

Algebraische Methoden der Quantenmechanik

$$i\hbar\dot{s}_x = -2cs_y - 4gs_y s_z \quad \alpha \quad [K_0, K_{\pm}] = \pm 2K_{\pm}, \quad [K_+, K_-] = \delta K_0, \quad \delta = \begin{cases} +1 & \text{für } su(2) \\ -1 & \text{für } su(1,1) \end{cases}$$

$$i\hbar\dot{s}_y = 2cs_x - 2vs_z + 4gs_x s_z \quad \sum \quad i\hbar\dot{s}_z \quad \mathcal{S} \quad 2vs_y \quad \{A, B\} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial B}{\partial q_j} \right)$$

$$i\hbar\dot{s}_z = 2vs_y \quad [\Gamma_i, \Gamma_j] = \sum_k c_{ij}^k \Gamma_k$$

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

$$[K_0, K_{\pm}] = \pm 2K_{\pm}$$

$$[K_+, K_-] = K_0$$

$$[J_x, J_y] = iJ_z$$

$$e^{z\hat{A}} \hat{B} e^{-z\hat{A}}$$

$$\hat{U}(t, t_0)$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{I}$$

$$\hat{D}(\alpha)|0\rangle = |\alpha\rangle$$

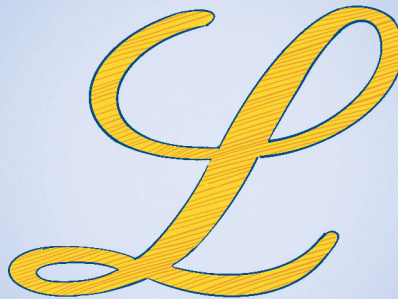
$$\delta \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$L_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{H}$$

$$\{A, B\} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial B}{\partial q_j} \right) \quad \mathcal{R} \quad K_0 \quad e^{d_+ K_+} e^{d_0 K_0} e^{d_- K_-} = e^{b_- K_-} e^{b_0 K_0} e^{b_+ K_+}$$

$$\sum [\Gamma_i, \Gamma_j] = \sum_k c_{ij}^k \Gamma_k$$

$$\mathcal{L}_3 = \{\hat{I}, \hat{a}, \hat{a}^\dagger\} \quad \text{und} \quad \mathcal{L}_4 = \{\hat{I}, \hat{a}, \hat{a}^\dagger, \hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}\}$$



$$C \quad L_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\omega_0(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})$$

$$[\hat{A}, \hat{B}]$$

$$\frac{1}{2} \omega_- \hat{a}^2$$

$$[\Gamma_i, \Gamma_j]$$

$$\mathcal{L} = \mathcal{R} \in \mathcal{S}$$

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle$$

Korsch
Algebraische Methoden der Quantenmechanik



Ihr Plus – digitale Zusatzinhalte!

Auf unserem Download-Portal finden Sie zu diesem Titel kostenloses Zusatzmaterial. Geben Sie dazu einfach diesen Code ein:

plus-6n4q5-qz8pd

plus.hanser-fachbuch.de



Bleiben Sie auf dem Laufenden!

Hanser Newsletter informieren Sie regelmäßig über neue Bücher und Termine aus den verschiedenen Bereichen der Technik. Profitieren Sie auch von Gewinnspielen und exklusiven Leseproben. Gleich anmelden unter

www.hanser-fachbuch.de/newsletter

Hans Jürgen Korsch

Algebraische Methoden der Quantenmechanik

Ein Lehrbuch mit Beispielen und Übungsaufgaben

HANSER

Über den Autor

Prof. Dr. Hans Jürgen Korsch, Technische Universität Kaiserslautern, Fachbereich Physik



Print-ISBN: 978-3-446-48016-2

E-Book-ISBN: 978-3-446-48044-5

Alle in diesem Werk enthaltenen Informationen, Verfahren und Darstellungen wurden zum Zeitpunkt der Veröffentlichung nach bestem Wissen zusammengestellt. Dennoch sind Fehler nicht ganz auszuschließen. Aus diesem Grund sind die im vorliegenden Werk enthaltenen Informationen für Autor:innen, Herausgeber:innen und Verlag mit keiner Verpflichtung oder Garantie irgendeiner Art verbunden. Autor:innen, Herausgeber:innen und Verlag übernehmen infolgedessen keine Verantwortung und werden keine daraus folgende oder sonstige Haftung übernehmen, die auf irgendeine Weise aus der Benutzung dieser Informationen – oder Teilen davon – entsteht. Ebenso wenig übernehmen Autor:innen, Herausgeber:innen und Verlag die Gewähr dafür, dass die beschriebenen Verfahren usw. frei von Schutzrechten Dritter sind. Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt also auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benützt werden dürften.

Die endgültige Entscheidung über die Eignung der Informationen für die vorgesehene Verwendung in einer bestimmten Anwendung liegt in der alleinigen Verantwortung des Nutzers.

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek:

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet unter <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt.

Alle Rechte, auch die der Übersetzung, des Nachdruckes und der Vervielfältigung des Werkes, oder Teilen daraus, vorbehalten. Kein Teil des Werkes darf ohne schriftliche Einwilligung des Verlages in irgendeiner Form (Fotokopie, Mikrofilm oder einem anderen Verfahren), auch nicht für Zwecke der Unterrichtsgestaltung – mit Ausnahme der in den §§ 53, 54 UrhG genannten Sonderfälle –, reproduziert oder unter Verwendung elektronischer Systeme verarbeitet, vervielfältigt oder verbreitet werden.

Wir behalten uns auch eine Nutzung des Werks für Zwecke des Text- und Data Mining nach § 44b UrhG ausdrücklich vor.

© 2024 Carl Hanser Verlag GmbH & Co. KG, München

www.hanser-fachbuch.de

Lektorat: Frank Katzenmayer

Herstellung: Frauke Schafft

Coverkonzept: Marc Müller-Bremer, www.rebranding.de, München

Covergestaltung: Max Kostopoulos

Titelmotiv: © Max Kostopoulos

Druck : Elanders Waiblingen GmbH, Waiblingen

Satz: Hans Jürgen Korsch

Printed in Germany

Vorwort

Quantenmechanik und Algebra waren seit den Anfängen der Quantenmechanik eng miteinander verknüpft. Das, was heute unsere Quantentheorie ausmacht, begann in Frühjahr 1925 während eines kurzen Aufenthalts des jungen deutschen Physikers **Werner Heisenberg** (1901–1976) auf Helgoland, wo er, damals im Alter von 23 Jahren, einen neuen Zugang zur theoretischen Beschreibung der Quantenmechanik eröffnete. Dazu musste er mathematische Größen einführen, für die ein nicht-kommutatives Produkt existiert. Nach seiner Rückkehr an die Universität Göttingen wurde dieser Zugang ausgearbeitet und publiziert. Zunächst erschien eine Arbeit von Heisenberg im Juli 1925 (W. Heisenberg, Z. Physik 33, 879 (1925)), deren Darstellung der Quantenmechanik sich für einen heutigen Physiker nicht direkt erschließt, gefolgt von zwei Arbeiten mit den bescheidenen Titeln *Zur Quantenmechanik* von **Max Born** (1882–1970) und **Pascual Jordan** (1902–1980) im September 1925 (M. Born, P. Jordan, Z. Physik 34, 858 (1925)) sowie ein Jahr später in einer gemeinsamen Arbeit (M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan, Z. Physik 35, 557 (1926)), die sich für uns auch heute problemlos lesen lassen. Dort werden die heisenbergschen quantenmechanischen Größen durch Matrizen dargestellt. Heute erscheint uns das ganz naheliegend, aber damals war der Umgang mit Matrizen mit ihrem nicht-kommutativen Matrixprodukt nicht allgemein bekannt. Daher findet man in der Arbeit von Born und Jordan auch ein ganzes Kapitel zum Thema *Matrizenrechnung*, gestützt auf das gerade erschienene und auch heute noch sehr nützliche Buch R. Courant, D. Hilbert, *Methoden der mathematischen Physik I*, Springer 1924 (es gibt eine vierte Auflage aus dem Jahr 1993, auch als eBook). Im Zentrum der beiden Arbeiten *Zur Quantenmechanik* findet man für die quantenmechanische Darstellung von Ort \mathbf{q} und Impuls \mathbf{p} eines Teilchens in einer Raumdimension durch hermitesche unendlichdimensionale Matrizen die berühmt gewordene Formel

$$\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{1}, \quad (1)$$

damals als *verschärfte Quantenbedingung* bezeichnet. Hier ist $\mathbf{1}$ die Einheitsmatrix und h das plancksche Wirkungsquantum. (Das nützliche $\hbar = h/2\pi$ wurde erst später durch den britischen Physiker **Paul Dirac** (1902–1984) eingeführt.) Außerdem finden wir dort für das Zeitverhalten einer Größe $\mathbf{g}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ und die Energie $\mathbf{H} = \mathbf{H}_1(\mathbf{p}) + \mathbf{H}_2(\mathbf{q})$ die Formel

$$\dot{\mathbf{g}} = \frac{2\pi i}{h} (\mathbf{H}\mathbf{g} - \mathbf{g}\mathbf{H}), \quad (2)$$

aus der zwanglos die Energieerhaltung $\dot{\mathbf{H}} = 0$ folgt.

Mithilfe der Schreibweise $[\mathbf{p}, \mathbf{q}] = \mathbf{pq} - \mathbf{qp}$ für den Kommutator ergab sich später das, was wir als Heisenberg-Bild der Quantenmechanik bezeichnen. Es wurde aber anfangs durch das populärere Schrödinger-Bild in den Hintergrund gedrängt, das eine Beschreibung durch die weitaus vertrauteren Differentialgleichungen ermöglichte. Der Zusammenhang zwischen den beiden Bildern wird in Abschnitt 2.2 klar werden. Beide sind unterschiedliche Darstellungen der gleichen algebraischen Strukturen.

