

Hans Jürgen Korsch

Mathematik der Quantenmechanik

Grundlagen, Beispiele, Aufgaben, Lösungen

$$\begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & \dots & A_{NN} \end{pmatrix} \quad \|\psi\|^2 = \|\psi_{\parallel}\|^2 + \|\psi_{\perp}\|^2$$

$$\|\psi\|^2 \quad \hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) = \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}$$

$$(\hat{A}\hat{B})\hat{C} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C})$$

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\hat{O}} |\psi\rangle$$

$$\langle\varphi|\psi\rangle \quad \hat{A} \downarrow \quad \hat{A}|2-2|2\rangle \downarrow$$

$$\hat{A} = |\varphi\rangle\langle\varphi|$$

$$|\varphi\rangle \xrightarrow{\hat{O}} |\varphi\rangle$$

$$\psi_{\parallel} = \langle\varphi|\psi\rangle \varphi = \lambda\varphi$$

$$+ \psi_{\perp}$$

$$= \sum_j |\varphi_j|^2$$

$$= \frac{\langle\varphi|\psi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle} \varphi$$

$$\psi_{\parallel}^2 = \frac{|\langle\varphi|\psi\rangle|^2}{\|\varphi\|^2}$$

$$\lambda = \langle\varphi|\psi\rangle$$

$$(\hat{A}\hat{B})\hat{C} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C})$$

$$\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = \mathbb{I}$$

$$\varphi_j^* = (\varphi_1^* \dots \varphi_N^*) \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \vdots \\ \varphi_N \end{pmatrix}$$

$$\psi_{\parallel} = \langle\varphi|\psi\rangle \varphi = \lambda\varphi$$

$$\psi = \psi_{\parallel} + \psi_{\perp}$$

$$\langle\varphi|\psi\rangle$$

$$\hat{\sigma}_k \cdot \hat{A} = \sum_{j=0}^N$$

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$

$$\langle\psi_{\parallel}|\psi_{\parallel}\rangle = \langle\lambda\varphi|\lambda\varphi\rangle = \lambda^* \lambda \langle\varphi|\varphi\rangle = |\lambda|^2 \|\varphi\|^2$$

$$\varphi^*(\varphi) - (\varphi|\varphi) = \sum_{j=1}^N$$

3., aktualisierte Auflage

HANSER



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

Mathematik der Quantenmechanik

Grundlagen, Beispiele, Aufgaben, Lösungen

3., aktualisierte Auflage

HANSER

Der Autor:

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



Alle in diesem Buch enthaltenen Informationen wurden nach bestem Wissen zusammengestellt und mit Sorgfalt geprüft und getestet. Dennoch sind Fehler nicht ganz auszuschließen. Aus diesem Grund sind die im vorliegenden Buch enthaltenen Informationen mit keiner Verpflichtung oder Garantie irgendeiner Art verbunden. Autor(en, Herausgeber) 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(en, Herausgeber) 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 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 benutzt werden dürften.

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek:

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

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt.

Alle Rechte, auch die der Übersetzung, des Nachdruckes und der Vervielfältigung des Buches, oder Teilen daraus, sind vorbehalten. Kein Teil des Werkes darf ohne schriftliche Genehmigung des Verlages in irgendeiner Form (Fotokopie, Mikrofilm oder ein anderes Verfahren) – auch nicht für Zwecke der Unterrichtsgestaltung – reproduziert oder unter Verwendung elektronischer Systeme verarbeitet, vervielfältigt oder verbreitet werden.

© 2022 Carl Hanser Verlag München

Internet: www.hanser-fachbuch.de

Lektorat: Frank Katzenmayer

Herstellung: Frauke Schafft

Covergestaltung: Max Kostopoulos

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

Titelbild: © Max Kostopoulos

Satz: Hans Jürgen Korsch

Druck und Bindung: CPI books GmbH, Leck

Printed in Germany

Print-ISBN 978-3-446-47468-0

E-Book-ISBN 978-3-446-47474-1

Vorwort

Die Quantenmechanik steht im Zentrum der heutigen Physik und ist unbestritten die erfolgreichste physikalische Theorie überhaupt. Die Quantenwelt unterscheidet sich allerdings fundamental von der Welt unserer täglichen Erfahrungen, und es ist nicht sehr klug, sich auf die Intuition oder den gesunden Menschenverstand zu verlassen. Hier hilft die Mathematik und liefert ein solides Fundament, auf dem man aufbauen kann. Es ist meine persönliche Überzeugung, dass man ohne ein Minimum an mathematischen Kenntnissen keine Chance hat, die Quantenmechanik auch nur ansatzweise zu „verstehen“, was auch immer das bedeuten mag.

