieses Vektors.

Andererseits besitzen wir aber schon einen Repräsentanten des Zustandes, der von dem unbestimmten Phasenfaktor bereits befreit ist, nämlich den statistischen Operator des reinen Zustandes \mathbf{P}_ψ , für den wir das Verschwinden der *physikalischen* Zeitableitung gefordert hatten, vgl. (2.74). Es ist klar, daß für \mathbf{P}_ψ die für jeden Operator gültige Bewegungsgleichung (2.93) gilt. Zusammen mit der axiomatischen Forderung (2.74) liest sich diese

$$\frac{d\mathbf{P}_\psi}{dt} = -\frac{1}{i} [\mathbf{P}_\psi, \mathbf{Y}] \quad \text{mit } \mathbf{Y} = \mathbf{H} - \mathbf{X}. \quad (2.94)$$

Zur Bestimmung der Bewegungsgleichung für den Zustandsvektor \mathbf{P}_ψ wenden wir diesen Operator auf einen beliebigen zeitlich konstanten Hilbertraumvektor $|\phi\rangle$ an und bilden von dem entstehenden Ausdruck die Zeitableitung

$$\frac{d\mathbf{P}_\psi}{dt} |\phi\rangle = \frac{d|\psi\rangle}{dt} \langle\psi|\phi\rangle + |\psi\rangle \left\langle \frac{d\psi}{dt} \middle| \phi \right\rangle. \quad (2.95)$$

Andererseits muß dasselbe herauskommen, wenn wir die rechte Seite von (2.94) auf $|\phi\rangle$ anwenden, d.h.

$$\left\langle \frac{d\psi}{dt} \middle| \phi \right\rangle + |\psi\rangle \left\langle \frac{d\psi}{dt} \middle| \phi \right\rangle = i|\psi\rangle \langle\psi|\mathbf{Y}|\phi\rangle - i\mathbf{Y}|\psi\rangle \langle\psi|\phi\rangle. \quad (2.96)$$

Ordnet man diese Gleichungen ein wenig um, folgt

$$\frac{d|\psi\rangle}{dt} + i\mathbf{Y}|\psi\rangle = \alpha(t)|\psi\rangle \quad \text{mit } \alpha : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}. \quad (2.97)$$

Setzt man dies wieder in (2.96) ein, findet man

$$\alpha(t)|\psi\rangle \langle\psi|\phi\rangle + \alpha^*(t)|\psi\rangle \langle\psi|\phi\rangle = 0. \quad (2.98)$$

Wegen $|\psi\rangle \neq 0$ und wegen der Willkür von $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ bedeutet dies, daß $\alpha(t) = -\alpha^*(t)$, d.h. wir können schreiben $\alpha(t) = i\beta(t)$ mit $\beta : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Man kann nun, ohne die physikalischen Aussagen der Quantentheorie zu ändern, die Phase von $|\psi\rangle$ ändern. Statt $|\psi\rangle$ können wir also den dazu äquivalenten Zustandsvektor $|\psi'\rangle$ mit

$$|\psi'\rangle = \exp \left[-i \int_{t_0}^t d\tau \beta(\tau) \right] |\psi\rangle \quad (2.99)$$

als Repräsentanten des Zustandes $[[\psi\rangle]$ nehmen. Setzen wir dies in (2.97) ein, ergibt sich für ψ' die Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} |\psi'\rangle = -i\mathbf{Y} |\psi'\rangle, \quad (2.100)$$

die sich in eine zu (2.81) analoge Operatoranfangswertaufgabe umformen läßt, indem man den Ansatz

$$|\psi', t\rangle = \mathbf{C}(t, t_0) |\psi, t_0\rangle \quad (2.101)$$

in (2.100) einsetzt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{C}(t, t_0) = -i\mathbf{Y}(t)\mathbf{C}(t, t_0). \quad (2.102)$$

Daß \mathbf{Y} nicht von t_0 abhängt, folgt aus der für \mathbf{C} gültigen Zusammensetzungsregel (2.71) genau wie für \mathbf{X} , ist also eine Konsistenzbedingung für die Gültigkeit von (2.102), woraus sich wegen der Definition von $\mathbf{Y} = \mathbf{H} - \mathbf{X}$ in (2.94) ergibt, daß auch der Hamiltonoperator \mathbf{H} zeitlich lokal sein muß, also nur von t , nicht aber vom Anfangszeitpunkt t_0 abhängen darf. Es ist weiterhin klar, daß wegen der bis auf das Vorzeichen mit (2.81) gleichen Struktur von (2.102) die Lösung durch die zu (2.91) analoge Gleichung

$$\mathbf{C}(t, t_0) = T_c \exp \left[-i \int_{t_0}^t d\tau \mathbf{Y}(\tau) \right] \quad (2.103)$$

gegeben ist. Wegen der Hermitizität von \mathbf{Y} ist folglich der Operator \mathbf{C} unitär.

2.5.3 Die Schrödingergleichung

Sei nun \mathbf{A} eine nicht explizit zeitabhängige operatorwertige Funktion der Fundamentaloperatoren \mathbf{x} und \mathbf{p} . Dann gilt nach (2.71):

$$\mathbf{A}[\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)] = \mathbf{A}(t, t_0)\mathbf{A}[\mathbf{x}(t_0), \mathbf{p}(t_0)]\mathbf{A}^\dagger(t, t_0). \quad (2.104)$$

Ist $|o, t_0\rangle$ (verallgemeinerter) Eigenvektor von \mathbf{A} zum Eigenwert o zur Zeit t_0 . Wegen (2.104) folgt sofort, daß dann

$$|o, t\rangle = \mathbf{A}(t, t_0) |o, t_0\rangle \quad (2.105)$$

Eigenvektor von \mathbf{A} zum gleichen Eigenwert o zur Zeit t ist:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}[\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)] |o, t\rangle &= \mathbf{A}(t, t_0)\mathbf{A}[\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)]\mathbf{A}^\dagger(t, t_0)\mathbf{A}(t, t_0) |o, t\rangle = \\ &= o\mathbf{A}(t, t_0) |o, t_0\rangle = o |o, t\rangle. \end{aligned} \quad (2.106)$$

Das bedeutet, daß in dem Fall, daß der Operator nicht explizit zeitabhängig ist, sein Spektrum ungeändert bleibt, und die Zeitentwicklung der zu jedem Eigenwert gehörigen (verallgemeinerten) Eigenvektoren durch den Zeitentwicklungsoperator für die Zustände gegeben ist. Es ist klar, daß die Eigenwerte selbst zeitabhängig werden, wenn die Operatoren explizit zeitabhängig sind.

Für die Komponenten des Zustandsvektors gilt demzufolge

$$\begin{aligned} \psi(t, o) &= \langle o, t | \psi, t \rangle = \langle \mathbf{A}(t, 0) o, t_0 | \mathbf{C}(t, t_0) \psi, t_0 \rangle = \\ &= \langle o, t_0 | \mathbf{A}^\dagger(t, t_0) \mathbf{C}(t, t_0) | \psi, t_0 \rangle, \end{aligned} \quad (2.107)$$

und das bedeutet, daß sich diese vermöge des unitären Operators

$$\mathbf{U}(t, t_0) = \mathbf{A}^\dagger(t, t_0)\mathbf{C}(t, t_0) \quad (2.108)$$

zeitlich entwickeln. Schon daraus ersehen wir, daß dieser Operator bildunabhängig sein muß, weil die Zeitentwicklung von (verallgemeinerten) Skalarprodukten bildunabhängig ist.

Leiten wir nun (2.108) nach der Zeit ab, folgt

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, o) = \langle o, t | \mathbf{H} | \psi, t \rangle = \mathbf{H} \psi(t, o). \quad (2.109)$$

Dabei ist auf der rechten Seite dieser Doppelgleichung die Wirkung von \mathbf{H} durch den mittleren Term gegeben, und das entspricht dem im vorigen Abschnitt eingeführten Isomorphismus zwischen L_2 (in dem Fall, daß \mathbf{A} ein rein kontinuierliches Spektrum besitzt) bzw. ℓ_2 (in dem Fall, daß \mathbf{A} ein rein diskretes Spektrum besitzt) und dem abstrakten Hilbertraum der Diracschen Formulierung der Quantenmechanik.

Es ist klar, daß auch der Fall eintreten kann, daß beide Darstellungsformen zugleich angewendet werden müssen, nämlich dann, wenn das Spektrum von \mathbf{A} sowohl einen kontinuierlichen als auch einen Diskreten Anteil besitzt. Wie wir oben gezeigt haben, kann man mit Hilfe der verallgemeinerten Funktionen und der spektralen Dichtefunktion, alles in einer einheitlichen Form mit Hilfe von Integralen darstellen.

(2.109) heißt *zeitabhängige Schrödingergleichung*. Wählen wir für \mathbf{A} den Ortsoperator, ergibt sich ihre ursprüngliche Form als „Wellengleichung“.

2.5.4 Vollständiger Satz kompatibler Operatoren

Die Darstellung läßt sich in der eben angegebenen Weise nur dann vollständig durch die Entwicklung nach Eigensystemen eines Operators charakterisieren, wenn dieser Operator nicht entartet ist, d.h. wenn die Eigenräume zu einem gegebenen Eigenwert sämtlich eindimensional sind. Ansonsten hat man der Entartung Rechnung zu tragen, indem man simultan weitere mit diesem Operator kommutierende und von ihm unabhängige Operatoren diagonalisiert, und zwar solange bis die simultanen Eigenräume eindimensional sind. Wir bezeichnen eine Menge von solchen Operatoren als *vollständigen Satz kompatibler Observabler*.

Ein solcher vollständiger Satz ist für ein quantisiertes klassisches System mit n Freiheitsgraden z.B. durch die n Ortsoperatoren gegeben. Diese kommutieren untereinander, sind also verträglich. Wie wir im vorigen Abschnitt bei der Konstruktion des Hilbertraums gesehen haben, sind sie auch vollständig. Wie wir oben ausführlich nachgewiesen haben, ist im eindimensionalen Fall der Ortsoperator allein schon vollständig.² Für den allgemeineren n -dimensionalen Fall ergibt sich der Hilbertraum aus dem Kroneckerprodukt von n Hilberträumen des eindimensionalen Problems. Eine vollständige verallgemeinerte Basis ist durch die simultanen verallgemeinerten Eigenzustände der Ortsoperatoren, also

$$\{|x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \dots |x_n\rangle\}_{(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n} \quad (2.110)$$

gegeben. Da jeder Hilbertraumvektor nach diesen verallgemeinerten Eigenzuständen im Sinne der Spektraldarstellung entwickelt werden kann, was man sofort aus dem eindimensionalen Fall unter Ausnutzung der Regeln des Kroneckerprodukts nachweist, sind also die n Ortsoperatoren ein vollständiger Satz verträglicher Observabler.

Es ist klar, daß die Wahl dieses vollständigen Satzes von Observablen für den Gehalt der Quantenmechanik irrelevant ist, bedeutet doch der Übergang von einem zu einem anderen vollständigen Satz kompatibler Observabler nur eine Basistransformation. Man nennt die Wahl des vollständigen Satzes, die durch die physikalische Fragestellung oder mathematische Bequemlichkeit motiviert sein kann, die Wahl der *Darstellung* der Quantenmechanik.

Es sei in diesem Zusammenhang auch noch einmal der Unterschied zwischen *Bild* und *Darstellung* erwähnt:

²Wir bemerken, daß das aber nicht gilt, wenn das eindimensionale System noch intrinsische Eigenschaften besitzt, die durch weitere Operatoren, die mit dem Ortsoperator vertauschen, beschrieben werden.

Die Festlegung des Bildes bedeutet die mit dem Postulat 4 der Quantenmechanik konsistente Wahl der mathematischen Zeitabhängigkeit der Fundamentaloperatoren (und damit auch der Zustände).

Eine Darstellung ist die Entwicklung der Zustandskets nach einem Eigensystem eines vollständigen Satzes kompatibler Operatoren. Dabei ist die gesamte Quantentheorie des Systems aus einer beliebigen Darstellung rekonstruierbar, und diese Darstellung ist unabhängig vom gewählten Bild der Zeitentwicklung. Je nachdem, ob ein vollständiger Satz von Observablen ein diskretes oder kontinuierliches Spektrum besitzt, handelt es sich um die Realisierung als L^2 oder ℓ_2 . Besitzen die Operatoren gemischte Spektren, ist eine Kombination aus beidem möglich.

Es ist klar, daß die obige Herleitung der zeitabhängigen Schrödingergleichung auch für die mit den simultanen (verallgemeinerten) Eigenvektoren eines vollständigen Satzes kommutierender Operatoren gebildeten Skalarprodukte gilt. In diesem Fall läßt sich die gesamte Observablenalgebra durch i.a. matrixwertige Differential- oder Produktoperatoren in einem dichten Teilraum des L^2 realisieren, so wie wir es oben bei der Konstruktion des Hilbertraums eines kanonisch quantisierten klassischen Systems bereits gezeigt haben. Auf diese Weise läßt sich demzufolge insbesondere der Hamiltonoperator des Systems und damit die Dynamik des Systems in Form von Feldgleichungen, in diesem Zusammenhang auch „Wellengleichungen“ genannt, beschreiben.

Wir wollen aber nochmals betonen, daß dies nicht, wie ursprünglich von de Broglie und Schrödinger intendiert, bedeutet, daß die durch die Quantentheorie beschriebenen Teilchen selbst Wellencharakter besitzen. Vielmehr zeigt unsere axiomatische Darstellung der Quantentheorie, daß die Schrödingersche „Wellenfunktion“ nicht im Sinne eines klassischen Feldes interpretiert werden kann. Es handelt sich vielmehr um die Komponenten des Zustandsvektors im Hilbertraum bzgl. einer simultanen Spektralbasis eines vollständigen Satzes kompatibler Operatoren. Die durch die Quantentheorie vorhergesagten physikalischen Aussagen sind in Form von Erwartungswerten von Teilchenobservablen, Übergangswahrscheinlichkeiten, Streuquerschnitten usw. gegeben. Diese physikalischen Aussagen lassen sich aus der dem System durch eine vollständige Präparation zugeordneten Wellenfunktion und den in der gewählten Basis der Darstellung gegebenen den Observablen zugeordneten Operatoren berechnen. Insbesondere ist die zeitliche Entwicklung der dem System aufgrund der Präparation zukommenden objektiven Eigenschaften vollständig durch eine Wellenfunktion bestimmt.

2.5.5 Das Ehrenfestsche Theorem

Wir wenden uns nun wieder der darstellungsfreien Realisierung der quantenmechanischen Dynamik zu. Es bleibt nämlich noch zu zeigen, daß die Zeitentwicklung der beobachtbaren Größen bildunabhängig ist.

Beweisen wir zunächst das *Ehrenfestsche Theorem*. Sei dazu \mathbf{A} eine beliebige (i.a. explizit zeitabhängige) Observable und $|\psi, t\rangle$ der Zustand des Systems. Dann findet man für den Erwartungswert durch Zeitableitung und Einführung der Operatoren \mathbf{X} und \mathbf{Y} unter Berücksichtigung von (2.94)

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{A} \rangle = \langle \dot{\mathbf{A}} \rangle, \quad (2.111)$$

d.h. die zeitliche Änderung des Erwartungswertes ist durch den Erwartungswert der physikalischen Zeitableitung gegeben und folglich bildunabhängig, wie es sein muß: Die zeitliche Entwicklung meßbarer Größen hängt nicht von der Wahl des Bildes ab.

2.5.6 Bildtransformationen

Wir haben oben im Zusammenhang mit (2.71) gesehen, daß die Wahl des Bildes weitgehend willkürlich ist. Wichtig ist nur der Zusammenhang zwischen dem die Zeitentwicklung der Operatoren bestimmenden unitären Operator $\mathbf{A}(t, t_0)$ mit dem entsprechenden Zeitentwicklungsoperator der Zustände $\mathbf{C}(t, t_0)$, der am einfachsten durch die entsprechenden infinitesimalen Erzeugenden dieser Zeitentwicklungsoperatoren $\mathbf{X}(t)$ und $\mathbf{Y}(t)$ mittels der Bedingung $\mathbf{X} + \mathbf{Y} = \mathbf{H}$ (2.100) auszudrücken ist.

Seien nun $\mathbf{A}^{(j)}$ und $\mathbf{C}^{(j)}$ ($j = 1, 2$) zwei Bilder definiert. Wir haben zu zeigen, wie zwischen diesen beiden Bildern transformiert werden kann und daß die physikalischen Aussagen bildunabhängig sind. Wir nehmen an, daß die Operatoren beider Bilder zu einer Zeit $t = t_1$ übereinstimmen.

Dies läßt sich stets durch eine zeitunabhängige unitäre oder antiunitäre Transformation erreichen, weil in beiden Bildern die Strahlprodukte entsprechender Zustände zu diesem Zeitpunkt übereinstimmen müssen, damit den Zuständen eine objektive Bedeutung zukommt. Daß aufgrund dieser Forderung die besagte unitäre bzw. antiunitäre Transformation der gewünschten Art existiert, werden wir im nächsten Kapitel beweisen (*Wignersches Theorem*).

Das bedeutet, daß für $t = t_1$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(1)}(t_1) &= \mathbf{x}^{(2)}(t_2), \quad \mathbf{p}^{(1)}(t_1) = \mathbf{p}^{(2)}(t_1) \\ \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} : \left[|\psi^{(1)}, t_1\rangle \right] &= \left[|\psi^{(2)}, t_1\rangle \right]. \end{aligned} \quad (2.112)$$

Wir wählen ohne Beschränkung der Allgemeinheit die Repräsentanten in beiden Bildern so, daß

$$|\psi^{(1)}, t_1\rangle = |\psi^{(2)}, t_1\rangle \quad (2.113)$$

gilt. Nach (2.71) ist dann

$$\mathbf{x}^{(j)}(t) = \mathbf{A}^{(j)}(t, t_1)\mathbf{x}^{(j)}(t_1)\mathbf{A}^{(j)\dagger}(t, t_1), \quad \mathbf{p}^{(j)}(t) = \mathbf{A}^{(j)}(t, t_1)\mathbf{p}^{(j)}(t_1)\mathbf{A}^{(j)\dagger}(t, t_1). \quad (2.114)$$

Im folgenden lassen wir zur Abkürzung die Argumente in den Entwicklungsoperatoren weg. Es sind diese nämlich stets (t, t_1) . Nun gilt z.B. für die Ortsoperatoren

$$\mathbf{x}^{(2)}(t) = \mathbf{A}^{(2)}\mathbf{x}^{(2)}(t_1)\mathbf{A}^{(2)\dagger} = \mathbf{A}^{(2)}\mathbf{A}^{(1)\dagger}\mathbf{x}^{(1)}(t)[\mathbf{A}^{(2)}\mathbf{A}^{(1)\dagger}]^\dagger, \quad (2.115)$$

wobei wir (2.112) angewendet haben, d.h. die Bildtransformation ist zu jedem Zeitpunkt eine unitäre Transformation und für die Operatoren durch

$$\mathbf{B}^{(21)} = \mathbf{A}^{(2)}\mathbf{A}^{(1)\dagger} \quad (2.116)$$

gegeben. Wir müssen zeigen, daß sich die Zustände durch dieselbe unitäre Transformation ineinander umrechnen lassen. Es gilt aber

$$|\psi^{(2)}, t\rangle = \mathbf{C}^{(2)}|\psi_2, t_1\rangle = \mathbf{C}^{(2)}\mathbf{C}^{(1)\dagger}|\psi^{(1)}, t\rangle. \quad (2.117)$$

Die Zustände werden also tatsächlich durch unitäre Operatoren ineinander transformiert. Wir müssen nun noch zeigen, daß

$$\mathbf{B}^{(21)'} = \mathbf{C}^{(2)}\mathbf{C}^{(1)\dagger} = \mathbf{B}^{(21)} \quad (2.118)$$

ist. Dazu bringen wir in der vorigen Gleichung die zu jeweils einem Bild gehörigen Zeitentwicklungsoperatoren auf eine Seite, wobei wir von der Unitarität dieser Operatoren Gebrauch machen:

$$\mathbf{A}^{(1)\dagger}\mathbf{C}^{(1)} = \mathbf{A}^{(2)\dagger}\mathbf{C}^{(2)}, \quad (2.119)$$

und das bedeutet (2.108) zufolge, daß der Propagator \mathbf{U} bildunabhängig sein muß. Dies beweist man aber dadurch, daß die Bewegungsgleichung für diesen Operator und die Anfangsbedingungen bildunabhängig sind.