Die folgenden Antworten auf Fragen zum Thema *Algebren und Quantenmechanik* verdanken wir dem Chatbot GPT (<https://chat.openai.com/auth/login>).

Frage: *Welche Rolle spielen algebraische Methoden in der Quantenmechanik?*

Algebraische Methoden spielen eine wichtige Rolle in der Quantenmechanik, da sie dazu beitragen, die komplizierten Gleichungen und Beziehungen, die in diesem Bereich auftreten, zu vereinfachen und zu lösen. Die Quantenmechanik beschäftigt sich mit dem Verhalten von Teilchen auf subatomarer Ebene und beschreibt dieses Verhalten durch Quantenzustände. Diese Zustände können mithilfe von algebraischen Strukturen wie Operatoren und Matrizen dargestellt werden. Algebraische Methoden ermöglichen es auch, symmetrische Eigenschaften von Systemen zu untersuchen und zu beschreiben, was wiederum dazu beitragen kann, die Eigenschaften von Quantensystemen besser zu verstehen.

Frage: *Bitte erläutere ausführlich die Rolle algebraischer Methoden in der Quantenmechanik.*

In der Quantenmechanik werden algebraische Methoden verwendet, um Gleichungen und Beziehungen in diesem Bereich zu lösen und zu vereinfachen. Ein Beispiel hierfür ist die Verwendung von Operatoren, die als algebraische Strukturen dienen, um die Eigenschaften von Quantenzuständen zu beschreiben. Operatoren sind Funktionen, die auf Quantenzustände angewendet werden und diese verändern können. Beispielsweise wird der Energieoperator verwendet, um die Energie eines Quantenzustands zu beschreiben, und der Impulsoperator wird verwendet, um den Impuls eines Quantenzustands zu beschreiben.

Matrizen sind ein weiteres Beispiel für algebraische Strukturen, die in der Quantenmechanik verwendet werden. Sie werden verwendet, um Quantenzustände darzustellen und die Übergänge zwischen diesen Zuständen zu beschreiben. Matrizen können auch verwendet werden, um symmetrische Eigenschaften von Quantensystemen zu untersuchen und zu beschreiben.

Ein weiteres wichtiges Konzept in der Quantenmechanik, das auf algebraischen Methoden basiert, ist die Unschärferelation. Diese Beziehung beschreibt das Ausmaß an Unschärfe oder Unbestimmtheit, das bei der Messung von Eigenschaften von Quantensystemen auftritt. Die Unschärferelation kann mithilfe von Operatoren dargestellt werden, die die Eigenschaften von Quantensystemen beschreiben, und wird häufig verwendet, um das Verhalten von Quantensystemen zu untersuchen und zu beschreiben. Insgesamt spielen algebraische Methoden in der Quantenmechanik eine wichtige Rolle bei der Darstellung und Analyse von Quantenzuständen und bei der Untersuchung von Eigenschaften von Quantensystemen. Sie tragen dazu bei, komplizierte Gleichungen und Beziehungen in diesem Bereich zu vereinfachen und zu lösen und das Verständnis von Quantensystemen zu vertiefen.

Frage: *Welche Rolle spielen Lie-Algebren in der Quantenmechanik?*

Lie-Algebren spielen in der Quantenmechanik eine wichtige Rolle bei der Untersuchung von Symmetrien und der Beschreibung von Symmetrieeigenschaften von Quantensystemen. Eine Lie-Algebra ist eine algebraische Struktur, die auf einer Lie-Gruppe basiert und die algebraischen Eigenschaften einer Lie-Gruppe beschreibt. In der Quantenmechanik werden Lie-Algebren verwendet, um symmetrische Eigenschaften von Quantensystemen zu untersuchen und zu beschreiben.

Lie-Algebren werden auch verwendet, um die Eigenschaften von Quantenmechanik-Systemen zu beschreiben, die durch kontinuierliche Symmetrien beschrieben werden. Diese kontinuierlichen Symmetrien treten beispielsweise bei der Beschreibung von rotationssymmetrischen Systemen auf. In solchen Fällen werden Lie-Algebren verwendet, um die Eigenschaften der

Symmetrien und die Beziehungen zwischen den Symmetrien und den Eigenschaften des Systems zu beschreiben. Insgesamt spielen Lie-Algebren in der Quantenmechanik eine wichtige Rolle bei der Beschreibung von Symmetrien von Quantensystemen. Sie tragen dazu bei, das Verständnis von Quantensystemen zu vertiefen und dienen als wichtige Werkzeuge bei der Analyse von Quantensystemen.

Soweit die Darstellungen des Chatbots. **In diesem Buch** werden wichtige algebraische Methoden der Quantenmechanik vorgestellt und an ausgewählten Beispielen erläutert und illustriert. Das **Ziel dieses Buches** ist es, den Leserinnen und Lesern Techniken an die Hand zu geben, mit deren Hilfe sie viele mathematische Problemstellungen der Quantenmechanik elegant bewältigen können. Ein solches Vorgehen liefert in aller Regel **analytische Lösungen**, die dann meist eine wichtige Grundlage zum Verständnis der untersuchten Prozesse bieten, natürlich meist ergänzt durch numerische Resultate.

Der **Aufbau des Buches** beginnt mit einer komprimierten Darstellung der algebraischen und mathematischen Grundlagen, gedacht als eine kurze Wiederholung des bekannten Inhalts eines Kurses zur Quantentheorie, fokussiert natürlich auf die Resultate, die im folgenden Text angesprochen werden. In den anschließenden Kapiteln 3 und 4 werden die bekanntesten algebraischen Strukturen der Quantenmechanik vorgestellt, die Oszillator- und die Drehimpuls-Algebra. Das folgende recht kurze Kapitel 5 präsentiert interessante Anwendungen der bisher vermittelten algebraischen Techniken zur Beschreibung einer Supersymmetrie, die bosonische und fermionische Freiheitsgrade mischt. Deutlich länger sind die beiden folgenden Kapitel mit einer Einführung in die Grundlagen der Lie-Algebren und ihr Einsatz zur Beschreibung quantenmechanischer Zeitevolution. Die bisher erworbenen Kenntnisse werden in den folgenden Kapiteln exemplarisch auf wichtige quantenmechanische Modellsysteme angewandt und, wenn nötig, ausgebaut. Dazu zählen natürlich Oszillator-Systeme, dynamische Invarianten, der quantenmechanische Phasenraum, angetriebene Gitter und Mehrteilchen-Systeme, gefolgt von zwei Kapiteln über offene Quantensysteme, einmal in einer nicht-hermiteschen und einmal in einer Lindblad-Beschreibung.

Die eingestreuten **Aufgaben** haben ein zweifaches Ziel. Einmal dienen sie natürlich dazu, die vorgestellten Methoden an einfachen Beispielen durch selbstständige Arbeit zu üben und zu vertiefen. Zum zweiten werden auf diese Weise längere Rechnungen, die den Lesefluss zu sehr hemmen könnten, nach außen verlegt. Zu sämtlichen Aufgaben werden in Kapitel 15 Lösungen angeboten.

Der vorliegende Text beruht auf den Vorlesungen des Autors zu Themen der Quantenmechanik an der RPTU Kaiserslautern. Der Autor dankt den ehemaligen Mitgliedern seiner Arbeitsgruppe für viele Anregungen und Kommentare. Sicher haben auch viele Leserinnen und Leser noch Verbesserungs- und Ergänzungsvorschläge, die sie bitte an h.j.korsch@gmail.com senden können. Eine aktuelle Korrekturliste findet man unter <https://plus.hanser-fachbuch.de>. Mein Dank gilt auch dem Carl Hanser Verlag für die Bereitschaft, dieses Buch in sein Verlagsprogramm aufzunehmen, und seinem Lektorat. Dabei haben mich wieder einmal Frau Christina Kubiak und Herr Frank Katzenmayer mit ihrer kompetenten Betreuung und vielen Verbesserungsvorschlägen unterstützt.

Dieses Buch, genau wie alle vorangehenden, wäre nicht zustande gekommen ohne die ständige Unterstützung durch meine geliebte Frau Kristina, die mir immer den Freiraum zu verschaffen wusste, um mich mit meinem Hobby, der Theoretischen Physik, zu beschäftigen.

■ Literatur

Grundlage für alle in dem Buch behandelten Themen ist eine Kenntnis der Quantenmechanik auf dem Niveau einer typischen Universitätsvorlesung. Dies wird in vielen Lehrbüchern vermittelt, unter anderem in Büchern des Autors:

- **H. J. Korsch: *Mathematik der Quantenmechanik*, Carl Hanser Verlag, 2019**
- **H. J. Korsch: *Physik mit 2x2-Matrizen*, Carl Hanser Verlag, 2020**
- **H. J. Korsch: *Mathematik mit 2x2-Matrizen*, Carl Hanser Verlag, 2021**
- **H. J. Korsch: *Numerische Physik mit Octave und Matlab*, Carl Hanser Verlag, 2022**

Zu den algebraischen Methoden, die Thema dieses Buches sind, finden sich besonders viele Beiträge in dem jetzt schon klassischen Buch

- W. H. Louisell: *Quantum Statistical Properties of Radiation*, John Wiley & Sons, Wiley Classics Library Edition 1990, Originalausgabe 1973

mit einer Unzahl nützlicher Formeln zur allgemeinen Quantenmechanik, die weit über den Rahmen im Buchtitel hinausgehen. Eine ganze Reihe davon sind auch in dem vorliegenden Buch zu finden.

