

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	i
1 Einführung	1
2 Grundlagen	5
2.1 Die Sprache der Physik	5
2.2 Klassische Mechanik	6
2.3 Quantenmechanik	8
2.4 Die lineare Welt – ein Gedankenspiel	12
2.5 Mathematische Vorbereitungen	15
2.5.1 Komplexe Zahlen	16
2.5.2 Potenzreihen	18
2.5.3 Vektoren	21
2.5.4 Matrizen	24
2.5.5 Die Deltafunktion	27
2.5.6 Lineare Differentialgleichungen	28
2.6 Lösungen der Übungsaufgaben	30
3 Lineare Räume und lineare Operatoren	33
3.1 Der Hilbert-Raum	33
3.1.1 Basisdarstellung	37
3.1.2 Der Dualraum	40
3.1.3 Die Dirac-Notation	41

berechnen. Damit liefert die Quantenmechanik eine Theorie zur Berechnung von Wahrscheinlichkeiten für Ereignisse der Quantenwelt. Einige Grundbegriffe für den Umgang mit Wahrscheinlichkeiten sind deshalb notwendig. Man findet sie in Anhang A.1.

Das wäre im Großen und Ganzen die Grundidee unserer linearen Welt. Um mehr darüber zu erfahren, sollten wir die passenden mathematischen Werkzeuge zur Verfügung haben. Wir müssen mehr über komplexe lineare Räume mit einem Skalarprodukt wissen und uns mit linearen Operatoren vertraut machen. Aber der Aufwand lohnt sich, denn die lineare Welt, die wir in unserem Gedanken-spiel konstruiert haben, beschreibt *tatsächlich* die real existierende Quantenwelt. Die nächsten Kapitel werden also (fast) rein mathematische Fragen behandeln. Danach kommen wir zur Quantenphysik zurück und werden die oben nur angeschnittenen Ansätze wieder aufgreifen.

2.5 Mathematische Vorbereitungen

Beginnen wir mit den mathematischen Vorkenntnissen. Wir wollen Mathematik einsetzen, also sollten wir uns auf eine Basis einigen, auf der wir aufbauen können. Aus der Schulmathematik benötigen wir eine ganze Menge (und eventuell schon über den Schulstoff hinaus): Wir sollten mit komplexen Zahlen und mit Vektoren im zwei- und dreidimensionalen Raum umgehen können, das Skalarprodukt kennen und wissen, was eine Matrix ist. Hier ein kleiner Test:

Aufgabe 2.1 (a) Die komplexen Zahlen $z = ue^{i\varphi} + ve^{-i\varphi}$ (u, v, φ reell) mit festem $u > v > 0$ und $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ liegen auf einer geschlossenen Kurve in der Zahlenebene. Ist das eine Ellipse? (Hier hilft die Euler-Formel.)

(b) Der Vektor $\vec{a} = (1, 1, 2)$ ist gegeben. Konstruieren Sie zwei Vektoren \vec{b} und \vec{c} , die orthogonal zu \vec{a} und zueinander sind.

(c) Überprüfen Sie die Kommutativität der Matrixmultiplikation für die Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 5 \end{pmatrix}.$$

(d) Berechnen Sie das Integral $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} \delta(x) dx$.

(e) Bestimmen Sie die allgemeine Lösung der Differentialgleichung

$$y''(x) + y(x) = 0.$$

Wenn Sie die Fragen aus der Aufgabe ohne großes Nachdenken bewältigen konnten, dann dürfen Sie direkt zu Kapitel 3 springen. Wenn nicht, dann möchten

2.5.3 Vektoren

Die meisten Leser haben sicherlich die Vektoren im dreidimensionalen Raum kennengelernt. Diese Vektoren, darstellbar als gerichtete Größen, werden beispielsweise als \vec{a} geschrieben. Man kann sie mit (reellen) Zahlen α multiplizieren. Also ist $\alpha\vec{a}$ definiert und liefert wieder einen Vektor. Außerdem kann man zwei Vektoren \vec{a} und \vec{b} addieren. Das liefert eine Struktur, die in der Mathematik als **linearer Raum** oder **Vektorraum** bezeichnet wird, wenn zusätzlich folgende Regeln erfüllt sind:

- Die Addition ist *kommutativ*, $\vec{a} + \vec{b} = \vec{b} + \vec{a}$, und *assoziativ*:
 $\vec{a} + (\vec{b} + \vec{c}) = (\vec{a} + \vec{b}) + \vec{c}$.
- Es existiert ein Nullvektor \vec{o} mit $\vec{a} + \vec{o} = \vec{a}$ und zu jedem \vec{a} gibt es einen inversen Vektor bezüglich der Addition, also einen Vektor \vec{b} mit $\vec{a} + \vec{b} = \vec{o}$. Diesen inversen Vektor schreibt man auch als $-\vec{a}$.
- Die Multiplikation mit Zahlen ist *distributiv*, das heißt es gelten die Beziehungen $\alpha(\vec{a} + \vec{b}) = \alpha\vec{a} + \alpha\vec{b}$ und $(\alpha + \beta)\vec{a} = \alpha\vec{a} + \beta\vec{a}$, *assoziativ*, das heißt es gilt $\alpha(\beta\vec{a}) = (\alpha\beta)\vec{a}$, und die Zahl Eins lässt bei Multiplikation jeden Vektor \vec{a} unverändert: $1\vec{a} = \vec{a}$.