In einem beliebigen Bild gilt aufgrund von (2.75) und (2.102):

$$\frac{\partial\mathbf{U}}{\partial t} = \frac{\partial\mathbf{A}^\dagger}{\partial t} + \mathbf{A}^\dagger \frac{\partial\mathbf{C}}{\partial t} = -i\mathbf{A}^\dagger\mathbf{H}\mathbf{C}. \quad (2.120)$$

Schieben wir auf der linken Seite zwischen \mathbf{H} und \mathbf{C} den Einsoperator in der Form $\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger$ ein, finden wir aufgrund der Definition des Operators \mathbf{A} (2.72):

$$\frac{\partial\mathbf{U}(t, t_0)}{\partial t} = -i\mathbf{H}[\mathbf{x}(t_0), \mathbf{p}(t_0), t]\mathbf{U}(t, t_0). \quad (2.121)$$

Jetzt können wir nach dem im nächsten Kapitel zu beweisenden Theorem von Wigner durch eine unitäre oder antiunitäre Transformation der Operatoren und Zustände erreichen, daß die beiden Bilder zum Anfangszeitpunkt t_0 übereinstimmen. Da dann nach (2.121) die Bewegungsgleichung für \mathbf{U} nicht nur für einen Zeitpunkt, sondern sogar für alle Zeitpunkte in beiden Bildern übereinstimmt, muß \mathbf{U} selbst in beiden Bildern derselbe Operator sein, wenn die Anfangsbedingung für \mathbf{U} in beiden Bildern gleich ist. Das ist aber sicher der Fall, da wir $\mathbf{U}(t_0, t_0) = \mathbf{1}$ verlangen. Damit ist \mathbf{U} bildunabhängig und (2.118) bewiesen, d.h. der Wechsel des Bildes ist tatsächlich durch eine unitäre Transformation der Operatoren und Hilbertraumvektoren gegeben. Es handelt sich also lediglich um den Übergang von einer Darstellung der Heisenbergalgebra zu einer unitär äquivalenten, wobei der unitäre Transformationsoperator gem. (2.116) und (2.118) durch

$$\mathbf{B}^{(21)} = \mathbf{A}^{(2)}\mathbf{A}^{(1)\dagger} = \mathbf{C}^{(2)}\mathbf{C}^{(1)\dagger} \quad (2.122)$$

gegeben und i.a. zeitabhängig ist. Da sich sowohl \mathbf{A} als auch \mathbf{C} aufgrund ihrer Differentialgleichungen sicher stetig in t verhalten, muß dieser Bildtransformationsoperator nach dem Zusatz zum Wignertheorem im nächsten Kapitel unitär sein, weil er zu dem Zeitpunkt t_1 , an dem beide Bilder übereinstimmen, der Einsoperator und folglich unitär ist.

2.5.7 Das Schrödingerbild

Zum Abschluß unserer Betrachtungen zur Zeitentwicklung in der Quantenmechanik betrachten wir noch die drei in der Literatur gebräuchlichen Bilder. Wir beginnen mit dem Schrödingerbild. Es ist durch die Wahl von $\mathbf{X}^{(S)} = 0$ definiert, d.h. die Fundamentaloperatoren sind zeitunabhängig. In diesem Bild ist ein Operator also genau dann zeitabhängig, wenn er explizit zeitabhängig ist. Es gilt also im Schrödingerbild:

$$\mathbf{X}^{(S)} = 0, \quad \mathbf{Y}^{(S)} = \mathbf{H}^{(S)}, \quad \mathbf{A}^{(S)} = \mathbf{1}, \quad \mathbf{C}^{(S)} = \mathbf{U}. \quad (2.123)$$

2.5.8 Das Heisenbergbild

Das Heisenbergbild stellt in gewisser Weise das dem Schrödingerbild konträr entgegengesetzte Bild dar, weil in ihm die Zustände zeitunabhängig sind und die Fundamentaloperatoren die volle Zeitabhängigkeit besitzen:

$$\mathbf{X}^{(H)} = \mathbf{H}^{(H)}, \mathbf{Y}^{(H)} = 0, \mathbf{C}^{(H)} = \mathbf{1} \Rightarrow \mathbf{U} = \mathbf{A}^{(H)\dagger}. \quad (2.124)$$

2.5.9 Das Wechselwirkungsbild

Das Wechselwirkungsbild spielt insbesondere in der Störungstheorie, die für die Quantenmechanik von Dirac, für die Quantenfeldtheorie von Schwinger, Tomonaga und Dyson entwickelt wurde, eine wichtige Rolle.

Dieses Bild fällt im wesentlichen mit der allgemeinen Definition des Bildes durch selbstadjungierte Operatoren \mathbf{X} und \mathbf{Y} zusammen. In der sog. *zeitabhängigen Störungsrechnung* wird der Hamiltonoperator additiv aufgespalten in einen Teil \mathbf{H}_0 , dessen Eigenwertproblem exakt lösbar ist, und einen anderen Teil \mathbf{H}_1 , die sog. „Störung“. Dann wird $\mathbf{X}^{(I)} = \mathbf{H}_0$ und $\mathbf{Y}^{(I)} = \mathbf{H}_1$ gesetzt. Das bedeutet, daß die Bewegungsgleichungen für die Operatoren exakt gelöst werden können. Für die Zeitentwicklung der Zustände benutzt man die aus der obigen Integration der Operator-Anfangswertaufgabe resultierende Reihenentwicklung nach zeitgeordneten Produkten, vgl. (2.91) und (2.84).

Der Name „Wechselwirkungsbild“ rührt daher, daß bei solchen Aufgaben der Diracschen Störungsrechnung \mathbf{H}_0 den Anteil des Hamiltonoperators erfaßt, der die Bewegung jedes einzelnen Teilchens in einem äußeren Feld beschreibt (z.B. die Bewegung der Elektronen im Feld eines schweren Kerns oder auch nur freie Teilchen). Solche Probleme sind in einigen Fällen (wenn das äußere Feld besonders einfach ist) geschlossen lösbar. \mathbf{H}_1 beschreibt dann die Wechselwirkung der Teilchen untereinander (z.B. die elektromagnetische Wechselwirkung der Elektronen). Wir kommen auf dieses Verfahren der Störungsrechnung in einem späteren Kapitel zurück.

Es erübrigt sich, für die drei Bilder die jeweiligen Transformationsoperatoren anzugeben, weil diese sofort aus der allgemeingültigen Beziehung (2.122) abgelesen werden können.

Kapitel 3

Symmetrietransformationen

3.1 Das Wignersche Theorem

Dieses Kapitel ist der Behandlung von Symmetrien in der Quantenmechanik gewidmet. Es ist insofern zentral als in der hier vertretenen Auffassung der Physik die Symmetrieprinzipien als übergeordnetes Konzept eine entscheidende Rolle spielen. So haben wir im ersten Kapitel gesehen, daß allein durch Zugrundelegen der Galileigruppe als Symmetriegruppe der Newtonschen Raumzeit die Struktur der Hamiltonfunktion bestimmt ist. Dabei war es entscheidend, den Begriff der Symmetriegruppe hinreichend weit zu fassen, nämlich angepaßt an die Hamiltonformulierung, als Darstellung vermöge kanonischer Transformationen, die die Hamiltonfunktion invariant lassen. Dabei ergaben sich die kanonischen Transformationen als geeignetes Ausdrucksmittel der Symmetrietransformationen aus der Forderung der Kovarianz des Hamiltonformalismusses.

In Analogie dazu müssen wir nun zunächst die Transformationen bestimmen, die die Forderung der Kovarianz des quantentheoretischen Formalismusses erfüllen. Wir sprechen der Kürze halber von einem quantenmechanischen Isomorphismus. Aus den Betrachtungen des zweiten Kapitels, in dem die allgemeine Struktur der Quantentheorie dargestellt wurde, folgt, daß ein quantentheoretischer Isomorphismus einfach ein Isomorphismus des zum separablen Hilbertraum gehörigen projektiven Raum ist, d.h.

Ein quantenmechanischer Isomorphismus ist eine invertierbare Abbildung des projektiven Raums in sich: $S : [\mathcal{H}] \rightarrow [\mathcal{H}]$, für die folgendes gilt:

Sei $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ beliebig. Dann wählen wir $|\psi'\rangle$ so, daß durch $S([\psi]) = [|\psi'\rangle]$. Dann gilt stets

$$\forall [|\psi_1\rangle], [|\psi_2\rangle] \in [\mathcal{H}] : |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle| = |\langle \psi'_1 | \psi'_2 \rangle|. \quad (3.1)$$

Es ist klar, daß ein Isomorphismus des Strahlraums sich gerade dadurch auszeichnet, daß sich die Übergangswahrscheinlichkeiten unter dem Isomorphismus nicht ändern. Umgekehrt hängen die Übergangswahrscheinlichkeiten nicht von der Normierung der Repräsentanten ab, so daß diese o.B.d.A. zu 1 angenommen werden kann, d.h. die obige Forderung ist notwendig und hinreichend für einen quantenmechanischen Isomorphismus.

Die dynamische Beschreibung quantenmechanischer Systeme ist aber im Hilbertraum selbst und nicht im projektiven Raum formuliert, d.h. wir müssen untersuchen, welche allgemeine Form ein quantenmechanischer Isomorphismus im Hilbertraum besitzt. Es ist klar, daß ein Hilbertraumautomorphismus, also eine unitäre Abbildung in kanonischer Weise einen quantenmechanischen

Isomorphismus induziert. Im folgenden zeigen wir, daß es umgekehrt möglich ist, durch geeignete Wahl von Repräsentanten, den quantenmechanischen Isomorphismus zu einer unitären oder antiunitären Abbildung des Hilbertraums in sich zu liften:

Satz 6 (Wignersches Theorem). *Durch geeignete Wahl der Phasen von $|\psi\rangle$ und $|\psi'\rangle$ läßt sich die Abbildung S zu einer Abbildung $U_S : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ des Hilbertraums in sich liften. Dabei ist entweder*

$$\begin{aligned} \forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}; \mu, \lambda \in \mathbb{C} : (\mu|\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle)' &= \mu|\alpha'\rangle + \lambda|\beta'\rangle, \\ \forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H} : \langle\alpha|\beta\rangle &= \langle\alpha'|\beta'\rangle \quad (\text{I}) \end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned} \forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}; \mu, \lambda \in \mathbb{C} : (\mu|\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle)' &= \mu^*|\alpha'\rangle + \lambda^*|\beta'\rangle, \\ \forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H} : \langle\alpha|\beta\rangle &= \langle\beta'|\alpha'\rangle \quad (\text{II}) \end{aligned}$$

Im Fall (I) ist die Abbildung U_S unitär, im zweiten Falle antiunitär. Dabei ist ein antiunitärer Operator durch die in (II) angegebenen Eigenschaften definiert.

Wir beweisen nun das Theorem. Dazu sei die durch die Abbildung S induzierte Abbildung in \mathcal{H} zunächst durch die Minimalforderung $S(|\psi\rangle) = |\psi'\rangle$, aber ansonsten beliebig erklärt.

Sei $\{|\alpha_n\rangle\}_{n \in \mathbb{N}}$ ein VONS (Abkürzung für vollständiges Orthonormalsystem) von \mathcal{H} . Wir zeigen jetzt, daß man die von S geliftete Abbildung durch geeignete Phasenwahl der $|\alpha'_n\rangle$ so festlegen kann, daß auch diese Vektoren ein VONS bilden. Zunächst zeigen wir die Vollständigkeit. Sei $|\psi'\rangle$ ein zu allen Vektoren $|\alpha'_n\rangle$ orthogonaler Vektor. Wegen der Umkehrbarkeit von S existiert dazu ein Vektor $|\psi\rangle$, so daß $S(|\psi\rangle) = |\psi'\rangle$. Wegen (3.1) ist $|\psi\rangle$ orthogonal zu allen $|\alpha_n\rangle$. Da diese Vektoren ein VONS bilden, ist $|\psi\rangle = 0$ und folglich auch $|\psi'\rangle$.

Wegen (3.1) ist weiter $\langle\alpha'_n|\alpha'_m\rangle = \exp(i\tau_{mn})\delta_{mn}$. Wir können nun die relativen Phasen der $|\alpha'_n\rangle$ willkürlich so wählen, daß alle τ_{mn} verschwinden. Wir gehen davon aus, daß dies der Fall ist.

Als nächstes betrachten wir die Vektoren $|\phi_n\rangle := |\alpha_1\rangle + |\alpha_n\rangle$ und die ihnen zugeordneten Vektoren $|\phi'_n\rangle$. Aus (3.1) folgt sofort, daß

$$\langle\alpha'_m|\phi'_n\rangle = \exp(i\tau_m)(\delta_{m1} + \delta_{mn}) \quad (3.2)$$

ist. Da wir weiter die Phasen der $|\alpha'_n\rangle$ so gewählt haben, daß sie ein VONS bilden, gilt damit sofort:

$$|\phi'_n\rangle = \sum_m |\alpha'_m\rangle \langle\alpha'_m|\phi'_n\rangle = \exp(i\tau_1)|\alpha'_1\rangle + \exp(i\tau_n)|\alpha'_n\rangle. \quad (3.3)$$

Durch Umdefinition der Phasen der $|\alpha'_n\rangle$ können wir erreichen, daß

$$|\phi'_n\rangle = |\alpha'_1\rangle + |\alpha'_n\rangle \quad (3.4)$$

ist. Die $|\alpha'_n\rangle$ bilden weiterhin ein VONS, denn die Vollständigkeit und lineare Unabhängigkeit dieser Vektoren durch Multiplikation derselben mit beliebigen Phasenfaktoren wird nicht zerstört. Es gilt nämlich auch nach Umdefinition der Phasenfaktoren

$$\sum_n |\alpha'_n\rangle \langle\alpha'_n| = 1. \quad (3.5)$$

Wendet man diese Vollständigkeitsrelation auf $|\alpha'_m\rangle$ an, folgt aus der linearen Unabhängigkeit der $|\alpha'_n\rangle$ sofort, daß $\langle\alpha'_n|\alpha'_m\rangle = \delta_{nm}$, also daß die $|\alpha'_n\rangle$ weiterhin ein VONS bilden.

Wir zeigen nun, daß wir jetzt bereits die gewünschten Phasenbeziehungen festgelegt haben. Sei dazu $|\psi\rangle$ ein beliebiger Vektor und $c_n = \langle\alpha_n|\psi\rangle$. Weiter sei o.B.d.A. $c_1 \neq 0$. Für die entsprechenden transformierten Vektoren ist wegen (3.5):

$$|\psi'\rangle = \sum_n c'_n |\alpha'_n\rangle \quad \text{mit} \quad c'_n = \langle\alpha'_n|\psi'\rangle \quad (3.6)$$

Wegen (3.1) und (3.4) gilt:

$$|c_n| = |c'_n|; \quad |c_1 + c_n| = |c'_1 + c'_n| \quad (3.7)$$

Da wir die Phase von $|\psi'\rangle$ beliebig wählen dürfen, können wir verlangen, daß

$$c_1 = c'_1 \quad (3.8)$$

ist. Dann folgt aus (3.7) durch Quadrieren:

$$c_1^* c_n + c_1 c_n^* = c_1^* c'_n + c_1 c_n'^* \quad (3.9)$$

Multiplikation dieser Gleichung mit c'_n und Lösung der entstehenden quadratischen Gleichung für c'_n ergibt unter Berücksichtigung von (3.7) die beiden Möglichkeiten:

$$c'_n = \begin{cases} c_n & \text{(I)} \\ \frac{c_1}{c_1^*} c_n^* & \text{(II)} \end{cases} \quad (3.10)$$

Wir können nun noch die Phase von $|\psi\rangle$ beliebig wählen, weil auch dies für die durch S induzierte Zuordnung von Vektoren in \mathcal{H} ohne Belang ist. Wir wählen daher diese Phase so, daß c_1 reell ist. Dann haben wir

$$c'_n = \begin{cases} c_n & \text{im Fall (I)} \\ c_n^* & \text{im Fall (II)} \end{cases}, \quad (3.11)$$

d.h. wir können bei einem gegebenen Paar von Strahlen $[|\psi\rangle]$ und $[|\psi'\rangle] = S([|\psi\rangle])$ die Phasen der Repräsentanten so wählen, daß die oben behaupteten Beziehungen (I) oder (II) auf die Entwicklung bzgl. der Orthonormalbasen $|\alpha_n\rangle$ und $|\alpha'_n\rangle$ zutreffen.

Es ist klar, daß, wenn zwei Vektoren $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ beide zugleich dieselbe der Eigenschaften (3.11 I) oder (3.11 II) erfüllen, auch die Behauptungen (I) und (II) für diese beiden Vektoren erfüllt sind.

Wir müssen also nur noch zeigen, daß in dem Fall, daß (3.11 I oder II) für einen Vektor $|\psi\rangle$ erfüllt ist, dieselbe Beziehung auch für jeden anderen Vektor $|\phi\rangle$ erfüllt sein muß.

Nehmen wir nun an, diese Annahme sei nicht erfüllt. Sei also etwa $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\alpha_n\rangle$ ein Vektor, der (3.11 I) und $|\phi\rangle = \sum_n d_n |\alpha_n\rangle$ einer, der (3.11 II) erfüllt, wobei wir annehmen, daß keiner der beiden Vektoren rein reelle Koeffizienten besitzt. Dann wäre ja auch die Gegenannahme gar nicht erfüllbar, weil ein Vektor mit rein reellen Koeffizienten stets beide Beziehungen (3.11) erfüllt. Es ist also $c'_n = c_n$ und $d'_n = d_n^*$. Dann folgt aber, weil die $|\alpha'_n\rangle$ ein VONS bilden:

$$|\langle\psi'|\phi'\rangle| = \left| \sum_n c_n^* d_n^* \right| \neq |\langle\psi|\phi\rangle| \quad (3.12)$$

Die Gleichheit des Betrages des Skalarproduktes auf der linken mit dem auf der rechten Seite dieser Ungleichung war aber per definitionem vorausgesetzt, d.h. wenn ein Vektor in \mathcal{H} (3.11

I bzw. II) erfüllt, trifft dies auch auf jeden anderen Vektor in \mathcal{H} zu. Damit haben wir das Theorem von E. P. Wigner vollständig bewiesen.

Bemerkung:

Jetzt betrachten wir noch einen beliebigen quantenmechanischen Isomorphismus, der stetig von einem reellen Parameter $t \in [0, 1]$ abhängt und bei $t = 0$ die Identität ist. Für jedes $t \in [0, 1]$ läßt sich der quantenmechanische Isomorphismus nach dem Wignertheorem zu einer Abbildung $\mathbf{U}(t)$ des Hilbertraums \mathcal{H} in sich liften, und diese ist entweder unitär oder antiunitär und hängt stetig von t ab.

Sei nun $|\psi\rangle$ ein beliebiger Vektor, $c \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ und durch

$$\mathbf{U}(t)c|\psi\rangle = c(t)\mathbf{U}(t)|\psi\rangle \tag{3.13}$$

eine Abbildung $c : [0, 1] \rightarrow \mathbb{C}$ definiert. Diese ist wegen der Stetigkeit von \mathbf{U} stetig.

Wegen des Wigner-Theorems ist für alle $t \in [0, 1]$ entweder $c(t) = c$ oder $c(t) = c^*$. Da nach Voraussetzung c nicht reell sein soll, muß wegen der Stetigkeit die Funktion $c(t)$ konstant sein. Da $c(0) = c$ wegen $\mathbf{U}(0) = \mathbf{1}$ ist, ist also $\mathbf{U}(t)$ stets unitär.

3.2 Lie-Gruppen und ihre Darstellungen

Bis jetzt haben wir, abgesehen von der Bemerkung zu stetig mit der Identität zusammenhängenden quantenmechanischen Isomorphismen, nur einzelne Transformationen der quantentheoretischen Objekte betrachtet, die die physikalischen Aussagen der Theorie invariant lassen. Mathematisch gesehen erwiesen sie sich als beliebige Automorphismen des Strahlraums $[\mathcal{H}]$ und ließen sich aufgrund des Wignerschen Theorems zu unitären bzw. antiunitären Abbildungen des Hilbertraums in sich liften.

In diesem Abschnitt wollen wir Liegruppen betrachten. Wir erinnern daran, daß eine Liegruppe eine topologische Gruppe ist, deren Topologie durch eine differenzierbare Mannigfaltigkeit gegeben ist. Der Tangentialraum bei der Identität bildet in natürlicher Weise eine Liealgebra. In der Physik bezeichnet man eine beliebige Basis dieser Liealgebra auch als einen vollständigen Satz erzeugender Generatoren der Liegruppe. Dieser Sprachgebrauch ist bequem und soll hier übernommen werden. Es muß aber darauf hingewiesen werden, daß die Liealgebra i.a. nicht eindeutig einer Liegruppe zugeordnet ist. So ist z.B. $\mathcal{L}U(2)$ gleichzeitig die Liealgebra zu den Gruppen $U(2)$ und zu $SU(2) \times U(2)$, und diese Gruppen sind nicht isomorph.

Weiter sei bemerkt, daß es zu jeder Liegruppe stets eine eindeutig bestimmte einfach zusammenhängende Überlagerungsgruppe, die universelle Überlagerungsgruppe gibt. So ist z.B. die $SU(2)$ die universelle Überlagerungsgruppe der Drehgruppe $SO(3)$. Wir werden unten zeigen, daß es in der Quantenmechanik notwendig ist, statt der klassischen Symmetriegruppen der Physik deren universelle Überlagerungsgruppen zu betrachten und dies ohne Verlust der physikalischen Aussagen möglich ist. Dies hängt damit zusammen, daß die meisten (wenn auch nicht alle!) wesentlichen Aussagen der Physik lokale Aussagen sind, für die es irrelevant ist, ob statt der Gruppe ihre universelle Überlagerung betrachtet wird.

Wir beschäftigen uns also im folgenden mit den in der Quantenmechanik relevanten Darstellungen einfach zusammenhängender Liegruppen. Dazu erinnern wir zunächst noch einmal daran, daß ein topologischer Raum einfach zusammenhängend heißt, wenn man jeden Weg zwischen zwei Punkten P_1 und P_2 dieses Raumes stetig in jeden beliebigen anderen diese beiden Punkte verbindenden Weg deformieren kann. Man bezeichnet zwei solche Wege auch als homotop,

d.h. ein topologischer Raum ist einfach zusammenhängend, wenn alle Wege, die zwei beliebige Punkte des Raumes verbinden, homotop sind.