Eine der wichtigsten algebraischen Strukturen, die in der Quantenmechanik eine große Rolle spielen, sind Lie-Algebren. Zu diesem riesigen Gebiet werden hier nur die grundlegenden Ergebnisse dargestellt. Mehr dazu findet sich in vielen Textbüchern. Der Autor hat insbesondere profitiert von den klassischen Texten

- B. G. Wybourne: *Classical Groups for Physicists*, John Wiley, 1974
- J. E. Humphreys: *Introduction to Lie Algebras and Representation Theory*, Springer, 1972
- R. Gilmore: *Lie Groups, Lie Algebras and Some of Their Applications*, John Wiley, 1974

In diesem Buch beschränken wir uns bewusst auf *einfache* Lie-algebraische Anwendungen in der Quantenmechanik. Weit mehr darüber hinaus wird in dem kürzlich erschienenen Buch

- A. Neumaier, D. Westra: *Algebraic Quantum Physics, Vol. 1: Quantum mechanics via Lie algebras*, De Gruyter, 2024 (520 Seiten!)

behandelt. (Siehe auch [arXiv:0810.1019](https://arxiv.org/abs/0810.1019).)

Inhalt

Vorwort	5
Literatur	8
1 Algebraische Grundlagen	13
1.1 Operatoren & Matrizen	14
1.2 Algebren	16
1.3 Operator-Exponentialfunktionen	19
2 Quantenmechanische Grundlagen	25
2.1 Zustände und Observable	25
2.2 Schrödinger- und Heisenberg-Bild	27
2.3 Zeitperiodische Systeme & Floquet-Theorie	32
3 Die Oszillator-Algebra	35
3.1 Der harmonische Oszillator	36
3.2 Verschiebungs- & Squeeze-Operatoren	41
3.3 Eigenwerte und Eigenzustände	44
3.3.1 Matricelemente	46
3.3.2 Kohärente Zustände	47
3.3.3 Gequetschte kohärente Zustände	52
3.4 Teilchen: Bosonen und Fermionen	54
3.5 Gekoppelte Oszillatoren	56
3.6 Anharmonische Oszillatoren	57
3.6.1 Der Morse-Oszillator	58
3.6.2 Das Pöschl-Teller-Potential	61
4 Drehimpuls und Spin	63
4.1 Die Drehimpuls-Algebra	63
4.2 Bahndrehimpuls und Spin	68
4.3 Kohärente Spinzustände	70
4.4 Die Schwinger-Transformation	72

5	Supersymmetrie	75
5.1	Die Superladung	75
5.2	Ein supersymmetrischer Oszillator	77
5.3	Supersymmetrische Quantenmechanik	78
5.4	Supersymmetrische Ketten und Forminvarianz	83
6	Lie-Algebren	89
6.1	Beispiele für Lie-Algebren	90
6.2	Einführung in die Strukturtheorie	95
6.3	Kanonische Ähnlichkeitstransformationen	102
6.4	Lie-Algebren der Dimension zwei	102
6.5	Einfache Lie-Algebren der Dimension drei	104
6.6	Die erweiterte Oszillator-Algebra	108
6.7	Deformierte Algebren	109
6.8	Treue Darstellungen und ihre Anwendungen	116
6.9	Exponentielle Operatorprodukte	124
7	Lie-algebraische Zeitentwicklung	129
7.1	Operator-Zeitentwicklung und Erwartungswerte	131
7.2	Oszillator-Systeme	133
7.2.1	Die einfachen $\mathfrak{su}(2)$ - und $\mathfrak{su}(1, 1)$ -Algebren	134
7.2.2	Die auflösbaren Algebren	138
7.2.3	Observable im Heisenberg-Bild	141
7.2.4	Matrixelemente und Übergangswahrscheinlichkeiten	143
8	Harmonischer Oszillator mit Dämpfung und Antrieb	145
8.1	Klassische und quantenmechanische Grenzyklen	147
8.2	Der ungedämpfte Oszillator	150
9	Erhaltungsgrößen und dynamische Invarianten	153
9.1	Integrable Systeme	153
9.2	Dynamische Invarianten	156
9.2.1	Der harmonische Oszillator	158
9.2.2	Zweiniveausysteme	163
10	Quantenmechanik im Phasenraum	165
10.1	Weyl-Symbole und Wigner-Dichten	167
10.2	Moyal-Produkt und Moyal-Klammer	169
10.3	Zeitentwicklung	172
10.4	Der harmonische Oszillator	175

11	Dynamik in angetriebenen Gittern	179
	11.1 Eindimensionale Tight-Binding-Dynamik.....	179
	11.1.1 Dynamische Invarianten.....	188
	11.1.2 Das Single-Band-Modell.....	189
	11.2 Zweidimensionale Tight-Binding-Systeme.....	190
	11.2.1 Zeitunabhängige Felder.....	193
	11.2.2 Lissajous-Dynamik.....	194
12	Mehrteilchen-Systeme	197
	12.1 Das Bose-Hubbard-Dimer.....	197
	12.2 Vielteilchen-Konversion.....	203
13	Aspekte nicht-hermitescher Dynamik	211
	13.1 Biunitäre Zeitentwicklung.....	213
	13.2 Der angetriebene gedämpfte harmonische Oszillator.....	215
	13.3 Nicht-hermitesche Zweiniveaudynamik.....	218
	13.4 Das PT-symmetrische Bose-Hubbard-Dimer.....	223
	13.5 Der Swanson-Oszillator.....	230
	13.5.1 Übergangsmatrixelemente.....	232
	13.5.2 Zeitentwicklung kohärenter Zustände.....	233
	13.5.3 Zeitentwicklung der Operatoren und Erwartungswerte.....	234
14	Offene Quantensysteme und Lindblad-Dynamik	239
	14.1 Lindblad-Dynamik.....	239
	14.2 Zweiniveausystem mit spontaner Emission.....	241
	14.3 Der gedämpfte harmonische Oszillator.....	244
	14.3.1 Eine spezielle Klasse von Lösungen.....	248
	14.3.2 Operatorevolution im Heisenberg-Bild.....	255
	14.3.3 Allgemeine Lindblad-Lösung.....	257
15	Lösungen der Aufgaben	269
A	Unendlichdimensionale Hilbert-Räume	315
B	Legendre-Polynome & Gauß-Integrale	319
	Index	321

1

Algebraische Grundlagen

Bevor wir uns dem zentralen Thema dieses Buchs nähern, den Lie-Algebren und einigen ihrer Anwendungen in der Quantenmechanik, ist es angebracht, uns zunächst einmal daran zu erinnern, was man eigentlich unter einer Algebra versteht. Dann wird eine wichtige algebraische Struktur vorgestellt, die Lie-Algebra, und, nachdem wir eine wichtige algebraische Funktion kennen gelernt haben, die Operator-Exponentialfunktion, können wir uns den algebraischen Größen der Quantenmechanik, den Observablen, zuwenden und der Beschreibung ihrer Zeitentwicklung.

Die grundlegende mathematische Struktur in der Quantenmechanik ist der **Hilbert-Raum**, benannt nach dem deutschen Mathematiker **David Hilbert** (1862–1943). Ein solcher **Hilbert-Raum** ist ein linearer Raum über den komplexen Zahlen, in dem ein Skalarprodukt definiert ist, der bezüglich der durch das Skalarprodukt induzierten Norm abgeschlossen ist und der separabel ist, das heißt, er enthält eine abzählbare dichte Menge. Dann existiert eine abzählbare orthonormierte Basis. Ein Beispiel eines solchen Hilbert-Raums ist der Raum der Folgen komplexer Zahlen mit endlicher Summe ihrer Betragsquadrate oder sein kontinuierliches Komplement, der Raum der (Lebesgue-) quadratintegrierbaren Funktionen auf der reellen Achse oder einem Bereich davon.

Durch Einschränkung auf einen Hilbert-Raum werden zwar für uns Quantenphysiker viele unangenehme Eigenschaften allgemeinerer unendlichdimensionaler Räume ausgeschlossen, aber bei weitem nicht alle. In diesem Buch werden wir uns in den meisten Fällen auf endlichdimensionale Räume beschränken können, aber nicht immer, denn nicht alle physikalischen Systeme lassen eine Darstellung durch endlichdimensionale Hilbert-Räume zu. Ein simples Beispiel liefern die Orts- und Impulsoperatoren, sodass wir uns notwendigerweise mit Problemen unendlichdimensionaler Räume beschäftigen müssen. Einiges dazu findet man im Anhang A. Hier werden wir, um die Lesbarkeit des Textes zu verbessern, so vorgehen dass wir uns hauptsächlich mit Systemen befassen, die eine endlichdimensionale Darstellung zulassen. Ist das nicht der Fall, kann man oft problemlos so vorgehen wie im endlichdimensionalen Fall. Natürlich nicht immer, und dann wird in aller Regel darauf hingewiesen.

Die Elemente unseres Hilbert-Raums werden wir bequemerweise in der Dirac-Notation durch ein Ket-Symbol wie $|\psi\rangle$ oder $|\phi\rangle$ beschreiben. Wir bezeichnen sie auch als *Vektoren* oder als *Zustände* eines Quantensystems. Die adjungierten Vektoren, also die Elemente des Dualraums, schreiben wir als $|\phi\rangle^\dagger = \langle\phi|$, ein Bra-Symbol, was den Vorteil hat, dass man das Skalarprodukt zweier Vektoren $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$ als $\langle\phi|\psi\rangle$ schreiben kann, also als eine Klammer (engl. „bracket“ oder „Bra-Ket“). In einer orthonormierten Basis $|n\rangle$, $n = 1, 2, \dots$ mit $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$, können wir die Vektoren als

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad \text{mit} \quad c_n = \langle n|\psi\rangle \quad \text{und} \quad \langle\psi| = \sum_n c_n^* \langle n| \quad (1.1)$$

darstellen, oder kurz als Spaltenvektor $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots)^T$ bzw. Zeilenvektor $\mathbf{c}^\dagger = (c_1^*, c_2^*, \dots)$. Damit erhalten wir für das Skalarprodukt mit einem Vektor $|\phi\rangle = \sum_m d_m |m\rangle$

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_{m,n} d_m^* c_n \langle m | n \rangle \sum_{m,n} d_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_n d_n^* c_n = \mathbf{d}^\dagger \mathbf{c}. \quad (1.2)$$

■ 1.1 Operatoren & Matrizen

Hier wollen wir uns zunächst auf endlichdimensionale Hilbert-Räume mit der Dimension N beschränken, also der maximalen Anzahl linear unabhängiger Vektoren. Einen (linearen) Operator auf diesem Raum kennzeichnen wir durch ein Dachsymbol wie \hat{A} . Er beschreibt eine lineare Abbildung $|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$, wobei man gelegentlich auch die Schreibweise $|\hat{A}\psi\rangle$ verwendet.