Genauso kann man vorgehen, wenn man es statt mit einem dreidimensionalen mit einem N -dimensionalen Raum zu tun hat. Die **Dimension** eines Vektorraums ist die maximale Anzahl linear unabhängiger Vektoren. Dabei heißen Vektoren linear unabhängig, wenn kein Vektor als Linearkombination der übrigen dargestellt werden kann, und andernfalls linear abhängig. Eine solche **Linearkombination** der Vektoren $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n$ ist ein Ausdruck der Form

$$\lambda_1\vec{x}_1 + \lambda_2\vec{x}_2 + \dots + \lambda_n\vec{x}_n = \sum_{j=1}^n \lambda_j\vec{x}_j. \quad (2.48)$$

Auf einem Vektorraum kann ein **Skalarprodukt** zweier Vektoren \vec{a} und \vec{b} definiert sein. Man schreibt es oft als $\vec{a} \cdot \vec{b}$. Das Resultat ergibt eine Zahl, also ein Skalar. Es ist definiert durch die folgenden Eigenschaften:

$$\vec{a} \cdot (\vec{b} + \vec{c}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + \vec{a} \cdot \vec{c} \quad (\text{distributiv}) \quad (2.49)$$

$$\vec{a} \cdot (\lambda\vec{b}) = \lambda(\vec{a} \cdot \vec{b}) \quad (\text{homogen}) \quad (2.50)$$

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \vec{b} \cdot \vec{a} \quad (\text{symmetrisch}) \quad (2.51)$$

$$\vec{a} \cdot \vec{a} \geq 0 \quad (\text{positiv}), \quad (2.52)$$

wobei in der letzten Formel die Gleichung $\vec{a} \cdot \vec{a} = 0$ *nur* für den Nullvektor gilt. Die ersten beiden Eigenschaften sorgen dafür, dass die Struktur des Vektorraums mit der der reellen Zahlen verträglich ist. Aus der dritten Eigenschaft folgt, dass gelten muss

$$(\vec{a} + \vec{b}) \cdot \vec{c} = \vec{c} \cdot (\vec{a} + \vec{b}) = \vec{c} \cdot \vec{a} + \vec{c} \cdot \vec{b} = \vec{a} \cdot \vec{c} + \vec{b} \cdot \vec{c} \quad (2.53)$$

was der Integrationsformel (2.86) der Deltafunktion entspricht.

2.5.6 Lineare Differentialgleichungen

In der Quantenmechanik treten häufig lineare Differentialgleichungen von der Form

$$y''(x) + u(x)y'(x) + v(x)y(x) = 0 \quad (2.93)$$

mit reellen Werten von x im Intervall $a \leq x \leq b$ auf, beispielsweise als zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung. Aber auch in der klassischen Mechanik spielen solche Differentialgleichungen eine wichtige Rolle, wie zum Beispiel als Bewegungsgleichung des harmonischen Oszillators, die wir in Beispiel 2.1 kennengelernt haben. Dabei entspricht die Variable x der Zeit, $u(x)$ ist gleich null und $v(x)$ ist eine Konstante.

Eine solche Differentialgleichung hat unendlich viele (eventuell komplexwertige) Lösungen $y(x)$, die man beispielsweise durch die Bedingungen $y(x_0) = y_0$ und $y'(x_0) = y'_0$ an einer beliebigen Stelle x_0 festlegen kann. Alternativ kann man auch fordern, dass die Randbedingungen $y(x_1) = y_1$ und $y(x_2) = y_2$ bei den beiden Punkten $x_1 \neq x_2$ erfüllt sind. Unter der *allgemeinen Lösung* versteht man eine Funktion $y(x)$, die von freien Parametern abhängt, durch deren Wahl man *jede* Lösung darstellen kann.