Zu dieser Definition des einfach zusammenhängenden Raumes äquivalent ist die Aussage, daß jeder geschlossene Weg, also ein Weg, der einen beliebigen Punkt P des Raumes mit sich verbindet, nullhomotop ist, d.h. stetig auf den konstanten Weg $[0, 1] \ni t \mapsto P \in T$ zusammengezogen werden kann.

Wir verstehen im folgenden in Anwendung der obigen Definition auf die Liegruppe, alle Wege sowie die homotopen Abbildungen derselben als hinreichend oft stetig differenzierbar.

Wir betrachten also jetzt eine einfach zusammenhängende Liegruppe G . Zunächst müssen wir untersuchen, wann wir diese Gruppe als Symmetriegruppe im Sinne der Physik quantenmechanischer Systeme betrachten können. Diese Frage ist wieder einfach zu beantworten:

Eine Symmetriegruppe liegt genau dann vor, wenn es eine Darstellung dieser Gruppe auf dem projektiven Raum $[\mathcal{H}]$ gibt, so daß jedem Gruppenelement ein quantenmechanischer Isomorphismus zugeordnet ist. Die Darstellungseigenschaft läßt sich dann wie folgt definieren. Sei $S : G \rightarrow GL[[\mathcal{H}]]$, so daß für $g_1, g_2 \in G$ stets $S(g_1)S(g_2) = S(g_1g_2)$ ist, d.h. es muß sich um einen Gruppenhomomorphismus der Gruppe in $\text{Aut}[[\mathcal{H}]]$ handeln. Im Falle einer Liegruppe ist es natürlich, zu verlangen, daß es sich sogar um einen Gruppenhomomorphismus im Sinne topologischer Gruppen handelt.

Nach dieser Vorbemerkung können wir nun die Frage beantworten, wie Symmetriegruppen quantentheoretisch zu realisieren sind. Das Wignertheorem sagt, daß jeder einzelne quantenmechanische Isomorphismus die Projektion einer unitären oder antiunitären Abbildung des quantenmechanischen Hilbertraums in sich auf einen Automorphismus des projektiven Raums ist. Die im Anschluß an den Beweis gemachte Bemerkung zeigt weiter, daß eine stetig mit der Identität zusammenhängende Transformation stets die Projektion einer unitären Abbildung des Hilbertraums in sich darstellt.

Daraus folgt schon, daß jede Gruppentransformation im quantenmechanischen Hilbertraum durch eine unitäre Abbildung repräsentiert wird, weil G als einfach zusammenhängend vorausgesetzt ist und folglich jedes Gruppenelement durch einen stetigen Weg mit der Gruppenidentität verbunden werden kann. Dies bedeutet nun aber nicht, daß es sich auch um einen Gruppenhomomorphismus von G in $\mathcal{U}(\mathcal{H})$, also eine unitäre Darstellung, handeln muß.

Sei nun $\mathbf{U} : G \rightarrow \mathcal{U}$, die Abbildung, die jedem Gruppenelement eine unitäre Abbildung im Hilbertraum zuordnet, so daß die Projektion jeder dieser unitären Abbildungen in einen Automorphismus des projektiven Raums, dieses Gruppenelement repräsentiert. Es ist klar, daß bei einer beliebigen solchen Abbildung jede unitäre Matrix mit einem beliebigen Phasenfaktor multipliziert werden kann, ohne daß sich an dieser Eigenschaft etwas ändert. Es ist aber weiter sofort einleuchtend, daß die Projektion eine Darstellung der Gruppe auf dem Strahlraum ist, d.h. daß gelten muß

$$\forall g_1, g_2 \in G \forall [|\psi\rangle] \in [\mathcal{H}] : [\mathbf{U}(g_2g_1)|\psi\rangle] = [\mathbf{U}(g_2)\mathbf{U}(g_1)|\psi\rangle]. \quad (3.14)$$

Man bezeichnet solche Darstellungen der Gruppe G auf dem projektiven Raum als projektive Darstellungen. Im folgenden wollen wir untersuchen, unter welchen Umständen solche Strahldarstellungen durch geeignete Festlegung der Phasenfaktoren zu unitären Darstellungen geliftet werden können. Wir haben dazu mit dem Wignertheorem schon einen großen Schritt getan, nämlich daß wir schon wissen (und die Strahldarstellungen auch schon im Hinblick auf dieses Wissen soeben formuliert haben!), daß jeder ein Gruppenelement auf $[\mathcal{H}]$ darstellende Automorphismus

die Projektion einer unitären Abbildung in \mathcal{H} ist.

Wir bemerken auch schnell, daß (3.14) äquivalent zu der Aussage

$$\exists \Phi : G \times G \rightarrow \mathbb{R} \forall g_1, g_2 \in G : \mathbf{U}(g_1) : \mathbf{U}(g_2 g_1) = \exp[i\Phi(g_2, g_1)] \mathbf{U}(g_2) \mathbf{U}(g_1) \quad (3.15)$$

ist. Aufgrund des Assoziativgesetzes der Gruppenmultiplikation folgt, daß

$$\forall g_1, g_2, g_3 \in G : \Phi(g_3, g_2 g_1) + \Phi(g_2, g_1) = \Phi(g_3 g_2, g_1) + \Phi(g_3, g_2) \quad (3.16)$$

sein muß. Wir können weiter durch einfache Wahl der Phasen der Operatoren $\mathbf{U}(g)$ erreichen, daß

$$\forall g_1, g_2 \in G : \Phi(1_G, g_2) = \Phi(g_1, 1_G) = 0 \quad (3.17)$$

ist.

Jetzt können wir von der betrachteten Strahldarstellung der Gruppe zu einer Strahldarstellung ihrer Liealgebra übergehen, indem wir den Tangentialraum der projektiven Gruppendarstellung bei der Identität betrachten. Dazu sei durch θ^a , $a = 1, \dots, n$ eine Karte in der Umgebung der Identität (n bezeichnet die Dimension der Liegruppe) gegeben. Es entspreche dabei, wie in der Gruppentheorie üblich, $\theta^a = 0$ der Identität. Wegen der Definition der Phasen gemäß (3.17) ist klar, daß die Entwicklung der Phasenfaktoren um $\theta^a = 0$ durch

$$\Phi(\theta_1, \theta_2) = f_{ab} \theta_1^a \theta_2^b + \dots \quad (3.18)$$

gegeben ist, wobei die Summationskonvention angewandt und stillschweigend die mit der Gruppe bzw. deren Darstellung zusammenhängenden Funktionen als Funktionen der Koordinaten θ^a angesehen werden.

Weiter definieren wir

$$i\tau_a = \left. \frac{\partial}{\partial \theta^a} \mathbf{U}(\theta) \right|_{\theta=0}, \quad \tau_{ab} = \left. \frac{\partial^2}{\partial \theta^a \partial \theta^b} \mathbf{U}(\theta) \right|_{\theta=0} = \tau_{ab}. \quad (3.19)$$

Dann lautet der Anfang der Taylorentwicklung von \mathbf{U}

$$\mathbf{U}(\theta) = \mathbf{1} + i\tau_a \theta^a + \frac{1}{2} \tau_{ab} \theta^a \theta^b + \dots \quad (3.20)$$

Wegen (3.15) gilt

$$U[g(\theta)]U[g^{-1}(\theta)] = \exp\{-i\Phi[g(\theta), g^{-1}(\theta)]\}, \quad (3.21)$$

und Ableiten dieser Beziehung nach θ ergibt unter Berücksichtigung der Unitarität der \mathbf{U} sowie der Phasenfestlegung (3.17) daß die τ_a und die τ_{ab} selbstadjungiert sind.

Setzt man die Entwicklung (3.18) in die Strahldarstellungseigenschaft (3.15) ein, ergibt ein Koeffizientenvergleich in zweiter Ordnung der θ die Kommutatorrelation

$$[\tau_a, \tau_b] = if_{ab}^c \tau_c + iC_{ab} \mathbf{1}, \quad (3.22)$$

wobei $C_{ab} = f_{ab} - f_{ba}$ die Zentralladungen der Strahlialgebra und die f_{ab}^c die in den beiden unteren Indizes antisymmetrischen Strukturkonstanten derselben sind. Es ist klar, daß im Falle einer Darstellung der Gruppe in \mathcal{H} , d.h. wenn $\Phi = 0$ ist, die Zentralladungen verschwinden, so daß dann die τ_a die Basis einer Liealgebra bilden.

Für drei Operatoren im Hilbertraum gilt die Jacobiidentität

$$[[\tau_a, \tau_c], \tau_c] + [[\tau_b, \tau_c], \tau_a] + [[\tau_c, \tau_a], \tau_b] = 0, \quad (3.23)$$

und Einsetzen von (3.22) ergibt durch Koeffizientenvergleich

$$\begin{aligned} f^d_{ab} f^e_{dc} + f^d_{bc} f^e_{da} + f^d_{ca} f^e_{db} &= 0 \\ f^d_{ab} C_{dc} + f^d_{bc} C_{da} + f^d_{ca} C_{db} &= 0. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Diese Beziehungen nennen wir ebenfalls Jacobiidentitäten. Da die Jacobiidentität für die Strukturkonstanten unabhängig von denen der Zentralladungen gilt, läßt sich die letztere sofort durch

$$C_{ab} = f^c_{ab} \phi_c \quad (3.25)$$

mit $\phi_c \in \mathbb{R}$ beliebig erfüllen. Ist dies für eine gegebene Strahldarstellung der Liegruppe tatsächlich der Fall, läßt sich die Liealgebra durch einfache Umdefinition der Generatoren gemäß

$$\tau'_a = \tau_a + \phi_a \mathbf{1} \quad (3.26)$$

frei von Zentralladungen machen und durch

$$\mathbf{U}(g) = \exp[-i\tau'_a \theta^a] \quad (3.27)$$

wenigstens in einer gewissen Umgebung der Gruppenidentität eine von der vorgegebenen Strahldarstellung nur durch Phasenfaktoren verschiedene Darstellung der Gruppe gewinnen.

Jetzt sind wir gerüstet, das für das folgende entscheidende Theorem zu beweisen:

Satz 7. *Sei G eine einfach zusammenhängende Liegruppe und $[\mathbf{U}] : G \rightarrow [\mathcal{H}]$ eine Strahldarstellung, deren Liealgebra durch die Einführung von zum Einsoperator proportionalen Summanden gemäß (3.27) frei von Zentralladungen gemacht werden kann, so läßt sich diese Strahldarstellung durch einfache Umdefinition der Phasenfaktoren zu einer unitären Darstellung der Liegruppe liften.*

Wir betonen nochmals, daß diese Umdefinition der Phasen nichts an den physikalischen Aussagen der Realisierung der Symmetrie mit Hilfe der gegebenen Strahldarstellung \mathbf{U} ändert, weil diese Phasenfaktoren für die Projektion von \mathbf{U} auf die Darstellung der Gruppe auf dem projektiven Raum irrelevant ist. Das bedeutet, daß in diesem Fall die Suche nach den quantenmechanischen Realisierungen der Gruppe auf die Suche nach unitären Darstellungen derselben auf dem separablen Hilbertraum beschränkt werden darf, ohne daß man evtl. physikalisch relevante Darstellungen übersieht.

Zum Beweis nehmen wir an, die Gruppe werde schon von einer einzigen Karte überdeckt, so daß die $(\theta^a) \in U$ als Parametrisierung der gesamten Gruppe angesehen werden kann. In dem Fall, daß eine einzige Karte die Gruppe nicht überdecken kann, ändern sich an der folgenden Argumentation nur Details. Man muß dann mit einem beliebigen vollständigen Atlas der Liegruppe arbeiten, und das verursacht, abgesehen von einiger Schreiarbeit, keine weiteren Probleme.

Da die Gruppe einfach zusammenhängend ist, gibt es Wege

$$\Theta_\theta^a : [0, 1] \rightarrow U \quad (3.28)$$

mit $\Theta_\theta^a(0) = 0$ und $\Theta_\theta^a(1) = \theta^a$. Diese Wege verbinden die Gruppenidentität mit dem Gruppenelement $g(\theta^a)$. Sei weiter die Funktion $f : U \times U \rightarrow U$ so definiert, daß

$$g(\theta_2)g(\theta_1) = g[f(\theta_1, \theta_2)] \quad (3.29)$$

gilt. Dann definieren wir Wege im Raum der Darstellung vermöge

$$\frac{d}{ds} \mathbf{U}_\theta(s) = -i \mathbf{t}_a \mathbf{U}_{\theta(s)} h^a{}_b [\Theta(s)] \frac{d\Theta_\theta^b}{ds}, \quad (3.30)$$

wobei die Matrizen h durch

$$\left(h^{-1} \right)^a{}_b = \left[\frac{\partial f^a(\theta_2, \theta_1)}{\partial \theta_2^b} \right]_{\theta_2=0} \quad (3.31)$$

definiert sind, und die Gruppeneigenschaften, die f definieren, sicherstellen, daß h stets invertierbar ist.

Jetzt haben wir drei Punkte nachzuweisen:

- Die Definition $\mathbf{U}(\theta) = \mathbf{U}_\theta(1)$ erfüllt die Eigenschaften einer unitären Darstellung der Gruppe G .
- Das Ergebnis ist eindeutig, d.h. unabhängig von der Wahl der Wege Θ_θ im Parameterraum.
- Jede projektive Darstellung mit denselben Generatoren τ^a unterscheidet sich von dieser unitären Darstellung der Gruppe nur durch Phasenfaktoren.

Zum Nachweis der Darstellungseigenschaft bilden wir den Weg im Parameterraum, der der Hintereinanderausführung $g(\theta_1)g(\theta_2)$ in der Gruppe entspricht, also

$$\Theta_P^a(s) = \begin{cases} \Theta_{\theta_1}(2s) & \text{für } 0 \leq s \leq 1/2 \\ f^a[\Theta_{\theta_2}(2s-1), \theta_1] & \text{für } 1/2 \leq s \leq 1 \end{cases} \quad (3.32)$$

Dies ist nämlich der Weg, der von der 0 über θ_1 nach $f(\theta_2, \theta_1)$ läuft, dessen Bild in der Gruppe also die Identität mit $g(\theta_1)g(\theta_2)$ verbindet. Jetzt ist nachzuweisen, daß genau dies auch in der Darstellung der Fall ist, d.h. daß $\mathbf{U}_P(1) = \mathbf{U}_{f(\theta_2, f(\theta_1))}$ ist.

Für das erste Stück des Weges stimmt \mathbf{U}_P mit dem aus der Differentialgleichung (3.30) gebildeten Definition von $\mathbf{U}(\theta_1)$ überein. Wir bestimmen nun \mathbf{U}_P auf dem zweiten Stück durch die entsprechende Differentialgleichung mit dem Weg Θ_P .

Aufgrund der Assoziativität der Gruppenoperation gilt

$$f[f(\theta_3, \theta_2), \theta_1] = f[\theta_3, f(\theta_2, \theta_1)], \quad (3.33)$$

und Ableiten nach θ_3 ergibt für $\theta_3 \rightarrow 0$ zusammen mit der Definition (3.31) sofort

$$\frac{\partial f^c(\theta_2, \theta_1)}{\partial \theta_2^b} h^a{}_c [f(\theta_2, \theta_1)] = h^a{}_b(\theta_2). \quad (3.34)$$

Setzt man dies in die Differentialgleichung für \mathbf{U}_P für das zweite Wegstück ein, folgt, daß \mathbf{U}_P dieselbe Differentialgleichung erfüllt wie $\mathbf{U}_{\theta_2}(2s-1)$. Wegen $\mathbf{U}_P(1/2) = \mathbf{U}_{\theta_1}$ ist aber nicht die Anfangsbedingung erfüllt. Das trifft aber für $\mathbf{U}_P(s)\mathbf{U}_{\theta_1}^{-1}$ zu, so daß wir auf

$$\mathbf{U}_P(s)\mathbf{U}_{\theta_1}^{-1}(1) = \mathbf{U}_{\theta_2}(2s-1) \quad (3.35)$$

schließen können. Wir erhalten so das wichtige Resultat, daß

$$\mathbf{U}_P(1) = \mathbf{U}_{\theta_2}(1)\mathbf{U}_{\theta_1}(1) \quad (3.36)$$

ist. So war ja auch der Weg (3.32) konstruiert!

Um nun die Darstellungseigenschaften zu beweisen, müssen wir zeigen, daß $\mathbf{U}_\theta(1)$ unabhängig von den gewählten Standardwegen im Parameterraum ist, denn dann folgt aufgrund der Konstruktion des Weges Θ_P , daß $\mathbf{U}_P(1) = \mathbf{U}_{f(\theta_2, \theta_1)}$ ist. Wegen (3.36) ist dann die Darstellungseigenschaft erfüllt und zusammen mit dem zweiten auch der erste Schritt des obigen Arbeitsprogramms erledigt.

Für den Nachweis der Wegunabhängigkeit von $\mathbf{U}_\theta(1)$ bilden wir eine Variation $\delta\Theta^a$ der Standardwege. Da diese Wege stets bei $\theta = 0$ beginnen und festgelegte Endpunkte haben, ist dabei stets die Nebenbedingung fester Randwerte, also $\delta\Theta^a(0) = \delta\Theta^a(1) = 0$ zu berücksichtigen. Die Variation von (3.30) ergibt

$$\frac{d}{ds}\delta\mathbf{U}_\theta = -i\mathbf{t}_a \left[\delta\mathbf{U}_\theta h^a{}_b[\Theta_\theta] + \mathbf{U}_\theta \partial_c h^a{}_b(\Theta_\theta) \delta\Theta^c \frac{d\Theta^b}{ds} + \mathbf{U}_\theta h^a{}_b(\Theta_\theta) \frac{d}{ds}\delta\Theta^b \right]. \quad (3.37)$$

Eine längere aber einfache Rechnung, die von den Kommutatorrelationen der Gruppe (3.22) *ohne* Zentralladungen Gebrauch macht (wir hatten ja gerade die Forderung gestellt, daß durch simples Verschieben der τ_a um zum Einsoperator proportionale Operatoren alle Zentralladungen zum Verschwinden gebracht werden können!), ergibt die Beziehung

$$\frac{d}{ds} \left[i\mathbf{U}^\dagger \tau_a h^a{}_b \delta\Theta^b - \mathbf{U}^\dagger \delta\mathbf{U} \right] = i\mathbf{U}^\dagger \tau_a \mathbf{U} \frac{d\Theta^c}{ds} \delta\Theta^b [\partial_c h^a{}_b - \partial_b h^a{}_c - C^a{}_{ed} h^e{}_b h^d{}_c]. \quad (3.38)$$

Ableiten von (3.34) nach θ_2 ergibt für $\theta_1 \rightarrow 0$ zusammen mit der aufgrund der Gruppeneigenschaften gültigen Reihenentwicklung

$$f^a(\theta_1, \theta_2) = \theta_1^a + \theta_2^a + f^a{}_{de} \theta_1^d \theta_2^e, \quad (3.39)$$

wobei aus den Kommutatorrelationen die Beziehung

$$C^a{}_{bd} = -(f^a{}_{bd} - f^a{}_{db}) \quad (3.40)$$

folgt, so daß die Klammer auf der rechten Seite von (3.38) verschwindet, d.h. aber, daß

$$\left[i\mathbf{U}^\dagger \tau_a h^a{}_b \delta\Theta^b - \mathbf{U}^\dagger \delta\mathbf{U} \right] = \text{const.} \quad (3.41)$$

ist. Insbesondere ergibt sich wegen $\delta\Theta^a(1) = 0$

$$\mathbf{U}^\dagger(1)\delta\mathbf{U}(1) = \text{const.} = 0. \quad (3.42)$$

Damit ist $\mathbf{U}(1)$ invariant unter infinitesimalen Variationen des Standardweges. Da die Gruppe einfach zusammenhängend ist, trifft dies sogar global zu, d.h. $\mathbf{U}_\theta(1)$ ist unabhängig vom Weg, und damit ist auch

$$\mathbf{U}_P(1) = \mathbf{U}_{f(\theta_2, \theta_1)}, \quad (3.43)$$

und das bedeutet, daß wir wegen (3.36) tatsächlich mit Hilfe unserer Differentialgleichung eine Darstellung konstruiert haben.

Jetzt zeigen wir abschließend noch Punkt 3 unseres Arbeitsprogramms, also daß jede projektive Darstellung $\mathbf{U}'(\theta)$ der Gruppe mit denselben Operatoren τ sich nur um Phasenfaktoren von der eben konstruierten unitären Darstellung unterscheidet, so daß sich die Phasen der Strahldarstellung durch einfache Festlegung der Phasenwahl der darstellenden unitären Operatoren beseitigen lassen. Die unitäre Darstellung der Gruppe ist also durch die Liealgebra bis auf Äquivalenz eindeutig bestimmt.