In der orthonormierten Basis $|1\rangle, \dots, |N\rangle$ lautet diese Abbildung

$$\mathbf{c}' = \mathbf{A}\mathbf{c} \quad \text{mit einer } N \times N\text{-Matrix } \mathbf{A} \text{ mit Matrixelementen } \mathbf{A}_{nm} = \langle m | \hat{A} | n \rangle, \quad (1.3)$$

die den Vektor $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_N)^T$ auf den Vektor $\mathbf{c}' = (c'_1, c'_2, \dots, c'_N)^T$ abbildet. Es handelt sich also hier um quadratische Matrizen mit komplexen Matrixelementen. Mit solchen Matrizen kann man algebraische Rechenoperationen durchführen, man kann sie mit komplexen Zahlen multiplizieren, sie addieren und miteinander multiplizieren. Sie bilden eine Algebra (mehr darüber im folgenden Abschnitt 1.2). Wichtig ist, dass das Matrixprodukt nicht kommutativ ist, also im Allgemeinen $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$. Die Differenz

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA}, \quad (1.4)$$

bezeichnet als der **Kommutator** von \mathbf{A} und \mathbf{B} , spielt in der Quantenmechanik eine wichtige Rolle.

Im Folgenden werden die Determinante $\det \mathbf{A}$ und die Spur $\text{spur} \mathbf{A}$, also die Summe der Diagonalelemente, dieser Matrizen von Bedeutung sein. Sie erfüllen die Produktrelationen

$$\det(\mathbf{AB}) = \det(\mathbf{BA}) = \det \mathbf{A} \det \mathbf{B} \quad \text{und} \quad \text{spur}(\mathbf{AB}) = \text{spur}(\mathbf{BA}), \quad (1.5)$$

aus denen folgt, dass Determinante und Spur invariant sind gegenüber Ähnlichkeitstransformationen (siehe Gleichung (1.11)).

Genauer betrachtet, bildet die Matrix einen Teilraum, ihren **Definitionsbereich**, auf den **Bildraum** ab, dessen Dimension als **Rang** der Matrix oder des Operators bezeichnet wird. Der Teilraum, der auf den Nullvektor $|\emptyset\rangle$ abgebildet wird, heißt **Kern** der Abbildung und die Dimensionen von Kern und Bild summieren zu N . Die Inverse \mathbf{A}^{-1} der Matrix \mathbf{A} , bzw. des Operators, mit $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{I}$ und $(\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$ existiert genau dann auf dem gesamten Raum, wenn die Determinante ungleich null ist. Klarerweise besteht dann der Kern nur aus dem **Nullvektor** $|\emptyset\rangle$.

Für spezielle (vom Nullvektor verschiedene) Vektoren, den **Eigenvektoren**, wird die Abbildung durch \hat{A} besonders einfach, sie ist eine Multiplikation mit einer komplexen Zahl λ , dem **Eigenwert**. Wenn wir den Eigenvektor als $|\lambda\rangle$ bezeichnen, können wir schreiben:

$$\hat{A}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle. \quad (1.6)$$

In machen Fällen findet man diese Eigenwerte auf sehr einfache Weise, zum Beispiel für einen **nilpotenten** Operator, also für einen Operator mit $\hat{A}^n = 0$ für eine natürliche Zahl n :

Aufgabe 1.1 (Lösung Seite 269): Beweisen Sie, dass der Eigenwert eines nilpotenten Operators gleich null ist.

Die Menge aller Eigenvektoren (plus dem Nullvektor) eines Eigenwertes bildet einen Teilraum, den **Eigenraum** des Eigenwertes. Seine Dimension bezeichnet man als den **Entartungsgrad** des Eigenwertes; ist er größer als eins, heißt der Eigenwert **entartet**. Die Menge aller Eigenwerte nennt man das **Spektrum** von \hat{A} und es gilt

$$\det \mathbf{A} = \prod_n \lambda_n \quad \text{und} \quad \text{spur} \mathbf{A} = \sum_n \lambda_n, \quad (1.7)$$

für ein diskretes Spektrum mit abzählbar vielen Eigenwerten, wobei wir vereinbaren wollen, dass in derartigen Summen entartete Eigenwerte gemäß ihrem Entartungsgrad mehrfach gezählt werden.

In vielen Fällen begegnen wir in der Quantenmechanik Matrizen, die die Symmetrierelation $\mathbf{A}_{nm} = \mathbf{A}_{mn}^*$ erfüllen. Solche Matrizen nennt man **hermitesch**. Der **adjungierte Operator** \hat{A}^\dagger , definiert durch

$$\langle \hat{A}^\dagger \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | \hat{A} \varphi \rangle \quad (1.8)$$

für alle Vektoren aus dem Definitionsbereich, stimmt dann mit \hat{A} überein. Es gilt also $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ für einen solchen hermiteschen Operator bzw. $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$ für hermitesche Matrizen. Stimmt der adjungierte Operator mit dem inversen überein, $\hat{A}^\dagger = \hat{A}^{-1}$, heißt der Operator **unitär**. Operatoren, die mit ihrem adjungierten Operator vertauschen, $\hat{A}\hat{A}^\dagger = \hat{A}^\dagger\hat{A}$, nennt man **normal**, und ein Operator \hat{A} mit $\langle \psi | \hat{A} \psi \rangle \geq 0$ für alle $|\psi\rangle$ heißt **positiv** und hat folglich nur nicht-negative Eigenwerte.

Hermitesche Matrizen haben reelle Eigenwerte und ihre Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal. Im Falle einer Entartung lässt sich eine orthogonale Basis des Eigenraums konstruieren. Ist der Rang der Matrix gleich N , existiert daher eine orthonormierte Basis von Eigenvektoren mit

$$\hat{A}|n\rangle = \lambda_n|n\rangle, \quad \lambda_n \in \mathbb{R}, \quad \langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \quad n = 1, \dots, N. \quad (1.9)$$

Die Eigenvektoren erlauben eine **Zerlegung der Einheit** sowie eine **Spektraldarstellung** des Operators:

$$\hat{I} = \sum_{n=1}^N |n\rangle\langle n| \quad \text{und} \quad \hat{A} = \sum_{n=1}^N \lambda_n |n\rangle\langle n|. \quad (1.10)$$

Die Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{A}' oder die Operatoren \hat{A} und \hat{A}' heißen **ähnlich**, wenn eine invertierbare Matrix \mathbf{S} bzw. ein Operator \hat{S} existiert mit

$$\mathbf{A}' = \mathbf{S}\mathbf{A}\mathbf{S}^{-1}. \quad (1.11)$$

Die Transformation $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}'$ heißt **Ähnlichkeitstransformation**, mit den folgenden Eigenschaften, die wir hier in der Operatorschreibweise formulieren:

(1) Die Transformation $\hat{A} \rightarrow \hat{A}' = \hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1}$ ist eine **Äquivalenzrelation**, das heißt, sie ist *reflexiv* (\hat{A} ist ähnlich zu sich selbst), *symmetrisch* (Wenn \hat{A} ähnlich ist zu \hat{B} , dann ist \hat{A} ähnlich zu \hat{B} .)

und *transitiv* (Wenn \hat{A} ähnlich ist zu \hat{B} und \hat{B} zu \hat{C} , dann ist \hat{A} ähnlich zu \hat{C}). Ähnliche Matrizen bilden also eine *Äquivalenzklasse*.

(2) Die Operatoren \hat{A} und \hat{A}' haben die gleichen Eigenwerte. Davon wollen wir uns kurz überzeugen. Sei λ Eigenwert von \hat{A} . Dann multiplizieren wir die Eigenwertgleichung $\hat{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ mit \hat{S} und fügen die Identität $\hat{S}^{-1}\hat{S}$ ein:

$$\hat{S}\hat{A}|\psi\rangle = \lambda\hat{S}|\psi\rangle \implies \hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1}\hat{S}|\psi\rangle = \lambda\hat{S}|\psi\rangle \implies \hat{A}'|\psi'\rangle = \lambda|\psi'\rangle. \quad (1.12)$$

Also ist λ auch Eigenwert von \hat{A}' zum Eigenvektor $|\psi'\rangle = \hat{S}|\psi\rangle$.

(3) Summen und Produkte von Operatoren bleiben bei der Transformation erhalten, das heißt, mit $\hat{B}' = \hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1}$ gilt

$$\begin{aligned} (\hat{A} + \hat{B})' &= \hat{S}(\hat{A} + \hat{B})\hat{S}^{-1} = \hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1} + \hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1} = \hat{A}' + \hat{B}', \\ (\hat{A}\hat{B})' &= \hat{S}\hat{A}\hat{B}\hat{S}^{-1} = \hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1}\hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1} = \hat{A}'\hat{B}'. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Damit übertragen sich auch die Kommutatorrelationen wie $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$ auf $[\hat{A}', \hat{B}'] = \hat{C}'$.

(4) Ähnliche Matrizen haben die gleiche Determinante und die gleiche Spur, was entweder aus der Produktrelation (1.5) folgt oder aus der Invarianz der Eigenwerte und Gleichung (1.7).

Bisher haben wir uns auf endlichdimensionale Hilbert-Räume beschränkt. **Unendlichdimensionale Hilbert-Räume** erscheinen auf den ersten Blick als Grenzfall endlichdimensionaler für sehr große Werte der Dimension. Aber leider ist es bei Weitem nicht so einfach und es treten viele neue Phänomene auf. Beginnen wir mit einem wichtigen Beispiel für den Physiker. Die Orts- und der Impulsoperatoren, bezeichnet als \hat{q} bzw. \hat{p} , vertauschen nicht, sondern ihr Kommutator ist gleich

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q} = i\hbar\hat{I}, \quad (1.14)$$

also proportional zur Identität \hat{I} . Hier sieht man sofort, dass keine endlichdimensionale Darstellung dieser Operatoren möglich ist, denn die Spur eines Kommutators endlichdimensionaler Matrizen ist gleich null (vgl. Gleichung (1.5)), ganz im Gegensatz zur Spur von $i\hbar\hat{I}$ für $\hbar \neq 0$.