Bei den benötigten mathematischen Werkzeugen und Strukturen handelt es sich zunächst einmal um die hier unverzichtbaren **komplexen Zahlen**, die auf der mysteriösen Zahl i aufbauen. Diese **imaginäre Einheit** ergibt, mit sich selbst multipliziert, die Zahl -1 , was für unsere bekannten Zahlen unmöglich ist. Diese komplexen Zahlen spielen eine fundamentale Rolle in der Beschreibung unserer Welt auf kleinsten Skalen: Die quantenmechanischen Wellenfunktionen ψ sind **komplexe** Größen. Aber nicht nur merkwürdige Zahlen werden benötigt, sondern auch andere gewöhnungsbedürftige Objekte, mit denen man rechnen kann. Ein Beispiel ist der **Differentialoperator** $\hat{d}$, die Ableitung nach der Variablen x , also $\hat{d} = \frac{d}{dx}$. Wendet man diesen Operator auf eine Funktion $f(x)$ an, dann wird diese Funktion differenziert: $\hat{d}f = \frac{df}{dx}$. Das erscheint klar, genauso wie die zweimalige Anwendung $\hat{d}^2 = \hat{d}\hat{d}$ als zweite Ableitung. Weit- aus weniger einsichtig ist es aber, dass dieser Operator eine physikalische Größe beschreibt, die uns sehr gut bekannt sein sollte. Er liefert in der Quantenmechanik eine Darstellung des Impulses p eines Teilchens, klassisch einfach das Produkt aus Masse und Geschwindigkeit, quantenmechanisch aber beschrieben durch die Ableitung nach der Ortsvariablen x , genauer durch $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$. Neben der quantenmechanischen Naturkonstanten $\hbar$ tritt hier wieder die allgegenwärtige imaginäre Einheit i auf. Um das einzusehen, benötigt man geeignete mathematische Hilfsmittel, die in diesem Buch vermittelt werden sollen.

In der traditionellen Theoretischen Quantenphysik wird die benötigte Mathematik parallel mitentwickelt, wobei man im Idealfall Vorkenntnisse aus der Linearen Algebra nutzen kann. In den letzten Jahren war allerdings die Tendenz zu beobachten, in den Lehrveranstaltungen zur Physik eine zeitlich stark reduzierte Quantentheorie anzubieten. Das trifft insbesondere den Bachelor Studiengang Physik und die Bachelor-Master Studiengänge Lehramt Physik oder Biophysik. Hier bleibt nur noch wenig Zeit für die mathematischen Grundlagen. Erfahrungsgemäß ist es den Studierenden dabei kaum möglich, sich diese Kenntnisse selbstständig anzueignen, da hier keine entsprechende Literatur vorhanden ist. Dieses Buch will die Lücke schließen und eine Brücke schlagen zwischen den Lehrveranstaltungen zur Quantenphysik und dem mathematischen Grundwissen aus der Schule und aus den Anfängervorlesungen der Physik. Der vorliegende Text ist aus Lehrveranstaltungen an der TU Kaiserslautern her-

vorgegangen. Der Autor dankt den vielen hilfreichen Kommentaren der Teilnehmer an diesen Kursen. Besonders Sabine Müller und Christian Geyer haben sich hier hervorgetan und mit vielen Verbesserungsvorschlägen zum Gelingen beigetragen, genau wie meine Tochter Franziska, die sich (als Psychologin) darum bemüht hat, dass der Text auch Leserinnen und Lesern verständlich ist, die sich nicht unbedingt zu den Freunden der Mathematik zählen.

Für die zweite Auflage wurde das Layout des Buches umgestellt und der Text unter Berücksichtigung der Hinweise und Vorschläge der Leserinnen und Leser der ersten Auflage gründlich durchgesehen und ergänzt. Vielen Dank an alle, die auf Fehler und Unklarheiten hingewiesen haben, insbesondere an Simon Zöller für seine umfangreiche Errata-Liste. Neu hinzugefügt wurde unter anderem ein Glossar, in dem wichtige Begriffe kurz erklärt werden. Für einen bequemen Zugang zu weiteren Information bei einer E-Buch Lektüre wurden diese Begriffe direkt mit den entsprechenden Wikipedia-Seiten verlinkt.

Der hier vorliegenden dritten Auflage ging eine sorgfältige weitere Durchsicht des gesamten Textes voraus. Dabei wurden an vielen Stellen Unklarheiten behoben und neue ergänzende Abschnitte und Abbildungen eingefügt. Dabei bin ich den wervollen Hinweisen eines anonymen Gutachters dankbar.