Zunächst schreiben wir die Strahldarstellungseigenschaft der \mathbf{U}' in der Form

$$\mathbf{U}'(\theta')\mathbf{U}'(\theta) = \exp[i\phi(\theta', \theta)]\mathbf{U}'[f(\theta', \theta)]. \quad (3.44)$$

Dann gilt

$$\mathbf{U}^{-1}(\theta)\mathbf{U}^{-1}(\theta')\mathbf{U}'(\theta')\mathbf{U}(\theta) = \mathbf{U}^{-1}[f(\theta', \theta)]\mathbf{U}'[f(\theta', \theta)]\exp[i\phi(\theta', \theta)], \quad (3.45)$$

und Ableiten der linken Seite nach θ' ergibt 0, weil beide Darstellungen dieselben Generatoren besitzen. Ableitung der rechten Seite nach θ' und anschließendes Nullsetzen von θ' ergibt folglich unter Berücksichtigung der Definition (3.31):

$$0 = \left(h^{-1}\right)_b^a \frac{\partial[\mathbf{U}^{-1}(\theta)\mathbf{U}'(\theta)]}{\partial\theta^a} + i \left.\frac{\partial\phi}{\partial\theta'^a}\right|_{\theta'=0} \mathbf{U}^{-1}(\theta)\mathbf{U}'(\theta). \quad (3.46)$$

Dies formen wir um zu

$$\frac{\partial[\mathbf{U}^{-1}(\theta)\mathbf{U}'(\theta)]}{\partial\theta^c} = -i\phi_c(\theta)\mathbf{U}^{-1}(\theta)\mathbf{U}'(\theta) \text{ mit } \phi_c(\theta) = h^c_a(\theta) \left.\frac{\partial\phi(\theta', \theta)}{\partial\theta^a}\right|_{\theta'=0}, \quad (3.47)$$

leiten dies wiederum nach θ^b ab und antisymmetrisieren in b und c :

$$(\partial_b\phi_c)\mathbf{U}^{-1}\mathbf{U}' + \phi_c\partial_b(\mathbf{U}^{-1}\mathbf{U}') - (\partial_c\phi_b)\mathbf{U}^{-1}\mathbf{U}' - \phi_b\partial_c(\mathbf{U}^{-1}\mathbf{U}') = 0. \quad (3.48)$$

Hierin (3.47) angewandt ergibt schließlich

$$\partial_b\phi_c - \partial_c\phi_b = 0. \quad (3.49)$$

Da die Gruppe voraussetzungsgemäß einfach zusammenhängend ist, können wir schließlich aufgrund des Lemmas von Poincaré folgern

$$\exists\beta : U \rightarrow \mathbb{R} : \phi_a = \frac{\partial\beta}{\partial\theta^a}. \quad (3.50)$$

Somit ist

$$\partial_a[\mathbf{U}^{-1}\mathbf{U}'\exp(i\beta)] = \partial_a(\mathbf{U}^{-1}\mathbf{U}')\exp(i\beta) + i(\partial_a\beta)\mathbf{U}^{-1}\mathbf{U}'\exp(i\beta) = 0, \quad (3.51)$$

wobei wir zuletzt wieder (3.47) und (3.50) angewandt haben. Damit erhalten wir schließlich das gewünschte Resultat:

$$\mathbf{U}^{-1}(\theta)\mathbf{U}'(\theta)\exp[i\beta(\theta)] = \exp[i\beta(0)], \quad (3.52)$$

also

$$\mathbf{U}'(\theta) = \mathbf{U}(\theta)\exp[-i\beta(\theta) + i\beta(0)], \quad (3.53)$$

d.h. daß sich die Strahldarstellung \mathbf{U}' von der unitären Darstellung \mathbf{U} tatsächlich lediglich durch Phasenfaktoren unterscheidet. q.e.d.

3.3 Das quantentheoretische Noethertheorem

Als nächstes müssen wir die Verträglichkeit der Symmetrietransformation mit der Zeitentwicklung herleiten. Dies muß eine bildunabhängige Bedingung an die Symmetrietransformationen ergeben. Daher können wir diese Bedingung in einem beliebigen Bild der Zeitentwicklung herleiten. Wir wählen dazu das Schrödingerbild. Ein beliebiger Zustand genügt dann wegen $\mathbf{Y}_S = \mathbf{H}_S$; $\mathbf{X}_S = 0$ (Definition des Schrödingerbildes) der Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt} |\Psi_S, t\rangle = -i\mathbf{H}_S(t) |\Psi_S, t\rangle. \quad (3.54)$$

Nun sei $\mathbf{U}_g(t)$ eine beliebige i.a. explizit zeitabhängige Transformation. Sei nun

$$|\Psi'_S, t\rangle = \mathbf{U}(t) |\Psi_S, t\rangle. \quad (3.55)$$

Es ist klar, daß \mathbf{U} genau dann Symmetrietransformation ist, wenn auch $|\Psi'_S, t\rangle$ der Zeitentwicklung, die durch (3.54) definiert ist, genügt, denn \mathbf{U} ist definitionsgemäß dann Symmetrietransformation, wenn der Zustand $|\Psi'_S, t\rangle$ äquivalent zum Zustand $|\Psi_S, t\rangle$ ist. Durch Ableitung von (3.55) nach der Zeit finden wir unter Verwendung von (3.54) und der Annahme, daß diese Gleichung auch für $|\Psi'_S, t\rangle$ zutrifft, daß \mathbf{U} genau dann Symmetrietransformation ist, wenn

$$[\mathbf{U}, \mathbf{H}] + i \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right)_{\text{expl}} = \dot{\mathbf{U}} = 0 \quad (3.56)$$

ist, wobei $\dot{\mathbf{U}}$ die physikalische Zeitableitung von \mathbf{U} bedeutet. Da diese Gleichung bildunabhängig ist (vgl. Kap. 2), stellt sie die gesuchte Symmetriebedingung dar.

Dies ist aber das quantentheoretische Pendant zum klassischen Noethertheorem, besagt doch (3.56), daß \mathbf{U} unter der physikalischen Zeitentwicklung konstant ist. Es ist ferner klar, daß dieselben Betrachtungen auch auf die infinitesimalen Erzeugenden der Symmetriegruppe zutreffen, weil sich diese aus den globalen Symmetrietransformationen durch Ableitung nach den Parametern der Symmetriegruppe ergeben.

3.4 Die Galileigruppe

Unsere bisherigen Untersuchungen sind sehr allgemeiner Natur und gelten sowohl für die nichtrelativistische als auch für die relativistische Quantenmechanik. Wir wollen jetzt die nichtrelativistische Quantenmechanik weiterentwickeln. Das bedeutet, daß wir die für jede Quantenmechanik benötigte Hypothese über das Raum-Zeit-Kontinuum zugunsten der Newtonschen Raum-Zeit entscheiden. In Kapitel 1 haben gesehen, daß wir allein aufgrund der Symmetriegruppe, die diesem Raum-Zeit-Kontinuum zugrundeliegt, die Newtonsche Mechanik, freilich in der Hamiltonschen Formulierung, rekonstruieren konnten.

Wir können damit aber diese Betrachtungsweise auch umkehren und die Symmetriegruppe der Raum-Zeit postulieren und diejenigen Systeme für durch die Theorie beschreibbar erklären, die durch vermöge der Symmetriegruppe definierte Observable formulierbar sind.

Im vorigen Abschnitt haben wir gesehen, daß jede Symmetrie, die durch eine einfach zusammenhängende Liegruppe ohne Zentralladungen in der dazugehörigen Liealgebra gegeben ist, in der Quantenmechanik durch eine unitäre Darstellung auf dem quantenmechanischen Hilbertraum beschrieben werden kann. Aus der Theorie der Liegruppen wissen wir, daß man zu jeder

Liegruppe eine eindeutig bestimmte Überlagerung finden kann, die einfach zusammenhängend ist, die zu der Liegruppe gehörige universelle Überlagerungsgruppe. Weiter können wir für jede Zentralladung, die sich nicht in der im vorigen Abschnitt beschriebenen Weise durch einfache Umdefinition der Liealgebren-elemente beseitigen läßt, ein erzeugendes Element für eine weitere Einparameteruntergruppe einführen, die mit allen übrigen erzeugenden Elementen der Liealgebra der Gruppe vertauscht. D.h. man geht zu einer erweiterten Gruppe über, die nur einige weitere Casimiroperatoren enthält als die ursprüngliche.

Definieren wir jetzt als nichtrelativistisches Quantensystem ein solches, das sich durch eine unitäre Darstellung der auf diese Weise verallgemeinerten Symmetriegruppe auf dem quantenmechanischen Hilbertraum beschreiben läßt, haben wir eine eindeutige Vorschrift gewonnen, welche physikalischen Systeme wir im Sinne von Kapitel 2 unter Voraussetzung der Newtonschen Raum-Zeit, also der Annahme der Galileigruppe als Symmetriegruppe, wir überhaupt betrachten können.

Wir wollen jetzt die mathematische Durchführung dieses Konzepts angehen. Dazu nähern wir uns der Galileigruppe indem wir die Erkenntnisse aus Kapitel 1 anwenden. Zunächst rufen wir uns in Erinnerung zurück, wie die Liealgebra der Galileigruppe aussieht. Wir stellen dazu als erstes die Generatoren der Gruppe, also eine Basis der Liealgebra zusammen:

- Zeittranslationen: Hamiltonoperator des Systems \mathbf{H} ,
- Raumtranslationen: Gesamtimpuls des Systems $\vec{\mathbf{p}}$,
- Drehungen: Gesamtdrehimpuls des Systems $\vec{\mathbf{J}}$,
- Galileiboosts: Schwerpunkt \times Gesamtmasse $\vec{\mathbf{K}}$.

Zur Berechnung der die Liealgebra bestimmenden Kommutatorrelationen berechnet man die Hintereinanderausführung der in Kapitel 1 aufgeführten Transformationen für nur infinitesimal von der Identität verschiedene solcher Wirkungen auf die Raum-Zeit und daraus wiederum die Kommutatoren. Diese Rechnung ist elementar und ergibt die folgenden, hier gleich in Form von Kommutatorrelationen selbstadjungierter Operatoren ausgedrückten Kommutatorrelationen:

$$\begin{aligned} [\mathbf{P}_j, \mathbf{P}_k] &= 0, \quad [\mathbf{H}, \vec{\mathbf{J}}] = 0, \\ [\mathbf{J}_j, \mathbf{J}_k] &= i\epsilon_{jkl}\mathbf{J}_l, \quad [\mathbf{J}_j, \mathbf{p}_k] = i\epsilon_{jkl}\mathbf{p}_l, \quad [\mathbf{J}_j, \mathbf{K}_k] = i\epsilon_{jkl}\mathbf{K}_l, \\ [\mathbf{p}_j, \mathbf{K}_k] &= iM\delta_{kj}\mathbf{1}, \quad [\mathbf{H}, \vec{\mathbf{K}}] = -i\vec{\mathbf{p}}. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Diese Darstellung der Galilei-Liealgebra enthält in der ersten Gleichung der letzten Zeile eine Zentralladung. Diese läßt sich nun offenbar nicht durch einfache zum Einsoperator proportionale Verschiebungen der übrigen Operatoren beseitigen. Wir gehen also zu einer erweiterten Algebra über, die dadurch aus der bis jetzt betrachteten Algebra entsteht, daß wir einen Massenoperator \mathbf{M} hinzufügen, der mit allen 10 Generatoren der Galileigruppe kommutiert, also Casimiroperator der Liealgebra ist und die besagte Gleichung in die Kommutatorrelation

$$[\mathbf{K}_k, \mathbf{p}_j] = iM\delta_{kj} \quad (3.58)$$

abändern. Weiter müssen wir statt der Galileigruppe selbst ihre universelle Überlagerungsgruppe betrachten. Wir werden weiter unten sehen, daß dies nur den Übergang von der durch die Drehimpulsoperatoren erzeugten Drehgruppe $SO(3)$ zu ihrer universellen Überlagerung, der $SU(2)$,

erfordert, die selbstverständlich die gleiche Liealgebra besitzt, weil ja Überlagerungen von Mannigfaltigkeiten, in unserem Fall der Liegruppe, sich lokal von diesen nicht unterscheiden.

Wir bemerken noch, daß aufgrund der Symmetriebedingung (3.56) \mathbf{K} explizit zeitabhängig ist. (3.56) verlangt, daß

$$[\vec{\mathbf{K}}, \mathbf{H}] = i\vec{\mathbf{p}} = -i \left(\frac{\partial \vec{\mathbf{K}}}{\partial t} \right)_{\text{expl}}, \quad (3.59)$$

wobei wir uns der Kommutatorrelationen (3.57) bedient haben. Da nach eben denselben und der Symmetriebedingung (3.56) \mathbf{P} explizit zeitunabhängig ist, läßt sich diese Gleichung sofort aufintegrieren:

$$\vec{\mathbf{K}} = \vec{\mathbf{K}}_0 - \vec{\mathbf{p}}t. \quad (3.60)$$

Dabei muß $\vec{\mathbf{K}}_0$ denselben Kommutatorrelationen wie \mathbf{K} genügen und explizit zeitunabhängig sein. Umgekehrt ist klar, daß bei einer beliebigen Wahl von $\vec{\mathbf{K}}_0$ zur Erfüllung der Kommutatorrelationen (3.57) eine Definition von $\vec{\mathbf{K}}$ mit Hilfe von (3.60) die richtige Realisierung gegeben ist. Das heißt aber wiederum, daß die Realisierbarkeit der Galileitransformationen durch die Forderung (3.60) nicht weiter beeinträchtigt wird.

Unsere Betrachtungen in Kapitel 1 zeigen, daß ein einzelner klassischer Massepunkt genau durch die zehn Generatoren der Galileigruppe vollständig beschreiben läßt. Wir bezeichnen daher ein quantenmechanisches System, das sich durch die 11 Observablen, die Generatoren der erweiterten Galileigruppe sind, vollständig beschreiben läßt und dessen quantenmechanischer Hilbertraum eine irreduzible unitäre Darstellung dieser Gruppe realisiert, als *elementares Teilchen*. Dies entspricht dem Vorgehen in der Hochenergiephysik, elementare Teilchen nach irreduziblen Darstellungen der Poincaré-Gruppe zu klassifizieren, die die speziell-relativistische Raum-Zeit vollständig charakterisiert.

Jetzt wenden wir uns der Aufgabe zu, die unitären Darstellungen der quantenmechanisch erweiterten Galileigruppe zu konstruieren. Dabei genügt es, die irreduziblen Darstellungen zu konstruieren. Die folgende Herleitung entspricht vollkommen der entsprechenden Betrachtung in der relativistischen Quantenfeldtheorie.

Dazu bemerken wir, daß wir in Kapitel 2.2 bereits einen Hauptteil dieser geleistet haben. Im Sinne der „kanonischen Quantisierung“ haben wir nämlich bereits den Hilbertraum bestimmt, der die Teilalgebra, bestehend aus $\vec{\mathbf{p}}$, \mathbf{H} und $\vec{\mathbf{K}}$ realisiert. Wir können die Rekonstruktion des Hilbertraums bereits von dort übernehmen.

Der Massenoperator ist ein sog. Casimiroperator, weil er mit allen übrigen Operatoren, die die Liealgebra aufspannen, vertauscht, so daß dieser nach dem Schurschen Kommutatorlemma auf der irreduziblen Darstellung proportional zum identischen Operator ist. Wir können also in dieser Darstellung $\mathbf{M} = m\mathbf{1}$ schreiben. Wir definieren weiter eine verallgemeinerte Basis des Hilbertraumes als simultanen Eigenraum von \mathbf{H} und $\vec{\mathbf{p}}$, wobei dieser simultane Eigenraum noch entartet sein kann. Dem tragen wir durch einen Sammelindex α Rechnung. Wir bezeichnen also den vollständigen Satz verallgemeinerter Eigenvektoren mit $|E, \vec{\mathbf{p}}, \alpha\rangle$.

Wir müssen jetzt noch die Darstellung der Boosts und Drehungen, erzeugt durch $\vec{\mathbf{K}}$ und $\vec{\mathbf{J}}$, festlegen. Dazu berechnen wir die folgende operatorwertige Funktion:

$$\mathbb{R}^3 \ni \vec{v} \mapsto \exp(-i\vec{v}\vec{\mathbf{K}})\vec{\mathbf{p}}\exp(i\vec{v}\vec{\mathbf{K}}) = \vec{\mathbf{p}}'(\vec{v}) \in \mathcal{U}(\mathcal{H}). \quad (3.61)$$

Ableiten dieser Beziehung nach v_j und Berücksichtigen der Vertauschungsregeln (3.57-3.58) er-

gibt die Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial v_j} \mathbf{p}'_k(\vec{v}) = \delta_{kj} \mathbf{M}, \quad (3.62)$$

die aufgrund der Anfangsbedingung $\vec{\mathbf{p}}'(0) = \vec{\mathbf{p}}$ eindeutig durch

$$\vec{\mathbf{p}}'(\vec{v}) = \vec{\mathbf{p}} + \vec{v} \mathbf{M} \quad (3.63)$$

gelöst wird. Auf unserer irreduziblen Darstellung gilt also

$$\vec{\mathbf{p}} \exp(i\vec{v}\vec{\mathbf{K}}) |E, \vec{p}, \alpha\rangle = \exp(i\vec{v}\vec{\mathbf{K}}) \vec{\mathbf{p}}'(\vec{v}) |E, \vec{p}, \alpha\rangle = (\vec{p} + m\vec{v}) \exp(i\vec{v}\vec{\mathbf{K}}) |E, \vec{p}, \alpha\rangle. \quad (3.64)$$

Das bedeutet, daß $\exp(i\vec{v}\vec{\mathbf{K}}) |E, \vec{p}, \alpha\rangle$ simultaner Eigenvektor von $\vec{\mathbf{p}}$ zum Eigenwert $(\vec{p} + m\vec{v})$ ist. Jetzt gehen wir genauso mit der Funktion

$$\exp(-i\vec{v}\vec{\mathbf{K}}) \mathbf{H} \exp(i\vec{v}\vec{\mathbf{K}}) = \mathbf{H}'(\vec{v}) \quad (3.65)$$

vor. Die Ableitung nach \mathbf{v} und das anschließende Hochintegrieren ergibt unter Anwendung der Kommutatorregeln (3.57-3.58)

$$\mathbf{H}'(\vec{v}) = \mathbf{H} + \vec{v}\vec{\mathbf{p}} + \frac{1}{2} \mathbf{M} \vec{v}^2. \quad (3.66)$$

Anwendung derselben Rechnung wie bei (3.64) ergibt:

$$\mathbf{H} \exp(i\vec{v}\vec{\mathbf{K}}) |E, \vec{p}, \alpha\rangle = \left(E + \vec{v}\vec{p} + \frac{1}{2} m \vec{v}^2 \right) \exp(i\vec{v}\vec{\mathbf{K}}) |E, \vec{p}, \alpha\rangle. \quad (3.67)$$

Jetzt nehmen wir an, $m \neq 0$. Dann ergibt eine einfache Rechnung

$$E' - E = \frac{\vec{p}'^2 - \vec{p}^2}{2m} \Rightarrow E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + C(\alpha). \quad (3.68)$$

Dies erinnert schon an die klassische Energie-Impuls-Beziehung. Wir fahren aber zunächst noch in der formalen Konstruktion der irreduziblen Darstellungen der quantenmechanischen Galileigruppe fort. Jetzt wissen wir bereits, wie eine fünf-parametrische Untergruppe derselben darzustellen ist, nämlich die Gruppe, die von den Generatoren \mathbf{M} , \mathbf{H} , $\vec{\mathbf{p}}$ erzeugt wird.

Es bleibt das semidirekte Produkt aus Drehgruppe und Boostgruppe (die letztere wird etwas vornehmer in der deutschen Literatur auch als spezielle Galileigruppe bezeichnet) zu untersuchen. Wir schreiben wegen der Energie-Impulsbeziehung (3.68) jetzt kurz $|E, \vec{p}, \alpha\rangle = |\vec{p}, \alpha\rangle$. Da die Darstellung weiter voraussetzungsgemäß irreduzibel sein soll, muß wegen (3.64) gelten

$$\exp(i\vec{v}_1\vec{\mathbf{K}}) |\vec{p}, \alpha\rangle = \sum_{\beta_1} U_{\beta_1\alpha}(\vec{p}, \vec{v}_1) |\vec{p} + m\vec{v}_1, \beta_1\rangle. \quad (3.69)$$

Wendet man ein weiteres mal eine Boosttransformation auf diesen Vektor an, folgt

$$\exp(i\vec{v}_2\vec{\mathbf{K}}) \exp(i\vec{v}_1\vec{\mathbf{K}}) |\vec{p}, \alpha\rangle = \sum_{\beta_1\beta_2} U_{\beta_2\beta_1}(\vec{p} + m\vec{v}_1, \vec{v}_2) U_{\beta_1\alpha}(\vec{p}, \vec{v}_1) |\vec{p} + m(\vec{v}_1 + \vec{v}_2), \beta_2\rangle. \quad (3.70)$$

Wegen der Kommutativität der $\vec{\mathbf{K}}$ untereinander gilt aber andererseits:

$$\exp(i\vec{v}_2\vec{\mathbf{K}}) \exp(i\vec{v}_1\vec{\mathbf{K}}) = \exp[i(\vec{v}_1 + \vec{v}_2)\vec{\mathbf{K}}], \quad (3.71)$$

so daß die direkte Anwendung der Hintereinanderausführung wegen der linearen Unabhängigkeit der Basisvektoren des Unterraums zu gegebenem Impulseigenwert die Beziehung

$$U_{\beta_2\beta_1}(\vec{p} + m\vec{v}_1, \vec{v}_2)U_{\beta_1\alpha}(\vec{p}, \vec{v}_1) = U_{\beta_2\alpha}(\vec{p}, \vec{v}_1 + \vec{v}_2) \quad (3.72)$$

ergibt. Da wir nun weiter eine unitäre Darstellung der Gruppe realisieren wollen, müssen die $U_{\beta\gamma}$ eine unitäre Darstellung des semidirekten Produkts aus Boostuntergruppe und Drehgruppe bilden, die wir jetzt kurz als Boost-Drehgruppe bezeichnen wollen. Sei jetzt $\vec{p}_0 \in \mathbb{R}^3$. Dann erfüllen die $U_{\beta\gamma}$ die Darstellungseigenschaften gem. (3.72) für die Untergruppe der Boost-Drehgruppe, die nicht aus dem Energie-Impuls-Eigenraum zum Eigenwert \vec{p}_0 herausführen. Bzgl. der Wirkung auf die Impulseigenwerte ist dies die Standuntergruppe der Boost-Drehgruppe zum Impulseigenwert \vec{p}_0 , die als kleine Gruppe $K(\vec{p}_0)$ bezeichnet wird. Wegen der Transitivität der Wirkung der Boosts auf die Impulseigenwerte können wir $\vec{p}_0 = 0$ wählen. Es ist klar, daß der Nullvektor im Impulsraum genau von den Drehungen nicht geändert wird. In der Quantenmechanik wird die Drehgruppe, wie oben erörtert, durch deren universelle Überlagerung, die $SU(2)$ repräsentiert. Die Standgruppe ist also $K(0) = SU(2)$. Es folgt aus dieser Betrachtung auch, daß die Energieeigenwerte nicht von α abhängen dürfen, damit die $U_{\beta\gamma}$ die Darstellungseigenschaften der kleinen Gruppe nicht verletzen.