Wir müssen uns also in der Quantenmechanik mit den Problemen unendlichdimensionaler Räume und mit den Eigenschaften von Operatoren auf diesen Räumen befassen. Das ist allerdings ein weites Feld und wir können hier nur einen ersten Einstieg im Anhang A anbieten.

■ 1.2 Algebren

Als **Algebra** bezeichnet man eines der grundlegenden Gebiete der Mathematik, das sich mit den Eigenschaften von Rechenoperationen befasst. Mehr über die Geschichte der Algebra und ihrer Teilgebiete findet man bei <https://de.wikipedia.org/wiki/Algebra>.

Hier werden wir unter einer Algebra ausschließlich eine mathematische Struktur verstehen, den Vektorraum (auch linearer Raum) über dem Körper \mathbb{R} der reellen oder \mathbb{C} der komplexen Zahlen, in dem ein sogenanntes Produkt \cdot zweier Elemente erklärt ist mit den folgenden Eigenschaften: Für alle Elemente x, y, z der Algebra und für alle λ aus dem Körper gilt

$$(x + y) \cdot z = x \cdot y + y \cdot z \quad , \quad x \cdot (y + z) = x \cdot y + x \cdot z \quad , \quad \lambda(x \cdot y) = (\lambda x) \cdot y = x \cdot (\lambda y). \quad (1.15)$$

Eine kommutative Algebra ist eine Algebra, in der das **Kommutativgesetz**

$$x \cdot y = y \cdot x \quad (1.16)$$

erfüllt ist. In einer assoziativen Algebra gilt das **Assoziativgesetz**

$$(x \cdot y) \cdot z = x \cdot (y \cdot z) = x \cdot y \cdot z. \quad (1.17)$$

Oft, aber nicht immer, besitzt die Algebra ein **Einselement**, das bei der Multiplikation nichts ändert.

Beispiele für Algebren sind:

(a) Die Funktionen der reellen oder komplexen Zahlen. Dabei wird das Produkt zweier solcher Funktionen f und g punktweise definiert,

$$(f \cdot g)(x) = f(x)g(x), \quad (1.18)$$

was offensichtlich die Forderungen (1.15) erfüllt. Diese Algebra ist kommutativ, assoziativ und besitzt ein Einselement, die Funktion, die alles auf die Eins abbildet.

(b) Die linearen Abbildungen eines N -dimensionalen linearen Raums über dem Körper \mathbb{R} der reellen oder \mathbb{C} der komplexen Zahlen auf sich selbst mit der Hintereinanderschaltung als Produkt. Dieses Produkt ist assoziativ, aber nicht kommutativ, und es existiert ein Einselement, die Identität, die jeden Vektor auf sich selbst abbildet. Wir kennzeichnen diese linearen Abbildungen oder linearen Operatoren durch ein Dachsymbol, also beispielsweise als \hat{A} oder \hat{a} . Die Identität bezeichnen wir mit \hat{I} . Es gilt also

$$\hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} \quad , \quad \hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A} \quad (\text{im Allg.}) \quad , \quad \hat{A}\hat{I} = \hat{I}\hat{A} = \hat{A}. \quad (1.19)$$

Diese Operatoren lassen sich bei einer festgelegten orthonormierten Basis durch eine komplexe oder reelle $N \times N$ -Matrix darstellen, mit dem Matrixprodukt als Operatorprodukt.

Allgemein bezeichnet man eine Abbildung einer abstrakten Algebra auf die Matrizen, die das Produkt der Algebra auf das Matrixprodukt abbildet (ein Homomorphismus), als eine **Darstellung** der Algebra. Ist diese Abbildung bijektiv, also ein Isomorphismus, so nennt man die Darstellung **treu**.

Einige spezielle Algebren sind in der Quantenmechanik von Bedeutung, wie beispielsweise die beschränkten Operatoren in unendlichdimensionalen Räumen, die eine **Banach-Algebra** bilden, oder ihre Spezialisierung als eine **C^* -Algebra**. Mehr darüber findet man in Anhang A. Insbesondere die **Lie-Algebren**, benannt nach dem norwegischen Mathematiker Sophus Lie (1842–1899), sind von großer Bedeutung und wir werden uns im Folgenden näher mit ihnen befassen. Eine Lie-Algebra ist ein Vektorraum mit einem **Lie-Produkt**, das man üblicherweise als ein Klammersymbol, die **Lie-Klammer** $[\ , \]$, schreibt. Damit wird jedem geordneten Paar (A, B) ein Element $[A, B]$ zugeordnet. Dieses Produkt muss die folgenden Regeln erfüllen:

- Es gilt $[A, A] = 0$ für alle A .
- Das Produkt ist bilinear. Für alle komplexen Zahlen a, b und alle A, B, C gilt

$$[aA + bB, C] = a[A, C] + b[B, C] \quad , \quad [C, aA + bB] = a[C, A] + b[C, B]. \quad (1.20)$$

- Es gilt die **Jacobi-Regel**

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0, \quad (1.21)$$

benannt nach dem deutschen Mathematiker Carl Gustav Jacob Jacobi (1804–1851).

Aus den ersten beiden Eigenschaften folgt

$$0 = [X + Y, X + Y] = [X, X] + [X, Y] + [Y, X] + [Y, Y] = [X, Y] + [Y, X], \quad (1.22)$$

und daher ist das Lie-Produkt antisymmetrisch:

$$[X, Y] = -[Y, X]. \quad (1.23)$$

Wir bezeichnen in einer Lie-Algebra \mathbb{L} die Menge der Elemente

$$\{X_1, X_2, X_3, \dots\} \quad \text{mit} \quad X = \sum_j \lambda_j X_j, \quad \lambda_j \in \mathbb{C} \quad \text{für alle} \quad X \in \mathbb{L} \quad (1.24)$$

als ein **Erzeugendensystem** der Algebra, und als eine **Basis**, falls diese Elemente linear unabhängig sind. Ihre Anzahl ist die **Dimension** der Algebra. Alternativ lässt sich ein Erzeugendensystem auch als eine Menge von Elementen der Algebra verstehen, die unter den erlaubten Operationen, also den Linearkombinationen und der Lie-Klammer, schließt. Eine Basis ist dann ein Minimalsystem mit dieser Eigenschaft.

Als **Poisson-Algebra** (benannt nach dem französischen Mathematiker und Physiker Siméon Denis Poisson (1781–1840)) bezeichnet man eine assoziative Lie-Algebra, in der die **Leibniz-Regel**

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (1.25)$$

erfüllt ist. Der Name bezieht sich auf den deutschen Philosophen und Mathematiker Gottfried Wilhelm Leibniz (1646–1716).

Ein Beispiel für eine Lie-Algebra sind die komplexen $N \times N$ -Matrizen $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \dots$ mit dem Matrixprodukt \mathbf{AB} . Dabei liefert der **Kommutator**

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA} \quad (1.26)$$

eine Lie-Klammer. Da das Matrixprodukt assoziativ ist und der Kommutator die Leibniz-Regel erfüllt (bitte nachrechnen!), ist dies eine Poisson-Algebra. Das Gleiche gilt auch für die linearen Operatoren \hat{A}, \hat{B}, \dots auf einem Hilbert-Raum.

Aufgabe 1.2 (Lösung Seite 269): Machen Sie sich klar, dass jede assoziative Algebra (mit Elementen x, y, \dots und Multiplikation $x \cdot y$) automatisch zu einer Lie-Algebra wird, wenn man die Lie-Klammer als Kommutator $[x, y] = x \cdot y - y \cdot x$ definiert.

Ein weiteres physikalisch relevantes Beispiel einer Lie-Algebra sind die glatten Funktionen auf einer $2n$ -dimensionalen symplektischen Mannigfaltigkeit mit der **Poisson-Klammer** als Lie-Klammer, die Phasenraumfunktionen der klassischen Mechanik mit den kanonischen Orts- und Impulskoordinaten $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots, q_n)$ und $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_n)$ für ein System mit n Freiheitsgraden.¹ Die Lie-Klammer ist hier die Poisson-Klammer zweier Phasenraumfunktionen $A(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ und $B(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, definiert als

$$\{A, B\} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial B}{\partial q_j} \right). \quad (1.27)$$

¹ Diese Schreibweise soll in keiner Weise unterstellen, dass es sich hier um Vektoren handelt!

Auch diese Lie-Klammer erfüllt die Leibniz-Regel, was man durch direkte Rechnung bestätigen kann, und liefert folglich eine Poisson-Algebra (daher wohl die Namensgebung). Mehr dazu auf Seite 92. Weitere für die Physik interessante Algebren sind Clifford-, Grassmann-, Kac-Moody-, und Virasoro-Algebren, auf die wir hier aber nicht eingehen können.

■ 1.3 Operator-Exponentialfunktionen

In diesem Abschnitt werden wir einige elementare Techniken kennenlernen, die uns helfen, die Operatoren einer Algebra zu manipulieren. Wir wollen hier zur Vereinfachung unterstellen, dass unsere Operatoren durch endliche quadratische komplexwertige Matrizen beschrieben werden können. Zunächst wollen wir uns mit Operatorfunktionen beschäftigen, wobei insbesondere die Exponentiation von Bedeutung sein wird.