Sicherlich haben sich auch in den vorliegenden Text noch Fehler eingeschlichen. Hinweise und Verbesserungsvorschläge bitte an h.j.korsch@gmail.com. Eine aktuelle Korrekturliste und weitere Informationen findet man unter <https://www.hanser-fachbuch.de>. Mein Dank gilt auch dem Hanser-Verlag für die freundliche Aufnahme des Buches und die hilfreiche Unterstützung, insbesondere Frau Christina Kubiak und Herrn Frank Katzenmayer für ihre kompetente Betreuung.

Kaiserslautern, April 2022

Hans Jürgen Korsch

Inhalt

Vorwort	5
1 Einführung	11
2 Grundlagen	15
2.1 Die Sprache der Physik	15
2.2 Klassische Mechanik	16
2.3 Quantenmechanik	18
2.4 Die lineare Welt – ein Gedankenspiel	21
2.5 Mathematische Vorbereitungen	23
2.5.1 Komplexe Zahlen	24
2.5.2 Potenzreihen	26
2.5.3 Vektoren	28
2.5.4 Matrizen	30
2.5.5 Die Deltafunktion	33
2.5.6 Lineare Differentialgleichungen	34
2.6 Lösungen der Übungsaufgaben	36
3 Lineare Räume und lineare Operatoren	39
3.1 Der Hilbert-Raum	39
3.1.1 Basisdarstellung	42
3.1.2 Der Dualraum	44
3.1.3 Die Dirac-Notation	45
3.2 Lineare Operatoren	47
3.3 Zugeordnete Operatoren	55
3.4 Hermitesche und unitäre Operatoren	56
3.5 Lösungen der Übungsaufgaben	58
4 Lineare Operatoren und Hilbert-Räume	61
4.1 Eigenvektoren und Eigenwerte	61
4.1.1 Operatorfunktionen	64

4.1.2	Eigenwerte und Eigenvektoren hermitescher Operatoren	64
4.1.3	Eigenwerte und Eigenvektoren unitärer Operatoren	67
4.1.4	Unitäre Transformation von Operatoren	68
4.2	Operatorräume	68
4.3	Erwartungswerte, Vertauschungsrelationen und Unschärfe	70
4.3.1	Verträgliche Operatoren	73
4.3.2	Die Unschärferelation	74
4.4	Leiteroperatoren, Erzeuger und Vernichter	76
4.5	Unendlichdimensionale Hilbert-Räume*	80
4.6	Lösungen der Übungsaufgaben	90
5	Quantenmechanik – ein kurzer Überblick	93
5.1	Messungen	94
5.2	Die klassische Mechanik	96
5.3	Die Schrödinger-Gleichung	98
5.4	Zweizustandssysteme und Spinmatrizen	106
5.5	Zeitentwicklung	109
5.6	Das Heisenberg-Bild	116
5.7	Mehrdimensionale Systeme	119
5.8	Mehrteilchensysteme und Verschränkung	124
5.9	Lösungen der Übungsaufgaben	128
6	Spezielle Funktionen	133
6.1	Orthogonale Polynomsysteme	133
6.1.1	Hermite-Polynome	134
6.1.2	Legendre-Polynome	138
6.1.3	Laguerre-Polynome	140
6.2	Kugelfunktionen	141
6.3	Bessel-Funktionen*	143
6.4	Lösungen der Übungsaufgaben	146
7	Elemente der Gruppentheorie*	149
7.1	Gruppen*	150
7.1.1	Permutationsgruppen*	155
7.1.2	Kontinuierliche Gruppen*	156
7.2	Darstellungen**	158
7.3	Lie-Gruppen und Lie-Algebren**	165
7.4	Symmetrien und unitäre Darstellungen in der Quantenmechanik*	172
7.4.1	Kontinuierliche Gruppen*	174

7.4.2	Raumspiegelung*	176
7.4.3	Identische Teilchen*	178
7.5	Lösungen der Übungsaufgaben*	183
8	Rechen- und Näherungsmethoden	189
8.1	Störungstheorie	189
8.2	Variationsrechnung	192
8.3	Numerische Methoden	195
8.3.1	Das „Shooting“-Verfahren	195
8.3.2	Basissatzentwicklung	196
8.3.3	Diskrete Operator Darstellung	197
8.4	Lösungen der Übungsaufgaben	201
A	Ergänzungen und mathematische Details	205
A.1	Wahrscheinlichkeiten	205
A.2	Lineare Differentialgleichungen	213
A.3	Fourier-Transformation	215
A.4	Die Dimensionsformel	217
A.5	Das Lebesgue-Stieltjes-Integral	218
A.6	Der statistische Operator*	219
A.7	Lösungen der Übungsaufgaben	222
B	Glossar	225
C	Bezeichnungen und Symbole	231
	Index	235

1

Einführung

Es ist das Ziel dieses Buches, grundlegende mathematische Begriffe und Methoden zu vermitteln, die für ein Verständnis der Quantenmechanik notwendig sind. Dabei vorausgesetzte **mathematische Vorkenntnisse** entsprechen in etwa dem mathematischen Grundkurs zur Physik, wie er beispielsweise in dem Buch

H. J. Korsch: „Mathematische Grundlagen für Physiker“ (Carl Hanser Verlag, 2021)

dargestellt ist. Verweise auf dieses Buch sind im folgenden Text durch „MG“ gekennzeichnet.