Wir können diese Überlegungen dahingehend zusammenfassen, daß die $U_{\beta\gamma}$ nicht von E und \vec{p} abhängen dürfen. Wir wählen nun eine feste Orthonormalbasis $|0, \alpha\rangle$ des Unterraums von \mathcal{H} zum Impulseigenwert 0. Dann ist wegen der Unitarität der Boosttransformation durch

$$|\vec{p}, \alpha\rangle = \exp\left(i\frac{\vec{p}}{m}\vec{\mathbf{K}}\right)|0, \alpha\rangle \quad (3.73)$$

eine Orthonormalbasis des Unterraums zum Impulseigenwert \vec{p} gegeben. Jeder dieser Impulseigenvektoren ist gleichzeitig auch Energieeigenvektor, und es gilt die Energie-Impulsbeziehung $E = \vec{p}^2/(2m) + E_0$, wobei E_0 eine von \vec{p} und α unabhängige Konstante ist.

Mit der Darstellungstheorie der Drehgruppe befassen wir uns der Übersichtlichkeit halber im folgenden Abschnitt. Wir bemerken hier noch, daß bis jetzt in keiner Weise Teilchen mit positiver Masse gegenüber solchen mit negativer Masse ausgezeichnet sind. Allerdings ist der Hamiltonoperator im ersten Falle von unten im zweiten aber von oben durch $E = E_0$ beschränkt. Dies zeichnet die positiven Massenwerte vor den negativen aus. Wir werden nämlich sehen, daß nur ein von unten beschränkter Hamiltonoperator zu einem stabilen Grundzustand des Systems führen kann.

Zum Abschluß dieses Abschnitts bemerken wir noch, daß der Fall $m = 0$ nicht zu unserer physikalischen Intuition passenden Darstellungen der Galileigruppe führt, insbesondere ergibt sich keine Energie-Impulsbeziehung für elementare Teilchen. Dies steht im Gegensatz zum relativistischen Fall, in dem masselose Teilchen durchaus physikalisch sinnvoll sind. Nach dem Standardmodell sind z.B. Photonen Beispiele für masselose Teilchen.

3.5 Die Darstellungen der SU(2)

Zur vollständigen Charakterisierung der unitären Darstellungen der Galileigruppe fehlt jetzt nur noch die Konstruktion der irreduziblen Darstellung der quantenmechanischen Drehgruppe SU(2). Dies ist nicht nur in diesem Zusammenhang äußerst bedeutsam, sondern auch bei der Charakterisierung zusammengesetzter Systeme, wie z.B. Atomen.

Jetzt wollen wir aber den Sachverhalt im Zusammenhang mit elementaren Teilchen klären. Im vorigen Abschnitt haben wir gesehen, daß die $|0, \alpha\rangle$, also die Energie-Impuls-Eigenzustände zum Impulswert 0 ein Darstellungsraum der SU(2) zu einer irreduziblen unitären Darstellung aufspannen. Diese Darstellung wollen wir im folgenden bestimmen. Hier haben wir zum ersten Mal eine über das klassische Konzept des Punktteilchen hinausgehenden Effekt der Galilei-invarianz vor uns: Das elementare Teilchen im Sinne der Quantenmechanik kann einen inneren Freiheitsgrad vom Charakter eines Drehimpulses besitzen. Diesen Freiheitsgrad bezeichnet man als *Spin* des Teilchens. In Kap. 2 haben wir ein klassisches System im Sinne der "kanonischen Quantisierung" quantisiert, wobei der Spinfreiheitsgrad natürlicherweise nicht auftritt, weil er der klassischen Physik unbekannt ist. Der Fall eines klassischen kanonisch quantisierten Systems wird sich als Spezialfall erweisen, bei dem die Spinalgebra trivial dargestellt wird. Der einzige quantenmechanisch dann noch auftretende Drehimpuls ist der Bahndrehimpuls, den man durch kanonische Quantisierung des klassischen Drehimpulses erhält, doch davon mehr bei den Anwendungen (Kap. 5 ff).

Wir wenden uns jetzt der Konstruktion der irreduziblen Darstellungen der SU(2) zu, was gleichzeitig die Spezifikation der möglichen elementaren Teilchen im Rahmen der nichtrelativistischen Quantenmechanik abschließt.

Laut (3.57) wird die Liealgebra $su[2]$ durch die drei selbstadjungierten Spinoperatoren $\vec{\mathbf{J}}$ aufgespannt, und es gelten die Kommutatorrelationen

$$[\mathbf{J}_j, \mathbf{J}_k] = i\epsilon_{jkl}\mathbf{J}_l. \quad (3.74)$$

Ähnlich wie in Kap. 2 bei der Konstruktion des irreduziblen Darstellungsraums der Heisenbergalgebra reicht diese Information bereits aus, die irreduziblen unitären Darstellungen der $su[2]$ zu finden. Zunächst erwarten wir, daß $\vec{\mathbf{J}}^2$ mit allen $\vec{\mathbf{J}}$ vertauscht. Mit (3.74) ist dies sofort zu bestätigen:

$$[\mathbf{J}_k, \mathbf{J}_l\mathbf{J}_l] = i\epsilon_{klm}(\mathbf{J}_l\mathbf{J}_m + \mathbf{J}_m\mathbf{J}_l) = 0. \quad (3.75)$$

Damit ist nach dem Schurschen Kommutatorlemma auf jeder irreduziblen Darstellung $\vec{\mathbf{J}}^2$ proportional zum Einsoperator, und der Eigenwert des Casimiroperators ist ein die Darstellung charakterisierender Parameter. Da die drei Drehimpulsoperatoren alle nicht miteinander vertauschen, muß sich die irreduzible unitäre Darstellung zum $\vec{\mathbf{J}}^2$ -Eigenwert α durch die Eigenbasis eines beliebigen Spinoperators, üblicherweise nimmt man \mathbf{J}_z , darstellen lassen:

$$\vec{\mathbf{J}}^2 |\alpha, j_z\rangle = \alpha |\alpha, j_z\rangle, \quad \mathbf{J}_z |\alpha, j_z\rangle = j_z |\alpha, j_z\rangle. \quad (3.76)$$

Da die Darstellung irreduzibel sein soll, muß sich der gesamte Darstellungsraum aus einem beliebigen dieser Basisvektoren durch fortgesetzte Anwendung von Linearkombinationen von \mathbf{J}_x und \mathbf{J}_y erzeugen lassen. Dieses Programm wollen wir jetzt verfolgen. Wir haben durch die willkürliche Wahl von \mathbf{J}_z zur Charakterisierung der Basisvektoren die z -Richtung ausgezeichnet. Es empfiehlt sich daher die Einführung eines Polarkoordinatensystems in der xy -Ebene. Dies ist

aber nicht so einfach im Operatorformalismus zu realisieren. Wir nutzen eine andere Möglichkeit, die oft im Zusammenhang mit Rechnungen in der klassischen Mechanik benutzt wird, nämlich die Darstellung der xy -Ebene als komplexe Zahlenebene. Entsprechend konstruieren wir die nichtselbstadjungierten zueinander adjungierten Operatoren

$$\mathbf{J}_\pm = \mathbf{J}_x \pm i\mathbf{J}_y. \quad (3.77)$$

Wir werden im folgenden intensiven Gebrauch von Kommutatorrelationen dieser Operatoren machen. Diese lassen sich sofort aus (3.74) herleiten. Besonders einfach ist die Kommutativität mit $\vec{\mathbf{J}}^2$ einzusehen

$$[\mathbf{J}_\pm, \vec{\mathbf{J}}^2] = 0, \quad (3.78)$$

weil $\vec{\mathbf{J}}^2$ Casimiroperator der $su[2]$ ist. Weiter führt die Anwendung von (3.74) sofort auf

$$[\mathbf{J}_z, \mathbf{J}_\pm] = \pm\mathbf{J}_\pm, \quad (3.79)$$

$$[\mathbf{J}_+, \mathbf{J}_-] = 2\mathbf{J}_z. \quad (3.80)$$

Weiter rechnet man unter erneuter Anwendung von (3.74) nach, daß

$$\vec{\mathbf{J}}^2 = \mathbf{J}_+\mathbf{J}_- + \mathbf{J}_z(\mathbf{J}_z - 1) \quad (3.81)$$

gilt, und durch Anwendung von (3.80) folgt hieraus sofort

$$\vec{\mathbf{J}}^2 = \mathbf{J}_-\mathbf{J}_+ + \mathbf{J}_z(\mathbf{J}_z + 1). \quad (3.82)$$

Jetzt bestimmen wir die Eigenwerte von $\vec{\mathbf{J}}^2$ und \mathbf{J}_z . Zunächst ist $\vec{\mathbf{J}}^2$ ein positiver Operator, was sich unmittelbar aus der Hermitezität der $\vec{\mathbf{J}}$ ergibt. Damit ist $\alpha \geq 0$. Weiter zeigen wir, daß \mathbf{J}_z beschränkt ist:

$$j_z^2 = \langle \alpha, j_z | \mathbf{J}_z^2 | \alpha, j_z \rangle = \langle \alpha, j_z | \vec{\mathbf{J}}^2 - \mathbf{J}_x^2 - \mathbf{J}_y^2 | \alpha, j_z \rangle \leq \langle \alpha, j_z | \vec{\mathbf{J}}^2 | \alpha, j_z \rangle = \alpha \Rightarrow j_z^2 \leq \alpha. \quad (3.83)$$

Nun gilt wegen (3.80)

$$\mathbf{J}_z\mathbf{J}_\pm | \alpha, j_z \rangle = \{[\mathbf{J}_z, \mathbf{J}_\pm] + \mathbf{J}_\pm j_z\} | \alpha, j_z \rangle = (j_z \pm 1)\mathbf{J}_\pm | \alpha, j_z \rangle. \quad (3.84)$$

Das bedeutet, daß entweder $\mathbf{J}_\pm | \alpha, j_z \rangle$ Eigenvektor von \mathbf{J}_z zum Eigenwert $j_z \pm 1$ oder der Nullvektor ist.

Sei nun $j = \max\{j_z\}$. Dann ist zwingend

$$\mathbf{J}_+ | \alpha, j \rangle = 0, \quad (3.85)$$

und (3.82) ergibt

$$\alpha = j(j + 1). \quad (3.86)$$

Sei jetzt $-j' = \min\{j_z\}$. Dann gilt wegen $\mathbf{J}_- | \alpha, -j' \rangle = 0$ und (3.81) $\alpha = j'(j' + 1)$ und zusammen mit (3.86) und $-j' \leq j$ folgert man $j = j'$. Meist wird die Darstellung, die durch den Eigenwert von $\vec{\mathbf{J}}^2$ definiert ist, durch j gekennzeichnet, und wir folgen diesem Brauch. Dabei ist der Eigenwert α von $\vec{\mathbf{J}}^2$ durch (3.86) gegeben.

Jetzt legen wir die Orthonormalbasis des irreduziblen Darstellungsraums durch die Gleichung

$$\mathbf{J}_- | \alpha, j_z \rangle = N(j_z) | \alpha, j_z - 1 \rangle \quad (3.87)$$

sowie die Forderung $N(j_z) \in \mathbb{R}$ und $N(j_z) \geq 0$ fest. Dies ist eine Rekursionsformel, die aus gegebenem $|\alpha, j\rangle$ die Berechnung der übrigen zur irreduziblen Darstellung gehörigen Eigenvektoren von \mathbf{J}_z gestattet. Diese bricht wegen der Beschränktheit der Eigenvektoren mit Erreichen des minimalen Eigenwertes $-j$ von \mathbf{J}_z ab. Es muß also

$$\mathbf{J}_-^k |\alpha, j\rangle = C_k |\alpha, j - k\rangle \quad \text{mit } k \in \mathbb{N} \quad (3.88)$$

sein. Aufgrund der obigen Überlegung, daß der minimale Eigenwert von \mathbf{J}_z $-j$ ist, folgt damit

$$\exists k \in \mathbb{N} : j - k = -j \Rightarrow \exists k \in \mathbb{N} : j = k/2. \quad (3.89)$$

Damit sind die möglichen Eigenwerte von \mathbf{J}^2 gemäß (3.86) durch $j \in \{0, 1/2, 1, \dots\}$ bestimmt. Die möglichen Eigenwerte von \mathbf{J}_z sind dann aufgrund der Irreduzibilität der Darstellung gemäß (3.88) durch $j_z \in \{-j, -j + 1, \dots, j\}$ gegeben, woraus sich die Dimension der Darstellung zu $\dim \text{Eig}[\mathbf{J}^2, j(j+1)] = 2j + 1$ ergibt. Da die möglichen Werte von j natürlichzahlige Vielfache von $1/2$ sind, gibt es zu jeder Dimension genau eine Darstellung der $su[2]$. Insbesondere gehört zu $j = 0$ die triviale Darstellung, in der alle Drehimpulsoperatoren den einen Basisvektor des Darstellungsraums annullieren, so daß alle Drehungen $\exp(\phi \vec{n} \cdot \mathbf{J})$ auf diesem Darstellungsraum durch die Identität dargestellt werden.

Jetzt bleibt zur vollständigen Beschreibung der Darstellung noch die Wirkung der \mathbf{J}_\pm auf die Basisvektoren zu bestimmen. Zunächst bestimmen wir die $N(j_z)$ in (3.87):

$$N(j_z)^2 = \langle \mathbf{J}_- \alpha, j_z | \mathbf{J}_- \alpha, j_z \rangle = \langle \alpha, j_z | \mathbf{J}_+ \mathbf{J}_- | \alpha, j_z \rangle = \alpha - j_z(j_z - 1), \quad (3.90)$$

wobei wir von (3.81), (3.76) und (3.86) Gebrauch gemacht haben. Treffen wir die Phasenwahl so, daß $N(j_z)$ positiv reell wird, folgt daraus

$$\mathbf{J}_- |\alpha, j_z\rangle = \sqrt{\alpha - j_z(j_z - 1)} |\alpha, j_z - 1\rangle. \quad (3.91)$$

Als letztes ist die Wirkung von \mathbf{J}_+ auf die Basisvektoren zu bestimmen. Es gilt

$$\mathbf{J}_+ \mathbf{J}_- |\alpha, j_z + 1\rangle = N(j_z + 1) \mathbf{J}_+ |\alpha, j_z\rangle = N(j_z + 1)^2 |\alpha, j_z + 1\rangle, \quad (3.92)$$

wobei wir (3.81) angewendet haben. Die gesuchte Gleichung lautet also

$$\mathbf{J}_+ |\alpha, j_z\rangle = \sqrt{\alpha - j_z(j_z + 1)} |\alpha, j_z + 1\rangle. \quad (3.93)$$

Kapitel 4

Zentralkraftprobleme

In diesem Kapitel wollen wir eines der für den Erfolg der Quantenmechanik entscheidenden Anwendungsprobleme behandeln, und zwar das wasserstoffähnliche Ion. Dabei handelt es sich in erster Näherung um ein als skalares Teilchen behandeltes Elektron der Masse m_1 mit der Ladung $-e$, das sich um einen ebenfalls als skalares Teilchen mit der Masse m_2 und Ladung $+Ze$ genäherten Kern bewegt.

Zunächst wollen wir allgemeine Zentralkraftprobleme besprechen, d.h. Zweiteilchensysteme, für die die Wechselwirkungskraft nur vom Abstand der beiden Teilchen abhängt, d.h. die Form $V(\|\vec{x}_1 - \vec{x}_2\|)$ besitzt. Wir gehen davon aus, daß es sich dabei um unterscheidbare Teilchen handelt.

4.1 Zurückführung auf ein Einteilchenproblem

Wir betrachten zunächst ganz allgemein zwei skalare unterscheidbare Teilchen, die über eine Zentralkraft, die aus einem Zentralpotential herleitbar ist, wechselwirken. Unser Ziel ist die von der klassischen Mechanik her bekannte Separation des Hamiltonoperators in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten. Der Hamiltonoperator ist auf dem vollen Zweiteilchenhilbertraum, der das direkte Produkt zweier Einteilchenhilberträume ist, definiert. In einer offensichtlichen Vereinfachung der Schreibweise lautet dieser Operator für den gegebenen Fall

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{P}}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{\mathbf{P}}_2^2}{2m_2} + V(\|\vec{\mathbf{x}}_1 - \vec{\mathbf{x}}_2\|), \quad (4.1)$$

wobei es bei der kanonischen Quantisierung des Zentralpotentials wegen der Kommutativität der sechs Ortskoordinatenoperatoren der beiden Teilchen keinerlei Operatorordnungsprobleme gibt.

Aus der Diskussion der Galileiinvarianz ist klar, daß der Gesamtimpuls

$$\vec{\mathbf{P}} = \vec{\mathbf{p}}_1 + \vec{\mathbf{p}}_2 \quad (4.2)$$

als Erzeuger der Translationen im Raum nach dem Noethertheorem eine Erhaltungsgröße ist. In der Tat rechnet man aus den kanonischen Vertauschungsregeln von Orts- und Impulsoperatoren sofort nach, daß $\vec{\mathbf{P}}$ mit \mathbf{H} kommutiert.

Als weitere Größe führen wir den Schwerpunkt

$$\vec{\mathbf{X}} = \frac{m_1 \vec{\mathbf{x}}_1 + m_2 \vec{\mathbf{x}}_2}{M} \text{ mit } M = m_1 + m_2 \quad (4.3)$$

ein. Aus den kanonischen Vertauschungsrelationen folgt ebenfalls in einer einfachen Rechnung, daß

$$D_t \vec{\mathbf{X}} = [\vec{\mathbf{X}}, \mathbf{H}] = \frac{\vec{\mathbf{P}}}{M}, \quad (4.4)$$

wobei wir für die quantenmechanische Zeitableitung den Operator D_t eingeführt haben. Wir definieren weiter den Operator des Relativabstandes

$$\vec{\mathbf{r}} = \vec{\mathbf{x}}_1 - \vec{\mathbf{x}}_2 \Rightarrow D_t \vec{\mathbf{r}} = \frac{\vec{\mathbf{p}}_1}{m_1} - \frac{\vec{\mathbf{p}}_2}{m_2}. \quad (4.5)$$

Wegen

$$\frac{1}{i} [\mathbf{r}_i, D_t \mathbf{r}_j] = \frac{\delta_{ij}}{\mu} \text{ mit } \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (4.6)$$

erweist sich die Einführung des Relativimpulsoperators

$$\vec{\mathbf{p}} = \mu D_t \vec{\mathbf{r}} = \frac{m_2}{M} \vec{\mathbf{p}}_1 - \frac{m_1}{M} \vec{\mathbf{p}}_2 \quad (4.7)$$

als sinnvoll. Wir substituieren nun die neuen Impulse in den Hamiltonoperator:

$$\vec{\mathbf{p}}_1 = \frac{m_1}{M} \vec{\mathbf{P}} + \vec{\mathbf{p}}; \quad \vec{\mathbf{p}}_2 = \frac{m_2}{M} \vec{\mathbf{P}} - \vec{\mathbf{p}} \quad (4.8)$$

und erhalten damit die gewünschte Separation des Hamiltonoperators in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}) \text{ mit } \mathbf{r} = \|\vec{\mathbf{r}}\|. \quad (4.9)$$

Dieses Resultat ist völlig analog zum Hamiltonformalismus des analogen klassisch mechanischen Problems. Da $\vec{\mathbf{P}}$ mit \mathbf{H} vertauscht, vertauschen diese Operatoren auch mit

$$\mathbf{H}_r = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}) \text{ mit } \mathbf{r} = \|\vec{\mathbf{r}}\|. \quad (4.10)$$

Damit können wir simultane Eigenfunktionen von $\vec{\mathbf{P}}$ und \mathbf{H}_r bilden. Das Eigenwertproblem zum Hamiltonoperator \mathbf{H} des Zweiteilchensystems ist dann gelöst, denn für das Spektrum von \mathbf{H} gilt offensichtlich

$$E = \frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2M} + E_r, \quad (4.11)$$

wobei $\vec{\mathbf{P}}$ die Spektralwerte der Operatoren $\vec{\mathbf{P}}$ und E_r die Spektralwerte von \mathbf{H}_r durchlaufen.