Funktionen von Operatoren lassen sich durch eine Potenzreihe

$$f(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \hat{A}^n \tag{1.28}$$

definieren, wobei natürlich noch die Fragen der Konvergenz dieser Reihe zu klären sind. Dieser Zugang zu Operatorfunktionen beruht auf der bekannten Taylor-Reihe und ist zwar naheliegender, aber in keiner Weise alternativlos und wir notieren als weiteres Beispiel die oft benutzte Definition

$$f(\hat{A}) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} f(z)(z\hat{I} - \hat{A})^{-1} dz \tag{1.29}$$

mit einer Integration über eine geschlossene Kurve Γ in der komplexen Ebene, die alle Eigenwerte von \hat{A} umschließt, eine offensichtliche Matrixversion des Integraltheorems von Cauchy. Da die Matrixelemente von $(z\hat{I} - \hat{A})^{-1}$ auf Γ analytisch sind, ist $f(\hat{A})$ durch (1.29) wohldefiniert, falls die Funktion $f(z)$ analytisch ist.

Von besonderer Bedeutung für quantenmechanische Anwendungen ist die Exponentialfunktion $e^{\hat{A}}$, deren Existenz eine direkte Konsequenz der Cauchy-Definition (1.29) ist. Hier wollen wir uns aber auf der Basis der Reihendarstellung

$$e^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!} \quad \text{oder auch} \quad e^{z\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n \hat{A}^n}{n!} \tag{1.30}$$

davon überzeugen. Es seien also a_{ij} die Matrixelemente der $m \times m$ -Matrix \hat{A} mit $a = \max |a_{ij}|$ und $a_{ij}^{(n)}$ die Matrixelemente von \hat{A}^n . Dann ist

$$|a_{ij}^{(2)}| = \left| \sum_{k=1}^m a_{ik} a_{kj} \right| \leq \sum_{k=1}^m a^2 = ma^2, \quad |a_{ij}^{(3)}| = \left| \sum_{k=1}^m a_{ik}^{(2)} a_{kj} \right| \leq \sum_{k=1}^m (ma^2)a = m^2 a^3, \tag{1.31}$$

und man erhält induktiv $|a_{ij}^{(n)}| \leq m^{n-1} a^n$. Dann folgt sofort für die Matrixelemente die Reihe

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_{ij}^{(n)}}{n!} \leq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|a_{ij}^{(n)}|}{n!} \leq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{m^{n-1} a^n}{n!} \leq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ma)^n}{n!} = e^{ma}. \tag{1.32}$$

Die Reihe ist also absolut konvergent.

Für kleine Matrizen lässt sich der Matrixexponent analytisch berechnen und im Falle nilpotenter Matrizen, also Matrizen, bei der eine ihrer Potenzen die Nullmatrix ergibt, bricht die Reihenentwicklung ab, was auch zu einfachen Resultaten führt.

Für endlichdimensionale Räume ist die Definition der Exponentialfunktion einer Matrix oder eines Operators auf diese Weise durchführbar. Wie sieht es aber für unendlichdimensionale Räume aus (vgl. Anhang A). In der Quantenmechanik werden von uns Physikern in aller Regel Exponentialfunktionen auch von unbeschränkten Operatoren benutzt, meist ohne auch nur im Mindesten auf Existenzfragen einzugehen, und auch in diesem Buch werden wir so vorgehen. Das sieht der Mathematiker naturgemäß völlig anders, und wer an derartigen Fragen interessiert ist, der erhält hier einen guten ersten Eindruck von den auftretenden Problemen: <https://physics.stackexchange.com/questions/574621/a-rigorous-definition-of-the-exponential-of-an-operator-in-qm>.

Die Abbildung $t \rightarrow \hat{U}(t) = e^{t\hat{A}}$ mit $t \in \mathbb{R}$ beschreibt eine glatte Kurve in der allgemeinen linearen Gruppe. Diese $\hat{U}(t)$ enthalten die Identität (für $t = 0$) und bilden wegen $e^{t\hat{A}}e^{s\hat{A}} = e^{(t+s)\hat{A}}$ eine (kommutative) Untergruppe. Sie sind Lösungen der Differentialgleichung $\frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{A}\hat{U}(t)$ mit $\hat{U}(0) = \hat{I}$.

Oft werden wir es mit **Ähnlichkeitstransformationen** wie

$$\hat{B}' = e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} \quad (1.33)$$

zu tun haben (vgl. Seite 15). Dabei sind die Kommutatorrelationen invariant und auch die Funktionen übertragen sich, denn aus der Produkttransformation (1.13) folgt $(\hat{B}^n)' = (\hat{B}')^n$ und folglich für Funktionen $f(\hat{B}) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{B}^n$ mit $c_n \in \mathbb{C}$

$$(f(\hat{B}))' = f(\hat{B}') \quad \text{oder ausgeschrieben} \quad e^{\hat{A}}f(\hat{B})e^{-\hat{A}} = f(e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}}). \quad (1.34)$$

Von großer Bedeutung ist die **Multikommutatorentwicklung**

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots \quad (1.35)$$

auch bekannt unter dem Namen **Hadamard-Lemma** (nach dem französischen Mathematiker **Jaques Hadamard** (1865-1963)).

Die sogenannte **adjungierte Darstellung**,

$$(\text{ad } \hat{A})\hat{B} = [\hat{A}, \hat{B}], \quad (1.36)$$

eine Darstellung von \hat{B} mithilfe von \hat{A} , ermöglicht es uns, Ausdrücke wie $(\text{ad } \hat{A})^2 \hat{B} = [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]$, $(\text{ad } \hat{A})^3 \hat{B} = [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]]$, usw. zu bilden. Damit lässt sich die Multikommutatorentwicklung als

$$e^{\text{ad } \hat{A}} \hat{B} = e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} \quad (1.37)$$

schreiben, oder auch, wenn wir \hat{A} durch $z\hat{A}$ mit $z \in \mathbb{C}$ ersetzen, als

$$e^{z\text{ad } \hat{A}} \hat{B} = e^{z\hat{A}}\hat{B}e^{-z\hat{A}} = \hat{B} + z[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{z^2}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{z^3}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots \quad (1.38)$$

Einen ersten Eindruck vom Entstehen der Multikommutatorreihe (1.35) erhält man, indem man einfach anfängt, sie zu berechnen:

$$\begin{aligned}
 e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} &= \left(1 + \hat{A} + \frac{1}{2} \hat{A}^2 + \dots\right) \hat{B} \left(1 - \hat{A} + \frac{1}{2} \hat{A}^2 - \dots\right) \\
 &= \hat{B} + \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} + \frac{1}{2} \hat{A}^2 \hat{B} - \hat{A} \hat{B} \hat{A} + \frac{1}{2} \hat{B} \hat{A}^2 + \dots \\
 &= \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2} (\hat{A}(\hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}) - (\hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}) \hat{A}) + \dots \\
 &= \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots
 \end{aligned} \tag{1.39}$$

Wir wollen die Formel (1.35) aber ausführlich beweisen, und zwar auf zwei Arten:

Wir zeigen zunächst

$$(\text{ad } \hat{A})^k \hat{B} = k! \sum_{j=0}^k \frac{(-1)^j}{j!(k-j)!} \hat{A}^{k-j} \hat{B} \hat{A}^j \tag{1.40}$$

durch vollständige Induktion. Die Formel ist sicher richtig für $k = 0$. Unterstellen wir jetzt diese Formel für k und ermitteln ihre Gültigkeit für $k + 1$, was den längsten Teil unseres Beweises ausmacht:

$$\begin{aligned}
 (\text{ad } \hat{A})^{k+1} \hat{B} &= \text{ad } \hat{A} ((\text{ad } \hat{A})^k \hat{B}) = [\hat{A}, (\text{ad } \hat{A})^k \hat{B}] = k! \sum_{j=0}^k \frac{(-1)^j}{j!(k-j)!} [\hat{A}, \hat{A}^{k-j} \hat{B} \hat{A}^j] \\
 &= k! \sum_{j=0}^k \frac{(-1)^j}{j!(k-j)!} \hat{A}^{k+1-j} \hat{B} \hat{A}^j - k! \sum_{j=0}^k \frac{(-1)^j}{j!(k-j)!} \hat{A}^{k-j} \hat{B} \hat{A}^{j+1} \\
 &= k! \sum_{j=0}^k \frac{(-1)^j}{j!(k-j)!} \hat{A}^{k+1-j} \hat{B} \hat{A}^j + k! \sum_{j=1}^{k+1} \frac{(-1)^j}{(j-1)!(k+1-j)!} \hat{A}^{k+1-j} \hat{B} \hat{A}^j.
 \end{aligned} \tag{1.41}$$

Wir spalten bei den beiden Summen den ersten bzw. letzten Summanden ab, formen um,

$$\begin{aligned}
 &\frac{k!}{k!} \hat{A}^{k+1} \hat{B} + k! \sum_{j=1}^k \frac{(-1)^j (k+1-j)}{j!(k+1-j)!} \hat{A}^{k+1-j} \hat{B} \hat{A}^j + k! \sum_{j=1}^k \frac{(-1)^j j}{j!(k+1-j)!} \hat{A}^{k+1-j} \hat{B} \hat{A}^j + \frac{k!}{k!} (-1)^{k+1} \hat{B} \hat{A}^{k+1} \\
 &= \frac{k!}{k!} \hat{A}^{k+1} \hat{B} + k! \sum_{j=1}^k \frac{(-1)^j (k+1-j)}{j!(k+1-j)!} (k+1-j+j) \hat{A}^{k+1-j} \hat{B} \hat{A}^j + \frac{k!}{k!} (-1)^{k+1} \hat{B} \hat{A}^{k+1} \\
 &= \frac{(k+1)!}{(k+1)!} \hat{A}^{k+1} \hat{B} + (k+1)! \sum_{j=1}^k \frac{(-1)^j}{j!(k+1-j)!} \hat{A}^{k+1-j} \hat{B} \hat{A}^j + \frac{(k+1)!}{k+1} (-1)^{k+1} \hat{B} \hat{A}^{k+1} \\
 &= (k+1)! \sum_{j=0}^{k+1} \frac{(-1)^j}{j!(k+1-j)!} \hat{A}^{k+1-j} \hat{B} \hat{A}^j,
 \end{aligned} \tag{1.42}$$

und erhalten so die gleiche Formel auch für $k + 1$.