Nehmen wir einmal an, dass wir zwei Lösungen der Differentialgleichung (2.93) gefunden haben, nennen wir sie $y_1(x)$ und $y_2(x)$, die nicht identisch gleich null sind. Dann überzeugen wir uns schnell davon, dass dann auch ihre Summe die Differentialgleichung löst und allgemeiner jede Linearkombination

$$y(x) = a_1 y_1(x) + a_2 y_2(x) \quad (2.94)$$

mit komplexen Konstanten a_1 und a_2 . Man kann außerdem zeigen, dass dies die allgemeine Lösung darstellt, falls die beiden Funktionen nicht proportional sind (vgl. ME⁴, Abschnitt 6.1). Es ist eine gute Vorbereitung auf das Vorgehen in der Quantenmechanik, wenn wir uns davon überzeugen, dass die Lösungen unserer Differentialgleichung einen zweidimensionalen linearen Raum bilden. Die beiden Funktionen $y_1(x)$ und $y_2(x)$ bilden eine Basis. Im Vergleich mit den oben beschriebenen Vektoren fehlt noch ein Skalarprodukt, also eine Beziehung, die zwei Lösungsfunktionen, nennen wir sie $f(x)$ und $g(x)$, eine Zahl zuordnet, und die die Eigenschaften des Skalarprodukts auf Seite 21 besitzt. Das bewirkt das Integral

$$\langle f|g \rangle = \int_a^b f^*(x)g(x) dx, \quad (2.95)$$

⁴Hier und im Folgenden steht ME für das im Vorwort erwähnte Buch H. J. Korsch: „Mathematische Ergänzungen zur Einführung in die Physik“ (Binomi-Verlag 2007).

Kapitel 3

Lineare Räume und lineare Operatoren

In diesem Kapitel werden wir den mathematischen Formalismus der Quantentheorie vorstellen. Dieser Formalismus ist abstrakt und erscheint zunächst noch ohne Bezug zur Physik. Das wird sich später ändern, wenn wir mit unseren neu erworbenen Kenntnissen den kurzen Entwurf einer Quantenwelt aus dem ersten Kapitel genauer ansehen. Wir wollen es uns zunächst einfach machen und uns auf Systeme beschränken, die mit einer endlich-dimensionalen Beschreibung auskommen. Zuerst werden wir die grundlegende mathematische Struktur kennenlernen: Das ist der *Hilbert-Raum*, ein linearer Raum über den komplexen Zahlen mit einem Skalarprodukt. Danach werden wir uns mit linearen Abbildungen des Hilbert-Raums auf sich selbst beschäftigen, also den *linearen Operatoren* und einige ihrer Eigenschaften kennenlernen.

3.1 Der Hilbert-Raum

Wir wollen uns anfangs auf einen endlich-dimensionalen Hilbert-Raum beschränken, also auf einen N -dimensionalen **linearen Raum** \mathcal{H} über den komplexen Zahlen \mathbb{C} , in dem ein Skalarprodukt erklärt ist. Die Elemente dieses Raumes werden wir **Vektoren** nennen und den linearen Raum auch Vektorraum. Außerdem bezeichnen wir diese Vektoren nicht mehr mit Pfeilsymbolen wie \vec{a} sondern mit griechischen Buchstaben wie ψ oder ϕ . Das ist für Anfänger gewöhnungsbedürftig, insbesondere weil man die griechischen Buchstaben nicht ausschließlich für diese Vektoren reserviert, sondern oft auch komplexe Zahlen mit Buchstaben wie beispielsweise λ bezeichnet. Also ist der Ausdruck

$$\psi = \lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2 \quad \text{mit} \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C} \quad (3.1)$$

3.4 Hermitesche und unitäre Operatoren

Es gibt zwei spezielle Arten von Operatoren, die in der Quantenmechanik wichtig sind. Beide zeichnet jeweils eine besondere Eigenschaft des adjungierten Operators aus:

Ein Operator \hat{H} heißt **hermitesch**, falls er mit seinem adjungierten Operator übereinstimmt:

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H}. \quad (3.111)$$

Ein Operator \hat{U} heißt **unitär**, falls seine Inverse mit seiner Adjungierten übereinstimmt: $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$, d.h.

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I}. \quad (3.112)$$

Es soll noch einmal hervorgehoben werden, dass wir uns hier auf einen endlich-dimensionalen linearen Raum beschränkt haben. Die linearen Operatoren, die unseren N -dimensionalen Raum auf sich selbst abbilden, können also durch $N \times N$ -Matrizen dargestellt werden. Für unendlich dimensionale Räume ist die Situation nicht ganz so einfach. Mehr dazu in Abschnitt 4.5.

Eine wichtige Eigenschaft hermitescher Operatoren ist die Tatsache, dass ihre diagonalen Matrixelemente reell sind:

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle^*. \quad (3.113)$$

Das ist eine direkte Konsequenz der Gleichung (3.105). Matrixelemente hermitescher Operatoren werden in der Quantenmechanik häufig auftreten. Dort werden *physikalische Größen* durch *hermitesche Operatoren* beschrieben und ihre *Matrixelemente* (3.113) ergeben die *Mittelwerte von Messwerten*, sie sind also *reelle Werte*.

Eine kleine Überlegung zeigt uns, dass eine reelle Linearkombination hermitescher Operatoren wieder hermitesch ist, und dass Potenzen hermitescher und unitärer Operatoren wieder hermitesch bzw. unitär sind.