Die Berechnung des Gesamtimpulsspektrums ist durch die Konstruktion des Einteilchenhilbertraums für ein Elementarteilchen der Masse M mit Spin 0 bereits gelöst. Dies ist ebenfalls wieder analog zum klassischen Problem: Der Schwerpunkt bewegt sich wie ein freies Punktteilchen der Gesamtmasse M .

Das Eigenwertproblem des Hamiltonoperators ist damit auf die Lösung eines formalen Einteilchenproblems eines Teilchens der Masse μ , das sich im äußeren Zentralfeld $V(r)$ bewegt,

4.1 · Zurückführung auf ein Einteilchenproblem

zurückgeführt. Durch Ausnutzen der Drehinvarianz dieses Zentralkraftproblems läßt sich aber auch dieses Problem noch weiter reduzieren.

Zunächst ist klar, daß der Drehimpuls des Systems durch den Bahndrehimpuls gegeben ist, weil das Quasiteilchen keinen inneren Drehimpuls (Spin) besitzt. Wir schreiben

$$\vec{\mathbf{I}} = \vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{p}}, \quad (4.12)$$

wobei sich keinerlei Operatorordnungsprobleme ergeben, weil Orts- und Impulskomponenten in verschiedene kartesische Richtungen kommutieren. Man rechnet auch sofort nach, daß die drei Bahndrehimpulskomponenten eine Darstellung der Drehalgebra bilden:

$$[\mathbf{l}_j, \mathbf{l}_k] = i\epsilon_{jkl}\mathbf{l}_l. \quad (4.13)$$

Wir schreiben noch das Drehimpulsquadrat an:

$$\vec{\mathbf{I}}^2 = \vec{\mathbf{r}}^2\vec{\mathbf{p}}^2 - (\vec{\mathbf{r}}\vec{\mathbf{p}})(\vec{\mathbf{p}}\vec{\mathbf{r}}) - 2i(\vec{\mathbf{r}}\vec{\mathbf{p}}). \quad (4.14)$$

Dies ergibt sich durch sorgfältige Ausmultiplikation der Definition (4.12) unter Berücksichtigung der Reihenfolge der nichtkommutierenden Operatoren.

Das Eigenwertproblem für die Drehimpulsoperatoren haben wir bereits im 3. Kapitel im Zusammenhang mit der Darstellungstheorie der Drehalgebra allgemein gelöst. Es ist jedoch zu bemerken, daß im Falle des Bahndrehimpulsoperators aufgrund seiner besonderen durch Orts- und Impulsoperator gegebenen Form nur ganzzahlige Eigenwerte \mathbf{I}_z existieren. Deren Exponential liefern die Darstellungen der Faktorgruppe $SU(2)/\{1, -1\} \cong SO(3)$, also die irreduziblen TensorDarstellungen der Drehgruppe.

Zum Beweis bemerken wir nur, daß die verallgemeinerten Ortseigenzustände $|\vec{x}\rangle$ vollständig sind. Wir betrachten zunächst die Wirkung von \mathbf{I}_z auf $|0, 0, z\rangle$. Es gilt

$$\mathbf{I}_z |0, 0, z\rangle = (\mathbf{p}_y\mathbf{x} - \mathbf{p}_x\mathbf{y}) |0, 0, z\rangle, \quad (4.15)$$

wobei wir ausgenutzt haben, daß die fraglichen Orts- und Impulskomponenten kommutieren. Damit ist aber, weil die Bahndrehimpulseigenvektoren eine Orthonormalbasis des Hilbertraums zu festem Radialabstand sind:

$$0 = \mathbf{I}_z |0, 0, z\rangle = \sum_l \sum_{m=-l}^l m |r = |z|, l, m\rangle \langle r = |z|, l, m | 0, 0, z\rangle. \quad (4.16)$$

Die Matricelemente können wegen der linearen Unabhängigkeit der Drehimpulseigenvektoren aber nur dann von 0 verschieden sein, wenn $m = 0$ ist, und das kann wiederum nur der Fall sein, wenn l ganzzahlig ist. Einen beliebigen Ortseigenvektor erhält man nun aber aus $|0, 0, z\rangle$ durch Anwendung einer geeigneten Drehung $\mathbf{D}(\vec{n}, \alpha) = \exp[-i\vec{n}\vec{\mathbf{l}}\alpha]$. Da nun die $\vec{\mathbf{J}}$ den Radialbetrag und den Drehimpulsbetrag des Eigenvektors $|r, l, m\rangle$ nicht ändern, läßt sich jeder verallgemeinerte Ortseigenzustand durch die Basisvektoren der ganzzahligen Darstellung der Drehgruppe realisieren, d.h. es gilt

$$|\vec{x}\rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l ||\vec{x}||, l, m\rangle \langle ||\vec{x}||, l, m | \vec{x}\rangle. \quad (4.17)$$

Da die verallgemeinerten Ortseigenzustände im Sinne des Spektralsatzes vollständig sind, trifft dies auch für die $|r, l, m\rangle$ zu, wobei l nur die ganzzahligen und *keine* halbzahligen Werte durchläuft. Damit besitzt aber der Bahndrehimpulsoperator nur ganzzahlige Bahndrehimpulsbetragsquantenzahlen l , wie wir behauptet hatten.

Kehren wir nun zum Radialhamiltonoperator und dessen Eigenwertproblem zurück. Dazu gehen wir in die Ortsdarstellung. Dies ist in dem betrachteten Falle deshalb zweckmäßig, weil sich dann das Eigenwertproblem des Hamiltonoperators wegen der reinen Ortsabhängigkeit des Potentials (Lokalität im Ortsraum) auf ein Randwertproblem partieller Differentialgleichungen zurückführen läßt, das, wie aufgrund der Rotationssymmetrie sogleich gezeigt werden wird, in Randwertprobleme gewöhnlicher Differentialgleichungen reduziert werden kann. Es ist schon aufgrund dieser Symmetrie zweckmäßig, zu Kugelkoordinaten überzugehen.

Dies ist in der Ortsdarstellung ohne Probleme möglich, denn aufgrund der Betrachtungen in Kapitel 1 zur kanonischen Quantisierung haben wir gesehen, daß sich in der Ortsdarstellung die Wirkung des Impulsoperators auf die Wellenfunktion durch den Gradienten und die Wirkung des Ortsoperators durch die Multiplikation mit dem Argument der Wellenfunktion ergibt. Diese Wirkungen sind, wie dort ausführlich begründet, auf einem dichten Teilraum des Hilbertraums, dem Schwarzschen Raum, definiert.

Setzen wir nun für einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle$ für das Skalarprodukt mit dem verallgemeinerten Ortseigenvektor $\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$, so sind die Differentialoperatoren des Impulses und Drehimpulses wie folgt definiert

$$\vec{\mathbf{p}}\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \vec{\mathbf{p}} | \psi \rangle = -i\nabla\psi(x), \quad \vec{\mathbf{l}}\psi(x) = \langle \vec{r} | \vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{p}} | \psi \rangle = -i\vec{r} \times \nabla\psi(\vec{r}). \quad (4.18)$$

Mit (4.14) folgt aus (4.10)

$$\mathbf{H}_r = \left[\frac{(\vec{\mathbf{r}}\vec{\mathbf{p}})(\vec{\mathbf{p}}\vec{\mathbf{r}}) + 2i\vec{\mathbf{r}}\vec{\mathbf{p}}}{2\mu r^2} \right] + \frac{\vec{\mathbf{l}}^2}{2\mu r^2} + V(\mathbf{r}). \quad (4.19)$$

Dabei haben wir $\|\vec{\mathbf{r}}\| = r$ gesetzt. Es sei noch bemerkt, daß wegen der Vertauschbarkeit dieses skalaren Operators mit $\vec{\mathbf{l}}$ im mittleren Term (Zentrifugalterm) keine Operatorordnungsprobleme auftreten.

Durch Einsetzen von (4.18) und Übergang zu Kugelkoordinaten ergibt sich schließlich nach einfachen Umformungen:

$$\mathbf{H}_r\psi = -\frac{1}{2\mu r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \left[\frac{\vec{\mathbf{l}}^2}{2\mu r^2} + V(\mathbf{r}) \right] \psi. \quad (4.20)$$

Für den simultanen Eigenvektor $|\psi\rangle_{Elm}$ von Energie, Drehimpulsquadrat und \mathbf{l}_z folgt dann, daß sich dieser in der Ortsdarstellung als Produkt aus drei Funktionen schreiben läßt, die jeweils nur von einer der drei Kugelkoordinaten abhängen. Wir setzen die Funktion aber zunächst in der Form

$$\Psi_{Elm}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r} u_{El}(r) Y_l^m(\theta, \phi). \quad (4.21)$$

an. Aus den drei Eigenwertgleichungen

$$\mathbf{H}_r\psi_{Elm} = E\psi_{Elm}, \quad \vec{\mathbf{l}}^2\psi_{Elm} = l(l+1)\psi_{Elm}, \quad \mathbf{l}_z\psi_{Elm} = m\psi_{Elm} \quad (4.22)$$

folgt unter Anwendung von (4.20) und Division durch Y_l^m die Radialgleichung zur Bestimmung der Energieeigenwerte und der Radialwellenfunktionen u_{El} :

$$-\frac{1}{2\mu} \left(\frac{d}{dr} \right)^2 u_{El} + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} u_{El} + V(r)u_{El} = E u_{El}. \quad (4.23)$$

Da die Drehimpulsquadrateneigenwerte durch $l = 0, 1, \dots$ gegeben sind, kann für jeden dieser Werte die Radialgleichung gelöst werden. Dies ist die Energie-Eigenwertgleichung für ein Teilchen, das sich entlang der positiven reellen Achse $r \in (0, \infty)$ in einem effektiven Potential, das sich aus dem Zentrifugalterm und dem gegebenen äußeren Radialpotential V zusammensetzt, bewegt. Wir benötigen noch eine Randbedingung bei $r = 0$. Da der links stehende Operator auf $L^2(0, \infty)$ selbstadjungiert sein muß (es handelt sich ja um den Hamiltonoperator angewandt auf eine Funktion, die nur von r abhängt), muß

$$\lim_{r \rightarrow +0} u_{El}(r) = 0 \quad (4.24)$$

sein. Liegt E im diskreten Spektrum von \mathbf{H}_r , ergibt sich, daß u_{El} im Unendlichen verschwinden muß. Wir nehmen nun für ein realistisches Potential V an, daß es mindestens wie $1/r$ im Unendlichen verschwindet (wir nehmen o.B.d.A. an, das Potential sei gem. $V(r) \rightarrow 0$ für $r \rightarrow \infty$ normiert). Dann ergibt sich asymptotisch für große r :

$$\left(\frac{d}{dr}\right)^2 u = -2\mu E u \text{ für } r \rightarrow \infty, \quad (4.25)$$

wobei wir die Indizes El bei u der Kürze halber weggelassen haben. Damit folgt das asymptotische Verhalten

$$u(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\cong} C_1 \exp(\sqrt{-2\mu E}r) + C_2 \exp(-\sqrt{-2\mu E}r). \quad (4.26)$$

Daraus folgt, daß E nur dann ein echter Eigenwert sein, also zum diskreten Spektrum von \mathbf{H}_r gehören kann, wenn $E < 0$ ist. Dann folgt weiter, daß notwendig $C_1 = 0$ sein muß, also die Eigenfunktion exponentiell abfällt. Dann ist nämlich sicher $u \in L^2(0, \infty)$. Für $E > 0$ hingegen wird das Verhalten der Wellenfunktion im Unendlichen oszillatorisch, so daß die Wellenfunktionen nur noch auf δ -Distributionen normierbar, also verallgemeinerte Eigenfunktionen von \mathbf{H}_r sind. Da dies der Situation entspricht, daß das Quasiteilchen beliebig weit entfernt vom Streuzentrum eine asymptotisch nichtverschwindende Aufenthaltswahrscheinlichkeit besitzt, handelt es sich um *Streuzustände*. Der Energieeigenwert $E = 0$ erfordert vom Potential abhängige spezielle Untersuchungen, so daß wir hier keine weitere Aussage treffen können.

Jetzt können wir unter der weiteren Annahme, daß das Potential im schlimmsten Falle bei $r = 0$ wie $1/r$ singularär wird, auch Folgerungen für den Grenzfall $r \rightarrow 0$ treffen. Für $r \rightarrow 0$ und $l \neq 0$ folgt nämlich die asymptotische Gleichung

$$-\left(\frac{d}{dr}\right)^2 u + \frac{l(l+1)}{r^2} u = 0 \Rightarrow u(r) \cong C_1 r^{l+1} + C_2 r^{-l} \text{ für } r \rightarrow 0. \quad (4.27)$$

Wegen der oben hergeleiteten Randbedingung $u(r) \rightarrow 0$ für $r \rightarrow 0$ muß unabhängig davon, ob es sich um einen echten oder verallgemeinerten Energieeigenvektor handelt, $C_2 = 0$ sein. Für $l = 0$ läßt sich hier wieder keine allgemeine Aussage treffen, weil das Verhalten für $r \rightarrow 0$ wieder entscheidend vom Potential abhängt.

4.2 Der Winkelanteil der Eigenfunktionen

Bevor wir jedoch ein wichtiges konkretes Beispiel, nämlich das Coulombproblem, betrachten, wollen wir die Lösung für den Winkelanteil der Funktion angeben. Dieser ist vollständig durch das simultane Eigenwertproblem des Drehimpulsquadratoperators und \mathbf{I}_z bestimmt.

Wir rechnen zunächst diese Operatoren in Kugelkoordinaten um:

4.3 Das Coulombproblem

Das Coulombproblem ist physikalisch dadurch charakterisiert, daß sich zwei elektrisch geladene punktförmige Teilchen vom Spin 0 im sonst leeren Raum befinden. Es wird von Strahlungsphänomenen aufgrund der Beschleunigung der Teilchen abgesehen und die Wechselwirkung als rein elektrostatisch angenommen.

Die Ladungen seien von entgegengesetztem Vorzeichen und wir kürzen $q_1 q_2 / (4\pi) = -\alpha$ ab (wir verwenden im folgenden Heaviside-Lorentzeinheiten, also ein rationalisiertes Gaußsches Maßsystem mit $c = 1$), so daß das Relativpotential zu

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r} \quad (4.28)$$

gegeben ist. Die Radialgleichung lautet also

$$\left(\frac{d}{dr}\right)^2 u - \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\mu\alpha}{r} + 2\mu E\right] u = 0. \quad (4.29)$$

Führen wir jetzt die charakteristische Länge a durch $2\mu E = -1/(4a^2)$ und die dimensionslose Größe $n = 2\mu\alpha a$ ein. Mit $x = r/a$ geht die Radialgleichung in

$$u'' - \left[\frac{l(l+1)}{x^2} - \frac{n}{x} + \frac{1}{4}\right] u = 0. \quad (4.30)$$

Das oben hergeleitete Verhalten der Wellenfunktion für $x \rightarrow \infty$ und $x \rightarrow 0$ legt den Ansatz

$$u(x) = x^{l+1} \exp\left(-\frac{x}{2}\right) v(x) \quad (4.31)$$

nahe, und dies in (4.30) eingesetzt ergibt

$$xv'' + (2l + 2 - x)v' + (n - l - 1)v = 0. \quad (4.32)$$

Zur Berechnung der Eigenwerte und Eigenfunktionen gehen wir mit dem verallgemeinerten Potenzreihenansatz

$$v(x) = \sum_{k=0}^{\infty} v_k x^{k+\rho} \quad (4.33)$$

in die Differentialgleichung (4.32) ein, wobei wir $v_0 \neq 0$ annehmen dürfen, weil andernfalls durch eine Änderung von ρ dies stets erreichbar wäre. Der Koeffizientenvergleich, der sich aus der Differentialgleichung ergibt, liefert für ρ die Werte $\rho = 0$ oder $\rho = -(2l + 1)$. Da aber v bei $x = 0$ regulär sein muß, kommt nur $\rho = 0$ in Frage. Für die Koeffizienten v_k erhalten wir die Rekursionsformel

$$v_k = -\frac{n - l - k}{k(k + 2l + 1)} v_{k-1} \text{ für } k \geq 1. \quad (4.34)$$

Der Anfangswert v_0 dieser Rekursionsformel wird durch die Normierungsbedingung der Wellenfunktion bis auf eine unerhebliche Phase bestimmt. Aus dem Quotientenkriterium ergibt die Rekursionsformel, daß für den Fall, daß die Reihe nicht nach einer endlichen Potenz abbricht, daß die Reihe beständig konvergent ist.

Jetzt müssen wir das asymptotische Verhalten von v für $x \rightarrow \infty$ untersuchen. In diesem Fall sind die hohen Potenzen der Reihe maßgebend, und die Rekursionsformel ist asymptotisch für große k

$$v_k \cong \frac{v_{k-1}}{k} \text{ für } k \rightarrow \infty, \quad (4.35)$$

4.4 · Die Eigenfunktionen

so daß sich v asymptotisch wie $\exp x$ verhält, falls die Reihe nicht bei einer endlichen Potenz abbricht. Der Rekursionsformel (4.34) ist das dann und nur dann der Fall, wenn $n-l-1 \in \mathbb{N}$ ist, mit anderen Worten n ist ganzzahlig und $\geq l+1$. Die Definition des Parameters n im Anschluß an Gleichung (4.29) ergibt demnach für die Energieeigenwerte

$$E_n = -\frac{\mu\alpha^2}{2n^2}, \text{ mit } n = 1, 2, \dots \quad (4.36)$$

Die Energieeigenwerte sind also nicht nur unabhängig von der Quantenzahl m , sondern auch unabhängig von l . Zu festem l gibt es $2l+1$ mögliche Werte für m , nämlich $-l, -l+1, \dots, l$. Für die gegebene Hauptquantenzahl n kann l nach der eben durchgeführten Untersuchung der Radialgleichung die Werte $0, 1, \dots, n-1$ annehmen. Zu jedem Energieeigenwert E_n gibt es also

$$d_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (4.37)$$

zueinander orthonormale Eigenfunktionen $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = u(r)/r Y_l^m(\theta, \phi)$.

Es ist weiter aus den allgemeinen Ausführungen über Zentralkraftprobleme klar, daß sich an die diskreten Energieeigenwerte das Kontinuum $E \geq 0$ anschließt.

4.4 Die Eigenfunktionen

Jetzt beschäftigen wir uns mit den zu den Energieeigenwerten gehörigen (verallgemeinerten) Eigenfunktionen. Dazu betrachten wir erneut (4.32), schreiben sie aber jetzt in der Form

$$xv'' + (\gamma - x)v' - \alpha v = 0 \quad (4.38)$$

mit beliebigen komplexen Konstanten α und γ . Wie oben finden wir auch in diesem allgemeinen Fall eine beständig konvergente Potenzreihenentwicklung für die in $x=0$ reguläre Lösung

$$F(\alpha, \gamma, x) = 1 + \frac{\alpha x}{\gamma 1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)x^2}{\gamma(\gamma+1)2!} + \dots \quad (4.39)$$

Sie heißt konfluente hypergeometrische Funktion und ist für alle Paare (α, γ) außer für $\gamma = 0, -1, -2, \dots$ definiert. Falls $\alpha = 0, -1, -2, \dots$ ist, reduziert sie sich auf ein Polynom vom Grade $|\alpha|$.

Falls $\gamma \neq 1$ ist, ergibt sich durch den Potenzreihenansatz für $\rho = 1 - \gamma$ eine weitere dazu linear unabhängige Lösung der Differentialgleichung (4.39). Substituiert man in diese den Ansatz $v(x) = x^{1-\gamma}\tilde{v}(x)$ ergibt sich für \tilde{v} die Differentialgleichung

$$x\tilde{v}'' + (2 - \gamma - x)\tilde{v}' + [(\gamma - 1) - \alpha]\tilde{v} = 0, \quad (4.40)$$

die durch die konfluente hypergeometrische Funktion $F(\alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma, x)$ gelöst wird, so daß die allgemeine Lösung von (4.38) durch

$$v(x) = C_1 F(\alpha, \gamma, x) + C_2 x^{1-\gamma} F(\alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma, x) \quad (4.41)$$

mit willkürlichen Konstanten C_1 und C_2 gegeben ist, denn die beiden Funktionen sind linear unabhängig weil die eine in $x=0$ singulär ist und die andere nicht.