Jetzt folgen nur noch wenige Schritte. Wir setzen für $e^{\hat{A}}$ und $e^{-\hat{A}}$ Reihenentwicklungen ein und erhalten mit unserer Formel (1.40)

$$\begin{aligned}
 e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{B}} &= \sum_{n,j=0}^{\infty} \frac{1}{n! j!} \hat{A}^n \hat{B} (-\hat{A})^j \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^k \frac{(-1)^j}{j!(k-j)!} \hat{A}^{k-j} \hat{B} (-\hat{A})^j \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (\text{ad } \hat{A})^k \hat{B} = e^{\text{ad } \hat{A}} \hat{B},
 \end{aligned} \tag{1.43}$$

also die Multikommutatorreihe (1.35). Einen schnelleren Beweis liefert die folgende Aufgabe:

Aufgabe 1.3 (Lösung Seite 269): Beweisen Sie die Multikommutatorentwicklung (1.38) in der Form

$$\hat{F}(z) = e^{z\hat{A}}\hat{B}e^{-z\hat{A}} = \hat{B} + z[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{z^2}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{z^3}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots$$

mit $z \in \mathbb{C}$, indem Sie die Funktion $\hat{F}(z)$ in eine Taylor-Reihe entwickeln.

Die Multikommutatorreihe (1.35) vereinfacht sich beträchtlich, wenn der Kommutator von \hat{A} und \hat{B} mit dem Operator \hat{A} vertauscht. Dann gilt

$$e^{z\hat{A}}\hat{B}e^{-z\hat{A}} = \hat{B} + z[\hat{A}, \hat{B}] \quad \text{falls} \quad [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0. \quad (1.44)$$

Das können wir beispielsweise verwenden, um die **Baker-Campbell-Hausdorff-Gleichung** (kurz **BCH-Formel**)

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]} = e^{\hat{B}}e^{\hat{A}}e^{+\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]} \quad \text{für} \quad [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0. \quad (1.45)$$

zu beweisen. Dazu differenzieren wir $\hat{F}(z) = e^{z\hat{A}}e^{z\hat{B}}$ nach $z \in \mathbb{C}$,

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{F}}{dz} &= \hat{A}e^{z\hat{A}}e^{z\hat{B}} + e^{z\hat{A}}e^{z\hat{B}}\hat{B} = \hat{A}e^{z\hat{A}}e^{z\hat{B}} + e^{z\hat{A}}\hat{B}e^{z\hat{B}} \\ &= \hat{A}e^{z\hat{A}}e^{z\hat{B}} + e^{z\hat{A}}\hat{B}e^{-z\hat{A}}e^{z\hat{A}}e^{z\hat{B}} = (\hat{A} + e^{z\hat{A}}\hat{B}e^{-z\hat{A}})\hat{F}(z) \\ &= (\hat{A} + \hat{B} + z[\hat{A}, \hat{B}])\hat{F}(z), \end{aligned} \quad (1.46)$$

wobei Gleichung (1.44) benutzt wurde. Da $\hat{A} + \hat{B}$ mit $[\hat{A}, \hat{B}]$ kommutiert, können wir problemlos integrieren, erhalten mit $\hat{F}(0) = \hat{I}$

$$\hat{F}(z) = e^{\hat{A}+\hat{B} + \frac{z^2}{2}[\hat{A}, \hat{B}]} = e^{\hat{A}+\hat{B}}e^{\frac{z^2}{2}[\hat{A}, \hat{B}]} \quad (1.47)$$

und schließlich mit $z = 1$ und Multiplikation von rechts mit $e^{\frac{z^2}{2}[\hat{A}, \hat{B}]}$ die erste Gleichung in (1.45). Die zweite folgt durch Vertauschung von \hat{A} und \hat{B} .

In quantenmechanischen Anwendungen stoßen wir oft auf Exponentialfunktionen wie $e^{-\beta\hat{H}}$, beispielsweise bei der Boltzmann-Verteilung in der statistischen Physik mit dem Hamilton-Operator \hat{H} oder für den Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$, eine Lösung der Schrödinger-Gleichung $i\hbar\frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{H}\hat{U}$ für einen zeitunabhängigen Hamilton-Operator \hat{H} (mehr über den Zeitentwicklungsoperator in Abschnitt 2.2).

Parameterdifferentiation: In vielen Fällen hängt der Operator \hat{H} in der Exponentialfunktion von einem Parameter ab, den wir hier als λ bezeichnen wollen. Dies könnte beispielsweise für ein explizit zeitabhängiges System die Zeit sein. Wie differenzieren wir also die Funktion $e^{-\beta\hat{H}(\lambda)}$ nach dem Parameter λ ? Bevor man hier voreilige Formeln notiert, sollte man sich klar machen, dass die Ableitung $\partial\hat{H}/\partial\lambda$ nicht mit \hat{H} oder $e^{-\beta\hat{H}}$ vertauscht. Die Antwort ist also ein wenig komplizierter, nämlich

$$\frac{\partial}{\partial\lambda} e^{-\beta\hat{H}(\lambda)} = -e^{-\beta\hat{H}} \int_0^\beta e^{+u\hat{H}} \frac{\partial\hat{H}}{\partial\lambda} e^{-u\hat{H}} du. \quad (1.48)$$

Hier wird über die Ähnlichkeitstransformation $e^{-u\hat{H}}\frac{\partial\hat{H}}{\partial\lambda}e^{-u\hat{H}}$ (siehe Gleichung (1.33)) der partiellen Ableitung von \hat{H} integriert.

Aufgabe 1.4 (Lösung Seite 270): Beweisen Sie die Gleichung (1.48), indem Sie zeigen, dass beide Seiten dieser Gleichung, nennen wir sie $\hat{F}(\beta)$, die Differentialgleichung

$$\frac{\partial \hat{F}}{\partial \beta} = -\hat{H}\hat{F}(\beta) - \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} e^{-\beta \hat{H}}$$

mit $\hat{F}(0) = 0$ erfüllen.

2

Quantenmechanische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die grundlegenden mathematischen Strukturen der Quantenmechanik in komprimierter Weise dargestellt, als eine kurze Wiederholung des bekannten Inhalts eines Kurses zur Quantentheorie, fokussiert natürlich auf die Resultate, die im folgenden Text angesprochen werden.

■ 2.1 Zustände und Observable

In der Quantenmechanik werden die Zustände eines Systems durch die Elemente eines Hilbert-Raums beschrieben, wir nennen sie meist **Vektoren**. Ein solcher **Hilbert-Raum** ist ein linearer Raum über den komplexen Zahlen mit einem Skalarprodukt, der vollständig ist, in dem also jede Cauchy-Folge konvergiert. Die Dimension n_{dim} des Hilbert-Raums, also die maximale Anzahl linear unabhängiger Vektoren, wollen wir als endlich annehmen, falls nichts anderes erwähnt wird.

Wir bezeichnen die Vektoren mit einem Ket-Symbol wie $|\psi\rangle$ oder $|\phi\rangle$ und schreiben ihr Skalarprodukt als $\langle\phi|\psi\rangle$. Diese Schreibweise hat den Vorteil, dass man die Vektoren auf bequeme Weise kennzeichnen kann, beispielsweise bezeichnen wir oft durch $|n\rangle$, mit $n = 1, 2, \dots$, eine Anzahl von n_{dim} linear unabhängiger Vektoren, eine **Basis**. In aller Regel wählen wir sie normiert ($\langle n|n\rangle = 1$) und orthogonal ($\langle m|n\rangle = 0$ für $m \neq n$, kurz $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$). Dann lässt sich jedes Element des Hilbert-Raums als **Linearkombination**

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{n_{\text{dim}}} c_n |n\rangle \quad \text{mit} \quad c_n = \langle n|\psi\rangle \quad (2.1)$$

darstellen.

Physikalische (beobachtbare) Größen, auch als **Observable** bezeichnet, werden durch lineare Operatoren beschrieben und durch ein Dachsymbol gekennzeichnet, beispielsweise als \hat{A} .

Dann erhält man den **Erwartungswert** $\langle\hat{A}\rangle$ dieser Größe, also den Mittelwert der Messwerte für ein System in dem normierten Zustand $|\psi\rangle$ und seine Varianz $(\Delta A)^2$ als

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \quad \text{und} \quad (\Delta A)^2 = (\hat{A}^2 - \langle\hat{A}\rangle\hat{I})^2 = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2. \quad (2.2)$$

Die mittlere Abweichung vom Mittelwert ΔA wird auch als **Unschärfe** bezeichnet. Ist das System in einem (normierten) **Eigenzustand** $|a\rangle$ des Operators \hat{A} zum Eigenwert a , also in einem Zustand mit $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ und $\langle a|a\rangle = 1$, dann ist der Erwartungswert gleich dem Eigenwert, $\langle\hat{A}\rangle = a$ und die Unschärfe ist gleich null. Da die physikalischen Größen, die die Observablen beschreiben, in aller Regel reellwertige Messwerte besitzen, sind ihre Eigenwerte reell. Das ist

eine wichtige Eigenschaft hermitescher Operatoren¹, also Operatoren mit $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$. Es sei hier daran erinnert, dass die Eigenvektoren eines hermiteschen Operators zu unterschiedlichen Eigenwerten paarweise orthogonal sind. Wenn es mehr als einen linear unabhängigen Eigenvektor zu einem Eigenwert gibt, also für einen **entarteten** Eigenwert, kann man eine orthogonale Basis des zugehörigen Eigenraums wählen.

Aufgabe 2.1 (Lösung Seite 270): Zwischen den Unschärfen hermitescher Operatoren \hat{A} und \hat{B} besteht eine wichtige Beziehung, die **Unschärferelation**

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|,$$

die man auf recht einfache Weise herleiten kann. Versuchen Sie es!