Unter einer Abbildung durch einen unitären Operator bleiben alle Skalarprodukte invariant. Zwei Vektoren $|\varphi\rangle$ und $|\psi\rangle$ werden durch \hat{U} in $|\varphi'\rangle = \hat{U}|\varphi\rangle$ und $|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$ bzw. $\langle\varphi'| = \langle\varphi|\hat{U}^\dagger$ abgebildet. Für das Skalarprodukt der beiden Bildvektoren gilt

$$\langle\varphi'|\psi'\rangle = \langle\varphi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{I}|\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle. \quad (3.114)$$

Die Skalarprodukte bleiben also bei einer unitären Abbildung unverändert. Ein Spezialfall davon ist die Invarianz der Norm bei unitären Transformationen:

$$\|\psi'\|^2 = \langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = \|\psi\|^2. \quad (3.115)$$

Kapitel 4

Lineare Operatoren und Hilbert-Räume

Die linearen Operatoren aus dem vorangehenden Kapitel sind in der Quantenmechanik von großer Bedeutung. Hermitesche Operatoren beschreiben physikalische Größen, man bezeichnet sie als *Observable*. Unitäre Operatoren beschreiben die Zeitentwicklung eines Systems. Hier werden wir zunächst die Eigenwerte und Eigenvektoren der Operatoren kennenlernen. Mit ihrer Hilfe kann man die Messung von Observablen sehr bequem beschreiben und die zu erwartenden Werte bei einer Messung sowie die Wahrscheinlichkeiten ihres Auftretens berechnen. Wir werden lernen, verträgliche und nichtverträgliche Observable zu unterscheiden, und werden mit der Unschärferelation vertraut gemacht. Zum Abschluss dieses Kapitels werfen wir noch einen kurzen Blick auf die etwas anspruchsvollere mathematische Theorie unendlich dimensionaler Hilberträume und ihre wichtige Rolle in der Quantenmechanik.

4.1 Eigenvektoren und Eigenwerte

Aus der klassischen Mechanik erinnern wir uns sicherlich noch an den Trägheitstensor eines starren Körpers, der durch eine Trägheitsmatrix beschrieben wird. Diese symmetrische reelle 3×3 -Matrix kann durch eine Basistransformation in eine einfache Form überführt werden, indem man die Hauptträgheitsmomente und damit die Hauptträgheitsachsen bestimmt (siehe ME, Abschnitt 5.2.3). In diesem Hauptachsensystem ist die Trägheitsmatrix eine Diagonalmatrix. Ein ganz ähnliches Vorgehen wird auch in der Quantenphysik wichtig werden. Deshalb beschäftigen wir uns hier etwas allgemeiner mit den Eigenvektoren einer linearen Abbildung.

4.2 Operatorräume

Die linearen Operatoren auf einem N -dimensionalen Hilbert-Raum lassen sich durch $N \times N$ -Matrizen darstellen. Sie lassen sich addieren, mit komplexen Zahlen multiplizieren und bilden selbst einen N^2 -dimensionalen linearen Raum über \mathbb{C} . Eine Basis dieses Raums erhält man durch die Matrizen \hat{E}_{jk} , die nur ein einziges von null verschiedenes Matrixelement besitzen: in ihrer j -ten Zeile und k -ten Spalte steht eine Eins. Für $N = 2$ sind dies die Matrizen

$$\hat{E}_{11} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{E}_{12} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{E}_{21} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{E}_{22} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.46)$$

In einer solchen Basis schreibt sich eine Matrix \hat{A} mit den Matrixelementen A_{jk} als

$$\hat{A} = \sum_{jk} A_{jk} \hat{E}_{jk}. \quad (4.47)$$

Um aus diesem Operatorraum einen Hilbert-Raum zu machen, benötigt man ein **Skalarprodukt der Operatoren**. Das erreicht man mit der Definition

$$\hat{A} \cdot \hat{B} = \text{spur}(\hat{A}^\dagger \hat{B}) = \sum_{j=1}^N A_{jj}^* B_{jj} \quad (4.48)$$

Wir überlassen es dem Leser zu zeigen, dass damit die Eigenschaften (3.2) bis (3.5) eines Skalarprodukts erfüllt sind. Das Skalarprodukt liefert auch eine Operatornorm $\|\hat{A}\|$ mit

$$\|\hat{A}\|^2 = \hat{A} \cdot \hat{A} = \sum_{j=1}^N |A_{jj}|^2, \quad (4.49)$$

die man als **Frobenius-Norm** bezeichnet.