Wir können aber die Differentialgleichung (4.38) auch noch mit Hilfe der verallgemeinerten Laplacetransformation lösen. Dazu sei

$$v(x) = \int_C dz w(z) \exp(xz). \quad (4.42)$$

Dabei ist C ein später genauer zu spezifizierender Weg in der komplexen z -Ebene. Offenbar gilt

$$xv(x) = - \int_C dz w'(z) \exp(xz) + w(z) \exp(xz) \Big|_{z=c_0}^{c_1}, \quad v'(x) = \int_C dz z w(z) \exp(xz). \quad (4.43)$$

Dabei sind c_1 und c_2 Anfangs- bzw. Endpunkt des Weges C in der komplexen Ebene. Dies in (4.38) eingesetzt ergibt, wenn wir den Weg C so wählen, daß der integralfreie Teil verschwindet für w die Differentialgleichung

$$z(z-1)w' = [(\gamma-2)z + 1 - \alpha]w \quad (4.44)$$

mit der Lösung

$$w(z) = C \frac{(z-1)^{\gamma-\alpha-1}}{z^{1-\alpha}}, \quad (4.45)$$

wobei C eine Integrationskonstante bezeichnet. Damit ist wegen (4.42)

$$v(x) = C \int_C dz (z-1)^{\gamma-\alpha-1} z^{\alpha-1} \exp(xz). \quad (4.46)$$

Der Weg C in der komplexen Ebene ist dabei beliebig, sofern er nur die integralfreien Terme in der Laplace-Transformierten der Differentialgleichung (4.38) zum Verschwinden bringt, d.h. es muß gelten

$$z^\alpha (z-1)^{\gamma-\alpha} \exp(xz) \Big|_{z=c_1}^{z=c_2} = 0. \quad (4.47)$$

In entsprechender Weise erhalten wir auch eine Lösung für die Differentialgleichung (4.40), die aufgrund der oben durchgeführten Überlegungen eine weitere Lösung von (4.38) zur Folge haben:

$$v(x) = C x^{1-\gamma} \int dz \exp(xz) z^{\alpha-\gamma} (z-1)^\alpha. \quad (4.48)$$

Substitution von $t = xz$ ergibt schließlich die Form

$$v(x) = C \int_C dt \exp(t) t^{\alpha-\gamma} (t-x)^{-\alpha}, \quad (4.49)$$

wobei der Weg so zu wählen ist, daß

$$\exp(t) t^{\alpha-\gamma+1} (t-x)^{1-\alpha} \Big|_{t=t_1}^{t=t_2}. \quad (4.50)$$

Anhang A

Einige Spezielle Funktionen

Die Anwendung der Quantenmechanik auf physikalisch interessante Probleme läuft in den meisten Fällen auf die Lösung der Energie-Eigenwertgleichung in Form der Schrödingergleichung hinaus.

Da die Schrödingergleichung galileiinvariant ist, finden sich genügend Symmetrien, die es erlauben, das Eigenwertproblem des Hamiltonoperators auf die Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen zurückzuführen. Dies führt auf verschiedene in der mathematischen Physik überhaupt wichtige Funktionen, deren Analysis Gegenstand dieses umfangreichen Anhangs A ist.

An Vorkenntnissen werden dabei lediglich die Anfangsgründe der Funktionentheorie einer komplexen Variablen benötigt. Insbesondere wird immer wieder der Cauchysche Integralsatz, die Entwicklung in Taylor- und Laurentreihen und der Residuensatz zum Einsatz kommen.

A.1 Die Γ -Funktion

Als erstes benötigen wir bei Berechnungen von Integralen häufig die Γ -Funktion, die schon Euler und Gauß genauer untersucht haben. Sie stellt das klassische Beispiel für die “analytische Fortsetzung” einer für natürliche Zahlen definierten Funktion, nämlich der Fakultät, zu einer holomorphen Funktion dar.

Die Eulersche Darstellung ist durch das Integral

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} \exp(-t)t^{z-1} dt \quad (\text{A.1})$$

gegeben. Dabei ist für komplexe z

$$t^{z-1} = \exp[(z-1) \ln t], \quad (\text{A.2})$$

wobei der Logarithmus entlang der positiven reellen Achse reell definiert ist (Hauptzweig des Logarithmus). Wir zeigen im folgenden, daß das Integral bei Einschränkung von z auf vollständig in der rechten Halbebene gelegene kompakte Gebiete existiert und dort eine holomorphe Funktion definiert.

Dazu zerlegen wir das Integral:

$$\Gamma(z) = \int_0^1 \exp(-t)t^{z-1}dt + \int_1^\infty \exp(-t)t^{z-1}dt. \quad (\text{A.3})$$

Betrachten wir zunächst das zweite Integral

$$\omega(z) = \int_1^\infty \exp(-t)t^{z-1}dt : \quad (\text{A.4})$$

Für festes $t > 1$ ist der Integrand für alle $z \in \mathbb{C}$ eine holomorphe Funktion. Sei nun B ein kompaktes Gebiet der z -Ebene und $z = x + iy$ mit $x, y \in \mathbb{R}$. Da B kompakt ist, existiert

$$x_0 = \max_{z \in B} [\operatorname{Re} z]. \quad (\text{A.5})$$

Da weiter für $t \geq 1$ der Logarithmus nicht negativ ist, folgt

$$\forall z \in B : |\exp(-t)t^{z-1}| = |\exp[-t + (z-1)\ln t]| \leq \exp(-t)t^{x_0-1}. \quad (\text{A.6})$$

Weil das Integral

$$\int_1^\infty \exp(-t)t^{x_0-1}dt \quad (\text{A.7})$$

konvergiert, ist das nach dem Weierstraßschen Kriterium auch für (A.4) der Fall, und die Konvergenz ist sogar gleichmäßig in B .

Wir betrachten jetzt das erste Integral in (A.3):

$$\phi(z) = \int_0^1 \exp(-t)t^{z-1}dt. \quad (\text{A.8})$$

Der Betrag des Integranden ist $\exp(-t)t^{x-1}$, und für $x > 1$ existiert das Integral. Folglich ist (A.8) in der Halbebene $\operatorname{Re} z > 1$ holomorph. Wir behaupten, daß dies sogar in jedem kompakten Gebiet B , das vollständig in der rechten z -Halbebene liegt, der Fall ist. Wegen der Kompaktheit von B existiert

$$x_1 = \min_{z \in B} \operatorname{Re} z, \quad (\text{A.9})$$

und es gilt $x_1 > 0$. Für $0 < t \leq 1$ ist $\ln t \leq 0$, also

$$\forall z \in B : |\exp(-t)t^{z-1}| \leq \exp(-t)t^{x_1-1}. \quad (\text{A.10})$$

Da das Integral über die zuletzt stehende Funktion konvergiert, ist wieder nach dem Weierstraßschen Konvergenzkriterium (A.8) holomorph in B .

Da weiter B ein beliebiges kompaktes Gebiet in der rechten z -Halbebene sein darf, ist folglich durch (A.1) die Γ -Funktion in der ganzen rechten offenen Halbebene holomorph definiert.

A.1 · Die Γ -Funktion

Wir wollen diese Funktion nun analytisch fortsetzen. Dazu genügt die Betrachtung des Integrals (A.8), da (A.4) in der ganzen Ebene holomorph ist. Die Exponentialreihe

$$\exp(-t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-t)^n}{n!} \quad (\text{A.11})$$

konvergiert für $t \in \mathbb{R}$ gleichmäßig. Setzt man dies in (A.8) ein, folgt für $z \in \mathbb{C}$ mit $z > 0$:

$$\phi(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{1}{n+z}. \quad (\text{A.12})$$

Da die Reihe auf der rechten Seite dieser Gleichung in jedem Kompaktum der z -Ebene, das keine der Stellen $\{0; -1; -2; \dots\}$ enthält, gleichmäßig konvergiert, ist ϕ zu einer meromorphen Funktion mit einfachen Polen an diesen Stellen fortsetzbar. Diese Eigenschaften besitzt folglich auch die Γ -Funktion. Damit haben wir die Weierstraßsche Partialbruchentwicklung der Γ -Funktion gewonnen:

$$\Gamma(z) = \int_1^{\infty} \exp(-t)t^{z-1} dt + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{1}{n+z}. \quad (\text{A.13})$$

Wir verstehen im folgenden unter Γ diese meromorphe Funktion. Wir zeigen noch einige Eigenschaften der Γ -Funktion.

(A.1) läßt sich für $n \in \mathbb{N}$ elementar ausrechnen.

$$\Gamma(n+1) = n! \quad (\text{A.14})$$

Durch partielle Integration von (A.1), weist man für reelle positive z unmittelbar nach, daß

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \quad (\text{A.15})$$

ist. Da Γ meromorph ist, gilt das nach dem Satz von der analytischen Fortsetzung in jedem regulären Punkt.

Weiter gilt

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin(\pi z)}. \quad (\text{A.16})$$

Zum Beweis substituieren wir in (A.1) $t = u^2$ und setzen voraus, daß $z \in (0; 1)$:

$$\Gamma(z) = 2 \int_0^{\infty} \exp(-u^2)u^{2z-1} du. \quad (\text{A.17})$$

Ersetzt man hierin z durch $1-z$, folgt nach Umbenennung der Integrationsvariablen zu v :

$$\Gamma(1-z) = 2 \int_0^{\infty} \exp(-v^2)v^{1-2z} dv. \quad (\text{A.18})$$

Multiplikation von (A.17) mit (A.18) ergibt

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = 4 \int_0^\infty \int_0^\infty \exp(-u^2 - v^2) \left(\frac{u}{v}\right)^{2z-1} du dv. \quad (\text{A.19})$$

Dies lesen wir nun als Integral über den ersten Quadranten der uv -Ebene und führen ebene Polarkoordinaten ein:

$$\begin{aligned} \Gamma(z)\Gamma(1-z) &= 4 \int_0^\infty r dr \exp(-r^2) \int_0^{\pi/2} d\phi (\cot \phi)^{2z-1} = \\ &= 2 \int_0^{\pi/2} d\phi (\cot \phi)^{2z-1}. \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Zur Berechnung dieses Integrals substituieren wir $\phi = \operatorname{arccot}(\sqrt{x})$:

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \int_0^\infty \frac{x^{z-1}}{1+x} dx. \quad (\text{A.21})$$

Die Funktion

$$f(y) = \frac{(-y)^{z-1}}{1+y} \quad (\text{A.22})$$

besitzt in $y = 0$ einen Verzweigungspunkt. Wir schneiden die y -Ebene entlang der positiven reellen Achse auf und betrachten das Blatt der für irrationale z unendlichblättrigen Riemannfläche, für das

$$\lim_{\operatorname{Im} z \rightarrow \pm 0} (-y)^{z-1} = |y|^{z-1} \exp[\mp i\pi(z-1)] \quad (\text{A.23})$$

ist. Jetzt betrachten wir den folgenden auf diesem Blatt der Riemannschen Fläche gelegenen Integrationsweg:

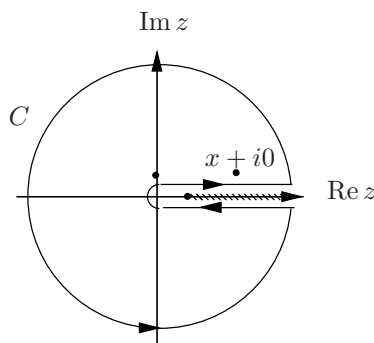


Abbildung A.1: Integrationsweg zur Berechnung von (A.21)

Der Radius des großen Kreises soll dabei beliebig groß, der des kleinen beliebig klein gedacht werden, so daß beide Kreise nicht zur Integration beitragen. Dann folgt

$$\int_C \frac{(-y)^{z-1}}{1+y} dy = 2i \sin(\pi z) \int_0^\infty \frac{x^{z-1}}{1+x} dx. \quad (\text{A.24})$$

Andererseits ergibt die Anwendung des Residuensatzes:

$$\int_C \frac{(-y)^{z-1}}{1+y} dy = 2\pi i \operatorname{Res}_{y=-1} \frac{(-y)^{z-1}}{1+y} = 2\pi i. \quad (\text{A.25})$$

Faßt man beide Ergebnisse zusammen, folgt mit (A.19) die Behauptung (A.16) für $z \in (0, 1)$, also wegen der Meromorphie der Γ -Funktion an jeder regulären Stelle.

Setzt man in (A.16) $z = 1/2$, folgt

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \int_0^\infty \sqrt{t} \exp(-t) dt = \sqrt{\pi}. \quad (\text{A.26})$$

Weiter benötigen wir im folgenden die Eulersche Betafunktion:

$$B(p; q) = \int_0^1 x^{p-1} (1-x)^{q-1} dx. \quad (\text{A.27})$$

Substituiert man darin $t = 1 - x$, findet man

$$B(p; q) = B(q; p). \quad (\text{A.28})$$

Partielle Integration zeigt, daß

$$B(p; q+1) = \frac{q}{p} B(p+1; q). \quad (\text{A.29})$$

Betrachtet man (A.17), folgt

$$\begin{aligned} \Gamma(p)\Gamma(q) &= 2 \int_0^\infty \int_0^\infty \exp(-u^2 - v^2) u^{2p-1} v^{2q-1} du dv = \\ &= 4 \int_0^\infty dr r^{2(p+q-1)} \int_0^{\pi/2} d\phi \exp(-r^2) \cos^{2p-1} \phi \sin^{2q-1} \phi, \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

wobei zum Schluß ebene Polarkoordinaten eingeführt wurden.

Substitution von $t = r^2$ ergibt

$$\begin{aligned} \Gamma(p)\Gamma(q) &= 2 \int_0^\infty \exp(-t) t^{p+q-1} dt \int_0^{\pi/2} \cos^{2p-1} \phi \sin^{2q-1} \phi d\phi = \\ &= 2\Gamma(p+q) \int_0^{\pi/2} \cos^{2p-1} \phi \sin^{2q-1} \phi. \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Substituieren wir im verbleibenden Integral $x = \cos^2 \phi$, finden wir, daß es den Wert $B(p; q)/2$ besitzt. Damit haben wir

$$B(p; q) = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)}. \quad (\text{A.32})$$

Als nächstes wollen wir zeigen, daß die Γ -Funktion die folgende auf Gauß zurückgehende Produktdarstellung besitzt:

$$\frac{1}{\Gamma(z)} = z \exp(\gamma z) \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 + \frac{z}{k}\right) \exp\left(-\frac{z}{k}\right) \quad (\text{A.33})$$

mit $\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\sum_{k=1}^n \frac{1}{k} - \ln n\right)$.

γ heißt Euler-Mascheronische Konstante.

Zum Beweis benutzen wir die folgende Darstellung der Exponentialfunktion

$$\exp(-t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{t}{n}\right)^n \quad (\text{A.34})$$

und definieren die Funktionenfolge

$$P_n(z) = \int_0^n \left(1 - \frac{t}{n}\right)^n t^{z-1} dt. \quad (\text{A.35})$$

Eine naive Betrachtung der Definition legt nämlich nahe, daß diese Funktionenfolge punktweise gegen die Γ -Funktion konvergiert. Wir wollen zeigen, daß dies sogar im Sinne von gleichmäßiger Konvergenz der Fall ist. Zunächst zeigen wir aber, daß wir dann auch schon die Behauptung bewiesen haben.

Substituieren wir in nämlich in (A.35) $t = n\tau$, finden wir

$$\begin{aligned} P_n(z) &= n^z \int_0^1 (1 - \tau)^n \tau^{z-1} d\tau = n^z B(z; n+1) = \\ &= n^z \frac{\Gamma(z)\Gamma(n+1)}{\Gamma(z+n+1)} = \frac{n^z \Gamma(z) n!}{(z+n)(z+n-1) \dots z \Gamma(z)}. \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

Dabei haben wir die oben hergeleiteten Eigenschaften der B-Funktion sowie die Funktioneigenschaft (A.15) der Γ -Funktion benutzt. Es ergibt sich schließlich:

$$P_n(z) = \frac{n^z}{(z+n)(z+n-1) \dots z} \quad (\text{A.37})$$

Dieses Resultat formen wir noch wie folgt um:

$$\begin{aligned} \frac{1}{P_n(z)} &= \frac{\exp[z(1 + 1/2 + \dots + 1/n - \ln n)]}{\exp[z(1 + 1/2 + \dots + 1/n)]} z \frac{z+1}{1} \dots \frac{z+n}{n} = \\ &= z \exp[z(1 + 1/2 + \dots + 1/n - \ln n)] \times \\ &\quad \times \prod_{k=1}^n \left(1 + \frac{z}{k}\right) \exp\left(-\frac{z}{k}\right). \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

Das heißt in der Tat, daß die glm. Konvergenz der Funktionenfolge P_n gegen Γ die Gaußsche Produktdarstellung beweist.

Wegen des Prinzips von der analytischen Fortsetzung genügt es dabei, letzteres für reelle positive z zu zeigen. Durch Differenzieren nach t weist man sofort nach, daß

$$1 - \left(1 - \frac{t}{n}\right) \exp t = \int_0^t \frac{v}{n} \left(1 - \frac{v}{n}\right)^{n-1} \exp v \, dv \quad (\text{A.39})$$

ist. Für $0 < t < n$ ist der Integrand positiv. Andererseits gilt

$$\int_0^t \frac{v}{n} \left(1 - \frac{v}{n}\right)^{n-1} \exp v \, dv < \int_0^n \frac{v}{n} \exp t \, dv = \frac{t^2}{2n} \exp t. \quad (\text{A.40})$$

Damit folgt

$$0 \leq \exp(-t) - \left(1 - \frac{t}{n}\right)^n < \frac{t^2}{2n}. \quad (\text{A.41})$$

Nach der Integraldefinition der Γ -Funktion (A.1) gilt

$$\Gamma(z) - P_n(z) = \int_0^n \left[\exp(-t) - \left(1 - \frac{t}{n}\right)^n \right] t^{z-1} dt + \int_n^\infty \exp(-t) t^{z-1} dt. \quad (\text{A.42})$$

Wir haben schon oben im Zusammenhang mit (A.1) gesehen, daß das zweite Integral für $n \rightarrow \infty$ gleichmäßig gegen 0 konvergiert. Aus der eben hergeleiteten Ungleichung folgt für $n_0 \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \int_0^n \left[\exp(-t) - \left(1 - \frac{t}{n}\right)^n \right] t^{z-1} dt \leq \\ &\leq \int_0^{n_0} \left[\exp(-t) - \left(1 - \frac{t}{n}\right)^n \right] t^{z-1} dt + \int_{n_0}^n \exp(-t) t^{z-1} dt \leq \\ &\leq \int_0^n \frac{t^{z+1}}{2n} dt + \int_{n_0}^\infty \exp(-t) t^{z-1} dt. \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

Sei nun $\epsilon > 0$. Wegen der gleichmäßigen Konvergenz des letzten Integrals können wir n_0 so groß wählen, daß

$$\int_{n_0}^\infty \exp(-t) t^{z-1} dt < \frac{\epsilon}{2} \quad (\text{A.44})$$

wird. Damit haben wir für $n > n_0$ unter nochmaliger Verwendung der oben hergeleiteten Ungleichung:

$$0 \leq \int_0^n \left[\exp(-t) - \left(1 - \frac{t}{n}\right)^n \right] t^{z-1} dt < \int_0^{n_0} \frac{t^{z+1}}{2n} dt + \frac{\epsilon}{2} = \frac{1}{z+2} \frac{n_0^{z+2}}{n} + \frac{\epsilon}{2}. \quad (\text{A.45})$$

Daraus liest man unmittelbar ab, daß das Integral auf jedem kompakten positiv reellen Intervall gleichmäßig konvergent ist. Damit ist die Gaußsche Produktdarstellung für die Γ -Funktion bewiesen.

Bilden wir jetzt von dieser Produktdarstellung den Logarithmus, folgt

$$-\ln[\Gamma(z)] = \gamma z + \ln z + \sum_{k=1}^{\infty} \left[-\frac{z}{k} + \ln \left(1 + \frac{z}{k}\right) \right]. \quad (\text{A.46})$$

Leitet man diese Gleichung gliedweise nach z ab, ergibt sich

$$\Psi_1(z) := \frac{d}{dz} \ln[\Gamma(z)] = -\gamma - \frac{1}{z} + z \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k(z+k)} \quad (\text{A.47})$$

Da die Reihe auf jedem Kompaktum, das keine negative ganze Zahl enthält, gleichmäßig konvergiert, stellt sie tatsächlich die logarithmische Ableitung der Γ -Funktion dar.

Jetzt können wir die für die dimensionale Regularisierung wichtige Laurententwicklung der Γ -Funktion um die Pole bei $z \in \mathbb{Z}_0^-$ herleiten. Dabei genügt die Entwicklung bis zu Gliedern erster Ordnung:

$$\forall n \in \mathbb{N} : \Gamma(-n + \epsilon) = \frac{(-1)^n}{n!} \left[\frac{1}{\epsilon} + \Psi_1(n+1) + O(\epsilon) \right]. \quad (\text{A.48})$$

Zum Beweis bemerken wir, daß wegen (A.47)

$$\Psi_1(1) = -\gamma - 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k(k+1)} = -\gamma \quad (\text{A.49})$$

ist. Aus der Funktionalgleichung der Γ -Funktion (A.15) folgt

$$\Psi_1(z+1) = \frac{d}{dz} \ln[\Gamma(z+1)] = \frac{1}{z} + \Psi_1(z). \quad (\text{A.50})$$

Durch vollständige Induktion beweist man damit sofort:

$$\forall n \geq 1 : \Psi_1(n+1) = -\gamma + \sum_{k=1}^n \frac{1}{k}. \quad (\text{A.51})$$

Jetzt betrachten wir die Taylorentwicklung der Γ -Funktion um 1:

$$\Gamma(1 + \epsilon) = 1 + \epsilon \Gamma'(1) + O(\epsilon^2) = 1 + \epsilon \Psi_1(1) + O(\epsilon^2) \quad (\text{A.52})$$

Dies gilt zumindest im Inneren eines Kreises vom Radius 1 um $\epsilon = 0$, weil die nächstgelegene Polstelle der Γ -Funktion bei $\epsilon = -1$ liegt. Division dieser Gleichung durch ϵ ergibt:

$$\Gamma(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon} \Gamma(1 + \epsilon) = \frac{1}{\epsilon} - \gamma + O(\epsilon). \quad (\text{A.53})$$

Das ist (A.48) für $n = 0$. Für alle weiteren natürlichen n folgt diese Gleichung nunmehr durch vollständige Induktion: Sei die Behauptung für $n=k$ wahr. Dann folgt mit Hilfe der Funktionaleigenschaft (A.15):

$$\Gamma[-(k+1) + \epsilon] = \frac{\Gamma(-k + \epsilon)}{-(k+1) + \epsilon} = \frac{(-1)^{k+1}}{(k+1)!} \left[\frac{1}{\epsilon} + \Psi_1(k+1) + \frac{1}{k+1} + O(\epsilon) \right]. \quad (\text{A.54})$$

Aus (A.48) sehen wir, daß dies die Behauptung für $n=k+1$ ist.