Der Dichteoperator: Oft ist es zweckmäßig, einen Zustand statt durch einen normierten Vektor $|\psi\rangle$ durch den Projektor

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (2.3)$$

auf diesen Zustand zu beschreiben, den sogenannten **Dichteoperator**, auch als **Dichtematrix** oder als **statistischer Operator** bezeichnet. Dann ergeben sich die Erwartungswerte als

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{spur}(\hat{A}\hat{\rho}) \quad \text{mit} \quad \text{spur} \hat{\rho} = 1. \quad (2.4)$$

Dies ist ein **reiner Zustand**, nennen wir einen solchen Zustand $|\psi_r\rangle$. Ein sogenannter **gemischter Zustand** beschreibt eine inkohärente Superposition der Dichteoperatoren $\hat{\rho}_r = |\psi_r\rangle\langle\psi_r|$ reiner Zustände

$$\hat{\rho} = \sum_r p_r \hat{\rho}_r, \quad 0 \leq p_r \leq 1, \quad \sum_r p_r = 1. \quad (2.5)$$

Dabei ergeben sich die Erwartungswerte wieder durch die Spurbildung (2.4), aber im Gegensatz zu $\text{spur} \hat{\rho}_r^2 = 1$ für einen reinen Zustand gilt für einen gemischten Zustand die Ungleichung $\text{spur} \hat{\rho}^2 \leq 1$, wobei das Gleichheitszeichen nur für einen reinen Zustand gilt. Oft verwendet man zur Charakterisierung eines Zustandes auch die **Entropie**

$$S = -\text{spur}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) \quad \text{oder} \quad S = -\ln(\text{spur} \hat{\rho}^2). \quad (2.6)$$

Die linke Formel ist die **Shannon-Entropie**, die rechte eine Version der **Rényi-Entropie**, auch bekannt als **Korrelationsentropie**. Beide Entropien sind invariant gegenüber Ähnlichkeitstransformationen und in der Basis der Eigenzustände von $\hat{\rho}$ mit den Eigenwerten λ_n erhält man dann aus (2.6)

$$S = -\sum_n \lambda_n \ln \lambda_n \quad \text{bzw.} \quad S = -\ln \sum_n \lambda_n^2. \quad (2.7)$$

Für einen reinen Zustand ist $\hat{\rho}$ ein Projektor auf einen eindimensionalen Unterraum, hat also die Eigenwerte Eins und Null. Für einen maximal gemischten Zustand in einem N -dimensionalen Hilbert-Raum sind alle Eigenwerte gleich, also wegen $\text{spur} \hat{\rho} = 1$ gleich $1/N$, und beide Entropie n sind gleich $\log N$.

¹ Für unendlichdimensionale Räume muss man zwischen hermiteschen und selbstadjungierten Operatoren unterscheiden (vgl. Anhang A).

Im Folgenden werden wir einige typische Quantensysteme genauer darstellen unter besonderer Berücksichtigung algebraischer Methoden. Der harmonische Oszillator wird in Kapitel 3, Spin und Drehimpuls werden in Kapitel 4 beschrieben.

Transformationen von Zuständen und Observablen: Von großer Bedeutung in der Quantenmechanik sind **Ähnlichkeitstransformationen** \hat{S} (siehe Gleichung (1.11)) der Zustände $|\psi\rangle$ und der Operatoren \hat{A} :

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'\rangle = \hat{S}|\psi\rangle, \quad \hat{A} \longrightarrow \hat{A}' = \hat{S}\hat{A}\hat{S}^{-1}. \quad (2.8)$$

Hier sind insbesondere **unitäre Transformationen** \hat{U} mit $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$, also

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I} \quad (2.9)$$

von Bedeutung. Sie lassen das Skalarprodukt invariant, denn es gilt

$$\langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\phi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle \quad \text{für} \quad |\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle, \quad |\phi'\rangle = \hat{U}|\phi\rangle. \quad (2.10)$$

Betrachten wir jetzt unitäre Transformationen, die kontinuierlich von einem einzigen Parameter s abhängen, also $\hat{U}(s)$ mit $\hat{U}(0) = \hat{I}$ und $\hat{U}(s+t) = \hat{U}(s)\hat{U}(t)$. Für kleine Werte von s erhalten wir mit der Ableitung $\hat{U}'(s) = d\hat{U}(s)/ds$

$$\hat{U}(s) \approx \hat{I} + \hat{U}'(0)s = \hat{I} + i\hat{K}s \quad \text{mit} \quad \hat{U}'(0) = i\hat{K}. \quad (2.11)$$

Entwickelt man $\hat{U}(s)\hat{U}^\dagger(s) = \hat{I}$ für kleines s , so sieht man, dass \hat{K} hermitesch ist. Obwohl der Operator \hat{K} aus einer infinitesimalen Transformation hervorgeht, lassen sich durch ihn alle endlichen Transformationen $\hat{U}(s)$ beschreiben. Das sieht man, indem man $\hat{U}(s+t) = \hat{U}(s)\hat{U}(t)$ nach t differenziert, $d\hat{U}(s+t)/dt = \hat{U}(s)\hat{U}'(t)$, und dann $t = 0$ setzt: $\hat{U}'(s) = \hat{U}(s)\hat{U}'(0) = \hat{U}(s)i\hat{K}$. Diese Differentialgleichung hat mit $\hat{U}(0) = \hat{I}$ die Lösung

$$\hat{U}(s) = e^{i\hat{K}s}. \quad (2.12)$$

Man bezeichnet \hat{K} als den **Generator** der Transformation. Beispiele für solche Transformationen in der Quantenmechanik sind der **Translationsoperator** $\hat{T}_a = e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}$, der eine Verschiebung um a im Ortsraum bewirkt mit dem Impuls \hat{p} als Generator (mehr dazu auf Seite 35), oder der **Rotationsoperator** $\hat{R}_z(\alpha) = e^{-i\theta\hat{L}_z}$, eine Drehung um den Winkel θ um die z -Achse mit dem Drehimpuls \hat{L}_z als Generator (vgl. Seite 68).

■ 2.2 Schrödinger- und Heisenberg-Bild

Von besonderer Bedeutung unter den Observablen ist die *Energie*, dargestellt durch den **Hamilton-Operator** \hat{H} . Er beschreibt neben der Energie des Systems auch die quantenmechanische Zeitentwicklung. Dabei existieren mehrere Möglichkeiten, je nachdem, welche Größen man zeitlich variabel macht, die Zustände oder die Operatoren.

Im **Schrödinger-Bild** beschreibt man die Zeitevolution durch eine Zeitabhängigkeit des Zustandsvektors bzw. des Dichteoperators, während die Operatoren, die die Observablen des Systems darstellen, zeitlich konstant bleiben, abgesehen von einer eventuellen expliziten Zeitabhängigkeit, beispielsweise durch zeitabhängige Parameter. Wir wollen hier die Beschreibungen

in den beiden Bildern durch Indizes wie S für das Schrödinger-Bild und H für das Heisenberg-Bild kennzeichnen. Oft jedoch, wenn es klar ist, in welchem Bild man arbeitet, werden diese Indizes weggelassen.

Im Schrödinger-Bild ist die Zeitentwicklung eines Zustandsvektors $|\psi(t_0)\rangle$ oder Dichteoperators $\hat{\rho}(t)$ durch die **Schrödinger-** bzw. die **Von-Neumann-Gleichung**

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle, \quad i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)] \quad (2.13)$$

bestimmt.

Aufgabe 2.2 (Lösung Seite 271): Leiten Sie für den Dichteoperator eines reinen Zustands aus der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung die Von-Neumann-Gleichung her.

Zeitunabhängige Systeme: Systeme mit einem zeitlich konstanten Hamilton-Operator \hat{H} lassen sich in bequemer Weise darstellen durch Lösungen der Form

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iEt/\hbar} |\varphi\rangle \quad \text{mit} \quad \hat{H} |\varphi\rangle = E |\varphi\rangle, \quad (2.14)$$

das heißt, $|\varphi\rangle$ ist ein Eigenzustand zum Eigenwert E . Falls der Hilbert-Raum N -dimensional ist und \hat{H} hermitesch, dann sind die Eigenwerte E_n , $n = 1, \dots, N$ reell und die (orthonormierten) Eigenzustände $|\varphi_n\rangle$ erlauben eine Darstellung jeder zeitabhängigen Lösung der Schrödinger-Gleichung als

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle \quad \text{mit} \quad c_n = \langle \varphi_n | \psi(0) \rangle. \quad (2.15)$$

Für ein Teilchen der Masse m in einem eindimensionalen Potential $V(q)$ mit der Ortsvariablen q lautet die **zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung** $\hat{H} |\varphi\rangle = E |\varphi\rangle$ für die Wellenfunktion $\varphi(q) = \langle q | \varphi \rangle$ in der Ortsdarstellung

$$\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(q) + V(q) \varphi(q) = E \varphi(q). \quad (2.16)$$

und die Energieeigenwerte E bestimmen sich aus den normierbaren Lösungen.

Der Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t, t_0)$, definiert durch

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad (2.17)$$

ist eine Lösung der Differentialgleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0) \quad \text{mit der Anfangsbedingung} \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I}. \quad (2.18)$$

Der Zeitentwicklungsoperator ist unitär für einen hermiteschen Hamilton-Operator, wenn also gilt $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$. Das sieht man beispielsweise durch

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0)) &= \left(i\hbar \frac{\partial \hat{U}^\dagger(t, t_0)}{\partial t} \right) \hat{U}(t, t_0) + \hat{U}^\dagger(t, t_0) \left(i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} \right) \\ &= -\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{H}^\dagger(t) \hat{U}(t, t_0) - \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0) = \hat{U}^\dagger(t, t_0) (\hat{H}^\dagger(t) - \hat{H}(t)) \hat{U}(t, t_0), \end{aligned} \quad (2.19)$$

also ist $\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0)$ für $\hat{H}^\dagger(t) = \hat{H}(t)$ zeitlich konstant und damit gleich \hat{I} .