Man überzeugt sich durch eine einfache Rechnung davon, dass dieses Skalarprodukt invariant ist gegenüber unitären Transformationen (siehe Seite 70): Seien $\hat{A}' = \hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger$ und $\hat{B}' = \hat{U} \hat{B} \hat{U}^\dagger$ unitäre Transformationen von \hat{A} und \hat{B} . Dann gilt mit $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I}$

$$\begin{aligned} \text{spur}(\hat{A}'^\dagger \hat{B}') &= \text{spur}((\hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger)^\dagger (\hat{U} \hat{B} \hat{U}^\dagger)) = \text{spur}((\hat{U}^\dagger)^\dagger \hat{A}^\dagger \hat{U}^\dagger \hat{U} \hat{B} \hat{U}^\dagger) \\ &= \text{spur}(\hat{U} \hat{A}^\dagger \hat{U}^\dagger \hat{U} \hat{B} \hat{U}^\dagger) = \text{spur}(\hat{U} \hat{A}^\dagger \hat{B} \hat{U}^\dagger) \\ &= \text{spur}(\hat{A}^\dagger \hat{B} \hat{U}^\dagger \hat{U}) = \text{spur}(\hat{A}^\dagger \hat{B}), \end{aligned} \quad (4.50)$$

wobei in der letzten Zeile ausgenutzt wurde, dass man unter der Spur Matrizen zyklisch vertauschen kann (vgl. (2.81)).

4.5 Unendlich dimensionale Hilbert-Räume*

Bisher haben wir uns fast ausschließlich auf endlich dimensionale Hilbert-Räume beschränkt. Damit konnten wir schon viele Teilprobleme der Quantenmechanik beschreiben, aber dies reicht bei weitem nicht aus. Schon grundlegende Operatoren wie der Ortsoperator \hat{x} und der Impulsoperator \hat{p} erlauben keine endlich dimensionale Darstellung. Das sieht man schon an ihrer Vertauschungsrelation (4.105), die wir hier etwas vereinfachen wollen, indem wir den Impulsoperator umschreiben als

$$\hat{p} = \hbar \hat{k} = -i\hbar \hat{d}. \quad (4.147)$$

Der Operator \hat{k} hat dann die Dimension einer reziproken Länge, also einer Wellenzahl und die Vertauschungsrelation (4.105) wird zu

$$[\hat{k}, \hat{x}] = -i\hat{I}. \quad (4.148)$$

Angenommen, es gäbe eine endlich dimensionale Darstellung von \hat{x} und \hat{k} durch $N \times N$ -Matrizen, dann besäße die Matrix des Kommutators die Spur null, denn unter der Spur kann man zwei Matrizen vertauschen (siehe Gleichung (2.80) auf Seite 26):

$$\text{spur} [\hat{k}, \hat{x}] = \text{spur} (\hat{k}\hat{x} - \hat{x}\hat{k}) = \text{spur} (\hat{k}\hat{x}) - \text{spur} (\hat{x}\hat{k}) = 0. \quad (4.149)$$

Im Gegensatz dazu ist die Spur der Einheitsmatrix auf der rechten Seite von (4.148) gleich N . Das ist ein Widerspruch und folglich gibt es keine endlich dimensionale Darstellung des Orts- und Impulsoperators. Wir müssen uns also mit unendlich dimensionalen Hilbert-Räumen beschäftigen, um diese beiden wichtigen Operatoren näher betrachten zu können. Im Rahmen dieser kurzen Einführung können nur einige wesentliche Grundzüge der Theorie unendlich dimensionaler Hilbert-Räume angesprochen werden.

In einem unendlich dimensionalen linearen Raum treten notwendigerweise unendliche Summen wie

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |\varphi_n\rangle \quad (4.150)$$

auf, und wir müssen uns mit Konvergenzfragen beschäftigen. Wir erinnern uns daran, dass die Konvergenz von Reihen auf die Konvergenz von Folgen zurückgeführt werden kann (auf die Folge der Partialsummen). Für Folgen von reellen Zahlen x_1, x_2, x_3, \dots gilt ein einfaches Konvergenzkriterium: Die Folge konvergiert, wenn die Abstände der x_n mit wachsendem Index n beliebig klein werden. Präziser formuliert: Es gibt für alle $\epsilon > 0$ ein $n_\epsilon \in \mathbb{N}$, so dass gilt:

$$|x_n - x_m| < \epsilon \quad \text{für alle } n, m > n_\epsilon.$$



Beispiel 5.6 Wir wollen am Beispiel des harmonischen Oszillators

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 \hat{x}^2 \quad (5.144)$$

im Heisenberg-Bild den Ortsoperator $\hat{x}(t)$ und den Impulsoperator $\hat{p}(t)$ berechnen. Diese Operatoren sind nicht explizit zeitabhängig und die heisenbergschen Bewegungsgleichungen (5.137) lauten

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}], \quad \frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}]. \quad (5.145)$$