A.2 Die konfluenten hypergeometrischen Funktionen

Die in diesem Abschnitt betrachteten *konfluenten hypergeometrischen Funktionen* werden in der mathematischen Physik häufig benötigt, so auch bei der Behandlung des Eigenwertproblems für das Wasserstoffatom. Gleichzeitig stellt die Untersuchung dieser Funktionen ein Musterbeispiel für die Analysis der linearen gewöhnlichen Differentialgleichungen dar.

Die konfluenten hypergeometrischen Funktionen werden als die im Ursprung analytische Lösung der Differentialgleichung

$$xv''(x) + (\gamma - x)v'(x) - \alpha v(x) = 0 \quad (\text{A.55})$$

mit der Normierungsbedingung $v(0) = 1$ definiert. Wir werden sogleich zeigen, daß diese Forderungen an die Lösung diese Funktionen eindeutig bestimmen. Hierin bedeuten α und γ beliebige komplexe Parameter.

Differentialgleichung ist linear mit Koeffizienten, die Polynome in x sind, gehört somit also zur sog. *Fuchs'schen Klasse* linearer Differentialgleichungen. Es liegt bei dieser Form der Differentialgleichungen nahe, die Lösung als verallgemeinerte Potenzreihe anzusetzen:

$$v(x) = \sum_{k=0}^{\infty} v_k x^{k+\rho}, \quad (\text{A.56})$$

wobei ρ eine im folgenden zu bestimmende Konstante ist. Es kann o.B.d.A. verlangt werden, daß $v_0 \neq 0$ ist, weil andernfalls durch Änderung von ρ eine Ummumerierung der Koeffizienten zu erreichen ist, so daß diese Annahme erfüllt ist.

Einsetzen dieses Ansatzes in die Differentialgleichung A.55 ergibt

$$\rho(\rho + \gamma - 1) = 0, \quad k(k - 1 + \gamma)v_k = (k + \alpha - 1)v_{k-1}. \quad (\text{A.57})$$

Gehen wir davon aus, daß $1 - \gamma$ keine natürliche Zahl ist, ist die in $x = 0$ reguläre Lösung für $\rho = 0$ gegeben. Die Rekursionsformel für die Koeffizienten v_k ergibt zusammen mit $v_0 = 1$ die Potenzreihe für die *konfluenten hypergeometrischen Funktionen*:

$$F(\alpha, \gamma, x) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma}x + \frac{\alpha(\alpha + 1)}{\gamma(\gamma + 1)}\frac{x^2}{2!} + \dots \quad (\text{A.58})$$

Wir bemerken, daß diese Reihe stets beständig konvergent ist, falls nicht γ negativ ganzzahlig oder 0 ist. Ist α negativ ganzzahlig oder 0, so handelt es sich um ein Polynom.

Falls $\gamma \neq 1$, ergibt sich für $\rho = 1 - \gamma$ eine dazu linear unabhängige Lösung der Differentialgleichung (A.55), weil sie in $x = 0$ i.a. eine Singularität besitzt. Setzen wir $v(x) = x^{1-\gamma}\tilde{v}(x)$ führt Einsetzen in (A.55) für \tilde{v}

$$x\tilde{v}''(x) + (2 - \gamma - x)\tilde{v}'(x) + [\gamma - \alpha - 1]\tilde{v} = 0. \quad (\text{A.59})$$

Diese Gleichung ist aber wieder von der Form (A.55), so daß wir die allgemeine Lösung sofort angeben können:

$$v(x) = C_1 F(\alpha, \gamma, x) + C_2 x^{1-\gamma} F(\alpha - \gamma, 2 - \gamma, x). \quad (\text{A.60})$$

Damit ist aber gezeigt, daß die konfluente hypergeometrische Funktion durch die oben gestellte Forderung, daß sie die in $x = 0$ analytische Lösung der Gleichung (A.55) mit $F(\alpha, \gamma, 0) = 1$ ist, mit Ausnahme ganzzahliger γ bereits eindeutig bestimmt ist.

Für die weitere Untersuchung dieser Funktionen, auch für ganzzahlige γ , ist es allerdings bequemer, mit Integraldarstellungen der Funktion als mit den soeben ausgerechneten Potenzreihen zu arbeiten.

Dies gelingt mit Hilfe der Methode der *verallgemeinerten Laplacetransformationen*. Dazu setzen wir an

$$v(x) = \int_{\mathcal{C}} dt w(t) \exp(tx), \quad (\text{A.61})$$

wobei \mathcal{C} ein im folgenden noch genauer zu spezifizierender Weg in der komplexen t -Ebene ist. Mit Hilfe einer partiellen Integration zeigt man leicht, daß

$$xv(x) = w(t) \exp(xt) \Big|_{t=t_1}^{t=t_2} - \int_{\mathcal{C}} dt w'(t) \exp(xt), \quad (\text{A.62})$$

wobei, wie in der Integralrechnung üblich, $f(t) \Big|_{t=a}^{t=b} = f(b) - f(a)$ bedeutet. t_1 und t_2 sind dabei Anfangs- und Endpunkt des Weges \mathcal{C} .

Wendet man diese Gleichung beim Einsetzen von (A.61) in (A.55) an, finden wir sicher eine Lösung, wenn wir den Integranden sowie die integralfreien Terme zum Verschwinden bringen, also

$$t(t-1)w \exp(xt) \Big|_{t=t_1}^{t=t_2} = 0, \quad t(t-1)w'(t) = [(\gamma-2)t - \alpha + 1]w(t) \quad (\text{A.63})$$

verlangen. Die Differentialgleichung für w ist durch Trennung der Variablen sofort lösbar:

$$w(t) = C \frac{(t-1)^{\gamma-\alpha-1}}{t^{1-\alpha}}, \quad (\text{A.64})$$

wobei der Integrationsweg \mathcal{C} in der komplexen t -Ebene so zu wählen ist, daß die Bedingung in (A.63) erfüllt ist, d.h.

$$t^\alpha(t-1)^{\gamma-\alpha} \exp(tx) \Big|_{t=t_1}^{t=t_2} = 0. \quad (\text{A.65})$$

Gemäß unserem Ansatz (A.61) ist dann die Lösung der Differentialgleichung (A.55) vermöge

$$v(x) = C \int_{\mathcal{C}} dt (t-1)^{\gamma-\alpha-1} t^{\alpha-1} \exp(tz) \quad (\text{A.66})$$

als Wegintegral in der komplexen t -Ebene darstellbar.

Entsprechend können wir mit (A.59) verfahren, so daß wir auch durch

$$v(x) = C x^{1-\gamma} \int_{\mathcal{C}} dt \exp(tx) t^{\alpha-\gamma} (t-1)^{-\alpha}, \quad (\text{A.67})$$

wobei der Weg \mathcal{C} so gewählt werden muß, daß gemäß (A.63) die Bedingung

$$t^{\alpha-\gamma+1} (t-1)^{1-\alpha} \Big|_{t=t_1}^{t=t_2} \quad (\text{A.68})$$

erfüllt ist. Eine andere im folgenden oft verwendete Form dieses Integrals entsteht durch Substitution von $t' = tx$:

$$v(x) = C \int_{\mathcal{C}} dt \exp(t) t^{\alpha-\gamma} (t-x)^{-\alpha}. \quad (\text{A.69})$$

Dabei ist gemäß (A.68) \mathcal{C} so zu wählen, daß

$$t^{\alpha-\gamma+1} (t-x)^{1-\alpha} \Big|_{t=t_1}^{t=t_2} = 0 \quad (\text{A.70})$$

gilt.

Für allgemeine komplexe α und γ hat der Integrand in $t = 0$ sowie in $t = x$ wesentlich singuläre Punkte. Wir wählen nun den Integrationsweg wie in Abbildung (A.2).

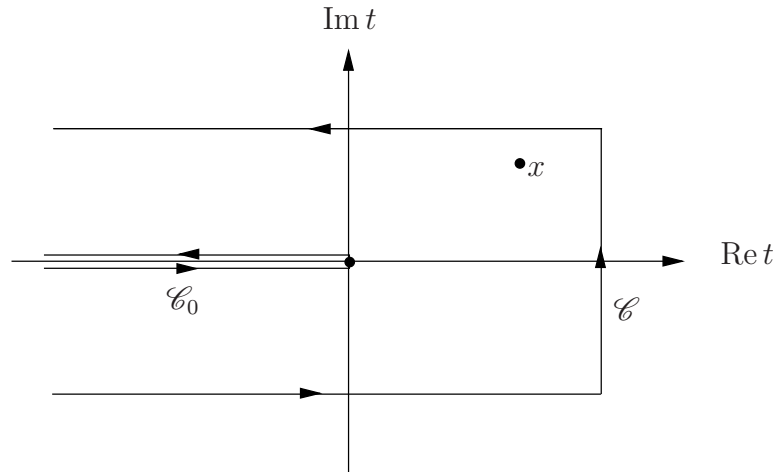


Abbildung A.2: Wahl des Weges \mathcal{C} für das Integral (A.69), \mathcal{C}_0 für den speziellen Fall $x = 0$

Dabei wählen wir die Schnitte für die Potenzfunktionen parallel zur negativen reellen Achse. Das Argument der Potenzen wird möglichst klein gewählt. Bei dieser Wahl des Weges ist die Funktion in $x = 0$ analytisch, so daß sie als Lösung von (A.55) bis auf einen Faktor mit der konfluenten hypergeometrischen Funktion übereinstimmt.

Für $x = 0$ fallen die wesentlichen Singularitäten des Integranden in 0 zusammen, und wir können den in Abb. A.2 ebenfalls eingezeichneten Integrationsweg \mathcal{C}_1 wählen. Dann ist entlang des Schnittes $t \in \mathbb{R}_{<0}$:

$$(t \pm i0)^{-\gamma} = |t|^{-\gamma} \exp(\mp \gamma i \pi), \quad (\text{A.71})$$

und eine einfache Rechnung liefert unter Verwendung der Integraldarstellung (A.1) und (A.16) für die Γ -Funktion

$$v(0) = C \frac{2\pi i}{\Gamma(\gamma)}. \quad (\text{A.72})$$

Normieren wir die Funktion nun in $x = 0$ auf 1, erhalten wir also die Darstellung der konfluenten

hypergeometrischen Funktion

$$F(\alpha, \gamma, x) = \frac{\Gamma(\gamma)}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}} dt \exp(t) t^{\alpha-\gamma} (t-x)^{-\alpha}. \quad (\text{A.73})$$

Dabei ist das Argument der auftretenden Potenzen möglichst klein zu wählen, wobi der Schnitt in der komplexen t -Ebene parallel zur negativ reellen Achse bzw. im Bereich $\text{Re } t < \text{Re } x$ verläuft und der Integrationsweg \mathcal{C} in Abb. A.2 gegeben ist.

Aus dieser Darstellung leiten wir durch Substitution $t' = t + z$ in das Integral für $F(\gamma - \alpha, \gamma, -z)$ die wichtige Beziehung

$$F(\gamma - \alpha, \gamma, -z) = \exp(-z) F(\alpha, \gamma, z). \quad (\text{A.74})$$

Für die Darstellung (A.67) erfüllt im Fall $\text{Re}(\gamma - \alpha) > 0$ der in Abb. A.3 gezeichnete Weg \mathcal{C} die Bedingung (A.69), die sicherstellt, daß wir tatsächlich eine in $x = 0$ reguläre Lösung von (A.55) erhalten. Wir definieren den Faktor C noch ein wenig anders (dies erleichtert lediglich die Wahl des Riemannblattes für die Potenzen im Integranden):

$$v(x) = C \int_{\mathcal{C}} dt (1-t)^{\gamma-\alpha-1} (-t)^{\alpha-1} \exp(xt). \quad (\text{A.75})$$

Dann können wir den Schnitt für $(-t)^{\alpha-1}$ entlang des reellen Intervalls $t \in (0, 1)^1$ wählen, und \mathcal{C} in den auch in Abb. A.3 eingezeichneten Weg \mathcal{C}_0 , der den Schnitt oben und unten umgeht, deformieren.

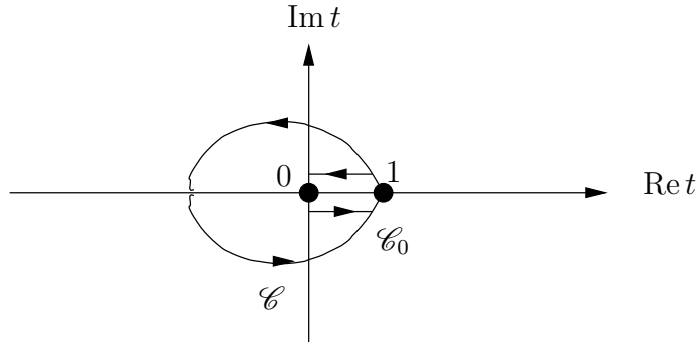


Abbildung A.3: Wahl des Weges \mathcal{C} in (A.75), der in den Weg \mathcal{C}_0 entlang des Schnittes zwischen $t = 0$ und $t = 1$ deformiert werden kann.

Der Normierungsfaktor läßt sich wieder geschlossen integrieren. Entlang des Weges \mathcal{C}_0 definieren wir das Riemannblatt wieder gemäß der Regel, das kleinstmögliche Argument von $-t$ zu nehmen:

$$(-t \pm i\epsilon)^{\alpha-1} = |t|^{\alpha-1} \exp[\mp i\pi(\alpha-1)]. \quad (\text{A.76})$$

Dann finden wir unter Verwendung von (A.27), (A.32) und schließlich (A.16):

$$v(0) = -2\pi i C \frac{\Gamma(\gamma - \alpha)}{\Gamma(\gamma)\Gamma(1 - \alpha)}, \quad (\text{A.77})$$

¹Der Schnitt geht natürlich noch für $t > 1$ weiter, was aber für den eingezeichneten Integrationsweg irrelevant ist.

und folglich nach Normierung die Darstellung

$$F(\alpha, \gamma, x) = -\frac{1}{2\pi i} \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(1-\alpha)}{\Gamma(\gamma-\alpha)} \int_{\mathcal{C}} dt \exp(tx)(1-t)^{\gamma-\alpha-1}(-t)^{\alpha-1} \quad (\text{A.78})$$

für die konfluente hypergeometrische Funktion.

Aus der Reihendarstellung (A.58) lesen wir unmittelbar ab, daß für $\alpha = -n$ mit $n \in \mathbb{N}^*$ ein Polynom ist. Aus unserer Integraldarstellung (A.78) ergibt sich für diese Polynome durch die Substitution $t = 1 - t'/z$

$$F(-n, \gamma, z) = \frac{1}{2\pi i} \frac{n!\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma+n)} \int_{\mathcal{C}'} dt' \left(\frac{1}{z}\right)^{\gamma-1} \frac{t'^{\gamma+n-1} \exp(-t')}{(t'-z)^{n+1}} \exp z, \quad (\text{A.79})$$

und mit Hilfe des Residuensatzes finden wir die Darstellung

$$F(-n, \gamma, z) = \frac{\Gamma(\gamma)z^{1-\gamma}}{\Gamma(\gamma+n)} \exp z \frac{d^n}{dz^n} [z^{n+\gamma-1} \exp(-z)]. \quad (\text{A.80})$$

Ist zusätzlich auch noch $\gamma = m \in \mathbb{N}^*$ leiten wir mit Hilfe der Substitution $t' = t - z$ in (A.73) für die Polynome die Gleichung

$$F(-n, m, z) = \frac{(-1)^{m+1}(m-1)!}{(m+n-1)!} \exp(z) \frac{d^{m+n-1}}{dz^{m+n-1}} [z^n \exp(-z)] \quad (\text{A.81})$$

her.

Diese Polynome hängen für $0 \leq m \leq n$ mit den zugeordneten *Laguerre-Polynomen* wie folgt zusammen:

$$L_n^m(z) = (-1)^m \frac{(n!)^2}{(n-m)!m!} F(m-n, m+1, z) = \frac{n!(-1)^m}{(n-m)!} z^{-m} \exp z \frac{d^{n-m}}{dz^{n-m}} [z^n \exp(-z)]. \quad (\text{A.82})$$

Dabei haben wir (A.81) und die Leibnizsche Produktregel der Differentialrechnung angewendet. Speziell für $m = 0$ ergeben sich daraus die *Laguerre-Polynome*:

$$L_n(z) = \frac{n!}{(n-m)!} \exp z \frac{d^n}{dz^n} \exp(-z). \quad (\text{A.83})$$

Wir wenden uns nun der *asymptotischen Entwicklung für große $|x|$* zu. In der Quantenmechanik ist dies von besonderem Interesse, da das korrekte Verhalten der Wellenfunktionen im Unendlichen zur Bestimmung der Energie-Eigenzustände notwendig ist.

Hierzu betrachten wir Abb. (A.4), in der nochmals der Weg \mathcal{C} in der Integraldarstellung (A.73). Diesen Weg können wir aber in die Summe der Wege \mathcal{C}_1 und \mathcal{C}_2 deformieren. Dann schreiben wir

$$F(\alpha, \gamma, z) = \frac{(-z)^{-\alpha}\Gamma(\gamma)}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}_1+\mathcal{C}_2} dt \exp(t)t^{\alpha-\gamma} \left(1 - \frac{t}{z}\right)^{-\alpha}, \quad (\text{A.84})$$

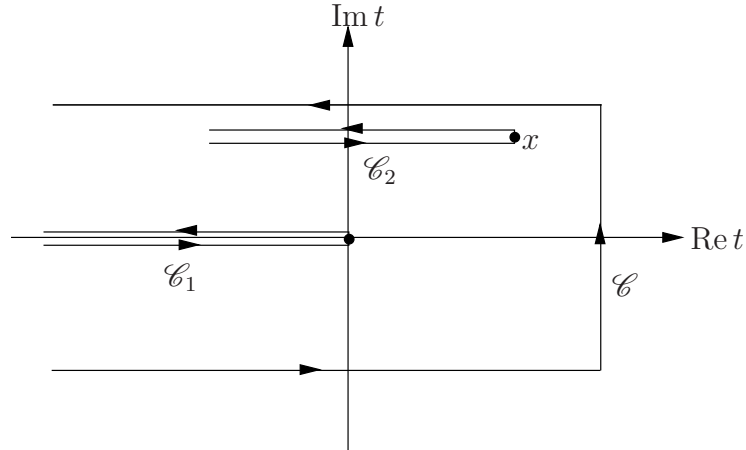


Abbildung A.4: Zur asymptotischen Entwicklung der konfluenten hypergeometrischen Funktionen

wobei wieder der Schnitt für $(-z)^\alpha$ entlang der positiv reellen Achse zu führen und das kleinste Argument für z zu wählen ist, wie es auch bei dem Integral (A.73) schon definiert worden ist. Im Integral über \mathcal{C}_2 substituieren wir $t' = t - z$, so daß der Weg für t' in \mathcal{C}_1 übergeht. Dann ist nämlich

$$\int_{\mathcal{C}_2} dt \exp(t) t^{\alpha-\gamma} (t-z)^{-\alpha} = \exp(z) \int_{\mathcal{C}_1} dt' \exp(t') (t'+z)^{\alpha-\gamma} t'^{-\alpha}. \quad (\text{A.85})$$

Definieren wir also die Funktion

$$G(\alpha, \beta, z) = \frac{\Gamma(1-\beta)}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}_1} dt \left(1 + \frac{t}{z}\right)^{-\alpha} t^{\beta-1} \exp(t), \quad (\text{A.86})$$

können wir schreiben

$$F(\alpha, \gamma, z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha-\gamma)} G(\alpha, \alpha-\gamma+1, -z) (-z)^\alpha + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} G(\gamma-\alpha, 1-\alpha, z) z^{\alpha-\gamma}. \quad (\text{A.87})$$

Die asymptotische Entwicklung von F für große $|z|$ ergibt sich nun daraus durch Anwendung der verallgemeinerten binomischen Formel

$$\left(1 + \frac{t}{z}\right)^{-\alpha} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(1-\alpha)}{\Gamma(1-\alpha-k)k!} \left(\frac{t}{z}\right)^k \quad (\text{A.88})$$

in (A.86). Dazu bedienen wir uns der schon weiter oben in der Gestalt (A.72) hergeleiteten Formel

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}_1} dt \exp(t) t^{-\gamma} = \frac{1}{\Gamma(\gamma)}. \quad (\text{A.89})$$

Nach kleineren Algebraischen Umformungen folgt daraus die asymptotische Entwicklung von G :

$$G(\alpha, \beta, z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{\Gamma(1-\alpha)}{\Gamma(1-\alpha-k)} \frac{\Gamma(1-\beta)}{\Gamma(1-\beta-k)} \left(\frac{1}{z}\right)^k. \quad (\text{A.90})$$