Sie vereinfachen sich hier wegen $[\hat{x}^2, \hat{x}] = 0$, $[\hat{p}^2, \hat{p}] = 0$ und

$$[\hat{p}^2, \hat{x}] = \hat{p} \underbrace{[\hat{p}, \hat{x}]}_{=\hbar/i} + \underbrace{[\hat{p}, \hat{x}]}_{=\hbar/i} \hat{p} = (2\hbar/i) \hat{p} \quad (5.146)$$

$$[\hat{x}^2, \hat{p}] = \hat{x} \underbrace{[\hat{x}, \hat{p}]}_{=-\hbar/i} + \underbrace{[\hat{x}, \hat{p}]}_{=-\hbar/i} \hat{x} = (-2\hbar/i) \hat{x} \quad (5.147)$$

(vgl. die Lösung zu Aufgabe 5.1) zu

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{\hat{p}}{m}, \quad \frac{d\hat{p}}{dt} = -m\omega^2 \hat{x}. \quad (5.148)$$

Diese beiden Gleichungen entsprechen genau den korrespondierenden klassischen Bewegungsgleichungen (vgl. Seite 108). Eine Aufgabe zeigt, dass man auch hier die klassischen Lösungen der Bewegungsgleichung auf die Quantenmechanik übertragen kann:

Aufgabe 5.3 Überzeugen Sie sich davon, dass durch

$$\begin{aligned} \hat{x}(t) &= \hat{x} \cos \omega t + \hat{p} \frac{\sin \omega t}{m\omega} \\ \hat{p}(t) &= -m\omega \hat{x} \sin \omega t + \hat{p} \cos \omega t \end{aligned}$$

mit $\hat{x} = \hat{x}(0)$ und $\hat{p} = \hat{p}(0)$ die heisenbergschen Bewegungsgleichungen für einen harmonischen Oszillator gelöst werden.

In dem Fall des harmonischen Oszillators findet man also eine enge Korrespondenz zwischen Klassik und Quantenmechanik, denn hier sind die klassischen Bewegungsgleichungen linear, genau wie in der Quantenmechanik. Das ist aber eine seltene Ausnahme und darf nicht verallgemeinert werden!



Kapitel 6

Spezielle Funktionen

In diesem Kapitel werden einige wichtige Funktionen der Mathematischen Physik vorgestellt. Solche Funktionen sind in der Quantentheorie in mehrfacher Hinsicht von Bedeutung: Einmal erscheinen sie in Form von analytischen Lösungen einfacher physikalischer Probleme, wie beispielsweise die Hermite-Funktionen als Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators. Zum anderen liefern diese Funktionen eine bequeme Basis des Hilbert-Raums. Eine solche Basis kann man verwenden, um andere Probleme darzustellen und dann als Matrixgleichungen zu behandeln. Beides haben wir am Beispiel der Hermite-Funktionen im vorangehenden Kapitel kurz vorgestellt.

6.1 Orthogonale Polynomsysteme

In Kapitel 3 wurde das **Skalarprodukt** auf dem Hilbert-Raum der Polynome $P(x)$ und $R(x)$ im Intervall $a \leq x \leq b$ als

$$\langle P|R \rangle = \int_a^b P(x)R(x)\rho(x) dx \quad (6.1)$$

definiert, wobei wir uns hier auf reelle Polynome beschränken. Dabei ist $\rho(x)$ eine nicht-negative stetige Gewichtsfunktion. Dieses Skalarprodukt erlaubt es nun, den Begriff *Orthogonalität* auch für Polynome zu definieren. Zwei Polynome sind orthogonal zueinander, wenn ihr Skalarprodukt gleich null ist: Ein orthogonales Polynomsystem besteht dann aus Polynomen $P_n(x)$ vom Grad $n = 0, 1, \dots$, die paarweise orthogonal sind:

$$\langle P_m|P_n \rangle = \int_a^b P_m(x)P_n(x)\rho(x) dx = c_n\delta_{mn}. \quad (6.2)$$

Oft ist es zweckmäßiger, statt der Polynome $P_n(x)$ die Funktionen

$$p_n(x) = \sqrt{\rho(x)/c_n} P_n(x) \quad (6.3)$$

zu verwenden, die nach

$$\int_a^b p_m(x) p_n(x) dx = \delta_{mn} \quad (6.4)$$

normiert sind und die die **Vollständigkeitsrelation** (vgl. Gleichung 4.196)

$$\sum_n p_n(x) p_n(x') = \delta(x - x') \quad (6.5)$$

erfüllen. Dabei ist $\delta(x)$ die Deltafunktion (vgl. Abschnitt 2.5.5). Eine typische Anwendung orthogonaler Polynome besteht darin, Funktionen aus dem Hilbert-Raum quadratintegrierbarer Funktionen in diesen Polynomsystemen darzustellen, also als

$$f(x) = \sum_n a_n p_n(x). \quad (6.6)$$

Dabei ergeben sich die Koeffizienten a_n durch Projektion auf die Basisfunktionen:

$$a_n = \langle f | p_n \rangle = \int_a^b f(x) p_n(x) dx. \quad (6.7)$$

Nach einem Satz von Fischer-Riesz konvergiert die Reihe (6.6) fast überall gegen die Funktion $f(x)$, wenn die Reihe $\sum_n |a_n|^2$ konvergiert.

Abhängig von dem Intervall und der Gewichtsfunktion existieren unterschiedliche Polynomsysteme mit unterschiedliche Anwendungsgebieten. Wir werden hier drei typische Systeme vorstellen: Die Hermite-Polynome, die Legendre-Polynome und die Laguerre-Polynome.

6.1.1 Hermite-Polynome

Um orthogonale Polynome auf der gesamten x -Achse zu konstruieren, muss man eine Gewichtsfunktion $\rho(x)$ wählen, die für große $|x|$ schnell genug abfällt. Hier bietet sich eine Gauß-Funktion $\rho(x) = e^{-x^2}$ an. Damit erhält man die **Hermite-Polynome** $H_n(x)$. Sie erfüllen die Orthonormierungsrelation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_m(x) H_n(x) e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{mn}, \quad (6.8)$$

stehen also paarweise aufeinander senkrecht. Die Polynome niedrigster Ordnung lauten

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1, & H_1(x) &= 2x, & H_2(x) &= 4x^2 - 2 \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x, & H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12. \end{aligned} \quad (6.9)$$

Kapitel 7

Elemente der Gruppentheorie*

In vielen physikalischen Überlegungen oder Theorien spielen Symmetrien eine wichtige Rolle. Eine ganz besondere Bedeutung haben diese Symmetrien in der Quantentheorie. Da die Symmetrieeigenschaften eines Systems zweckmäßig mit dem mathematischen Apparat der Gruppentheorie beschrieben werden, ist es wichtig, dass wir in dieser kurzen Einführung in die Mathematik der Quantenmechanik auch einen Ausflug in die Gruppentheorie unternehmen. Diese Theorie ist recht abstrakt ebenso wie ihre Resultate und ihre Anwendungen in der Quantentheorie sind für den Anfänger nicht leicht verständlich. Wir möchten hier trotzdem einen ersten Eindruck vermitteln.

Es gibt unterschiedliche Anwendungen gruppentheoretischer Methoden in physikalischen Theorien. Hier zwei sehr unterschiedliche Beispiele:

(I) Die grundlegenden ‘Gesetze’ der Physik sind invariant gegenüber fundamentalen Symmetrioperationen in Raum und Zeit. Der Raum ist homogen (kein Punkt im Raum ist ausgezeichnet), isotrop (keine Richtung ist ausgezeichnet) und auch die Zeit ist homogen. Diese Invarianz formuliert man gern mit Hilfe von Symmetriegruppen. Beispiele sind die *Galilei-Gruppe* in der Klassischen Mechanik oder die *Lorentz-Gruppe* in der Elektrodynamik und in der relativistischen Physik. Eine Theorie muss dabei so formuliert werden, dass sie unter einer solchen fundamentalen Symmetriegruppe invariant ist. Dadurch werden wesentliche Strukturelemente der Theorie festgelegt.

(II) Ein bestimmtes physikalisches System, das uns interessiert, kann gegenüber einer oder mehrerer Symmetrioperationen invariant sein. Ein Beispiel dafür ist ein Molekül, das unter Drehungen um bestimmte Achsen mit bestimmten Drehwinkeln oder auch bei einer kontinuierlichen Drehung in sich selbst übergeht. Das impliziert dann spezielle Eigenschaften des Systems, wie beispielsweise Erhaltungsgrößen, Auswahlregeln und Entartungen.

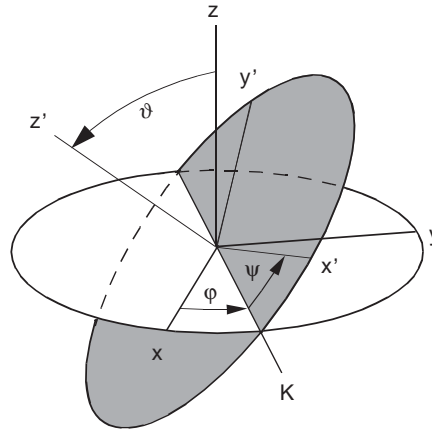


Abbildung 7.6: Eine Drehung im dreidimensionalen Raum lässt sich durch die drei Euler-Winkel ϑ , φ und ψ parametrisieren.

des gedrehten Systems gegenüber der ungedrehten z -Achse abgekippt ist, φ der Winkel zwischen der ungedrehten x -Achse und die Knotenlinie K (die Schnittgerade zwischen der (x, y) -Ebene und der (x', y') -Ebene des gedrehten Systems), und ψ ist der Winkel zwischen Knotenlinie und gedrehter x -Achse, wie in Abbildung 7.6 dargestellt. Man kann die gesamte Drehung durch drei aufeinander folgende Drehungen um die Koordinatenachsen des ungedrehten Systems ausdrücken:

$$\hat{R}(\varphi, \vartheta, \psi) = \hat{R}_z(\psi) \hat{R}_x(\vartheta) \hat{R}_z(\varphi) \quad (7.65)$$

Damit besitzen wir einerseits eine Matrixdarstellung der dreiparametrischen Drehgruppe $SO(\mathbf{3})$, indem wir die Drehmatrizen aus (7.59) und (7.60) einsetzen und ausmultiplizieren, und wir können andererseits mit (7.65) die gesamte Gruppe $SO(\mathbf{3})$ in einer Exponentialdarstellung darstellen:

$$\hat{R}(\varphi, \vartheta, \psi) = e^{i\psi \hat{T}_z} e^{i\vartheta \hat{T}_x} e^{i\varphi \hat{T}_z} \quad (7.66)$$

Wir wollen uns noch die algebraischen Eigenschaften unserer drei Generatoren ansehen. Den Kommutator von \hat{T}_x und \hat{T}_y berechnen wir als kleine Übung zur Matrixmultiplikation:

Kapitel 8

Rechen- und Näherungsmethoden

Die Darstellung in den vorangehenden Kapiteln könnte den Eindruck hervorgerufen haben, dass die Rolle mathematischer Methoden in der Quantenmechanik darin besteht, auf mehr oder weniger elegante Art die exakte mathematische Lösung eines quantenmechanischen Problems zu ermitteln. Das ist aber *nicht* der Fall. Ganz im Gegenteil: Probleme mit einer exakten, geschlossen formulierbaren Lösung sind extrem selten und hauptsächlich in den Lehrbüchern zu finden. Dort liefern sie in allen möglichen Variationen eine Basis für Beispiele und Übungsaufgaben. Ein typisches, *realistisches* Problem der Quantenmechanik lässt sich nur näherungsweise oder numerisch lösen. Dazu wurde eine unüberschaubare Vielzahl von Methoden entwickelt. Einige typische Beispiele solcher Techniken sollen hier vorgestellt werden.

Man unterscheidet zweckmäßigerweise Methoden, die schon von ihrem Ansatz her eine Näherungslösung suchen, und solche, die auf eine exakte, obwohl nur numerische Lösung abzielen. Allerdings sind die Übergänge fließend: Oft lassen sich die ausgewiesenen Näherungsverfahren verbessern und der exakten Lösung mehr und mehr annähern. Andererseits erlauben im Prinzip exakte numerische Methoden oft nur eine sehr begrenzte Genauigkeit, weil die Rechenkapazitäten eingeschränkt sind. Die folgenden Beispiele werden diese zunächst vage klingenden Äußerungen verdeutlichen.

8.1 Störungstheorie

Der Ansatz der Störungstheorie in der Quantenmechanik folgt einem aus anderen Bereichen der Physik bekannten Vorgehen. Man beginnt mit einem vereinfachten

8.2 Variationsrechnung

Variationsmethoden stellen eine völlig andersartige Näherungsmethode als die einer Störungstheorie dar. Dabei macht man einen Ansatz für die gesuchte Wellenfunktion und wählt dazu eine Funktion, die erfahrungsgemäß eine geeignete Lösungsfunktion darstellen könnte, und die von einem oder mehreren Parametern abhängt. Dann variiert man diese Parameter, um die Lösungsfunktion zu optimieren. Das bekannteste Verfahren ist eine Methode zur Berechnung der Energie und der Wellenfunktion des Grundzustandes.

Wenn wir mit $|0\rangle, |1\rangle, \dots$, die orthonormierten Eigenzustände des Hamilton-Operators \hat{H} bezeichnen,

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad \langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \quad (8.29)$$

wobei wir die Zustände nach wachsenden Energieeigenwerten anordnen,

$$E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots, \quad (8.30)$$

dann können wir jeden normierten Vektor nach diesen Basiszuständen entwickeln:

$$|\varphi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle \quad \text{mit} \quad \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1. \quad (8.31)$$

Wenn wir den Erwartungswert von \hat{H} für diesen Zustand berechnen und nach unten abschätzen

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle &= \sum_{m,n=0}^{\infty} c_m^* c_n \langle m | \hat{H} | n \rangle = \sum_{m,n=0}^{\infty} c_m^* c_n E_n \underbrace{\langle m | n \rangle}_{=\delta_{mn}} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = E_0, \end{aligned} \quad (8.32)$$

dann erhalten wir die Ungleichung

$$E_0 \leq \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle, \quad (8.33)$$

für jeden normierten Zustand $|\varphi\rangle$. Verzichten wir auf eine explizite Forderung nach einer Normierung, gilt

$$E_0 \leq \frac{\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle}. \quad (8.34)$$

Der Erwartungswert liefert also einen Schätzwert

$$E_0 \approx \frac{\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle}. \quad (8.35)$$