Zu hohe mathematische Präzision erschwert die Lesbarkeit eines Textes. Deshalb wird hier zwar nicht auf ein mathematisch korrektes Vorgehen verzichtet, es wird aber nicht zum Hauptanliegen gemacht. Beispielsweise werden Beweise dann gebracht, wenn sie zum Verständnis beitragen. Es wird aber kein Wert darauf gelegt, jedes Detail lückenlos herzuleiten. Auch wurde soweit wie möglich gegen die Versuchung angekämpft, eine gewisse Vollständigkeit der behandelten Themen zu erreichen. Kurz, dieses Buch ist *kein* Mathematikbuch.

Es handelt sich aber auch *nicht* um eine Einführung in die Quantenphysik. Es wird zwar fast durchgängig über quantenmechanische Probleme gesprochen, aber hauptsächlich zur Illustration und Einübung des mathematischen Formalismus und der mathematischen Methoden. Wenn der Leser dabei etwas über die Quantenwelt lernt, so ist das erfreulich und sicher auch nützlich für eine weitere ausführliche Einführung in die Quantentheorie.

Unsere „**Mathematik der Quantenmechanik**“ gliedert sich in die folgenden Abschnitte:

Grundlagen

Klassische Physik und Quantenphysik verwenden unterschiedliche Sprachen, um die Systeme der realen Welt zu beschreiben, insbesondere in ihrer Beschreibung durch die Mathematik. Dieses Kapitel führt in die abstrakte mathematische Formulierung der Quantenmechanik ein und motiviert die folgenden Ausflüge in die Welt der linearen Algebra. Dabei werden wir uns auf mathematische Vorkenntnisse stützen, die im letzten Abschnitt dieses Kapitels kurz vorgestellt werden.

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 endlichdimensionalen Beschreibung auskommen. Aller-

dings werden wir unsere reelle Zahlenwelt auf komplexe Zahlen und Funktionen erweitern müssen. 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.

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 Hilbert-Räume und ihre wichtige Rolle in der Quantenmechanik.

Quantenmechanik – ein kurzer Überblick

In diesem Kapitel kommen wir auf die physikalische Interpretation der mathematischen Strukturen zurück und werden an einigen ausgewählten Beispielen zeigen, wie wir die bisher erworbenen mathematischen Techniken auf die Beschreibung von Quantensystemen anwenden können. Wir üben hier den Umgang mit dem mathematischen Apparat an einfachen Beispielen, die auch in der Quantenphysik eine wichtige Rolle spielen. Dieses Kapitel ersetzt aber in keiner Weise einen Kurs in Quantenmechanik!

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 mithilfe von Matrixgleichungen zu behandeln. Beides haben wir am Beispiel der Hermite-Funktionen im vorangehenden Kapitel kurz vorgestellt.

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.

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 unübersehbare Vielzahl von Methoden entwickelt. Einige typische Beispiele solcher Techniken sollen hier vorgestellt werden.

Ergänzungen und mathematische Details

Der Anhang enthält eine kurze Darstellung von Teilgebieten der Mathematik, die in der Quantenmechanik wichtig sind, wie beispielsweise die elementare Wahrscheinlichkeitstheorie, die Potenzreihenentwicklung der Lösungen von linearen Differentialgleichungen und die Fourier-Transformation. Außerdem wurden einige speziellere mathematische Details, die im Text den Lesefluss beeinträchtigt hätten, in die letzten Abschnitte des Anhangs ausgelagert.

Glossar

In diesem Glossar werden wichtige Begriffe kurz erläutert. Ein direkter Link auf die entsprechenden Wikipedia-Seiten ermöglicht dem Leser bei einer E-Buch-Lektüre einen direkten Zugang zu weiteren Informationen.

Unsere Darstellung erscheint sicherlich vielen Lesern ein wenig (oder sogar sehr) *mathematisch*, und damit ist leider meist ein negativer Beigeschmack verbunden. Aber diese Mathematik ist notwendig und nützlich. Man sollte sich die Mühe machen, mit einiger Geduld auch längere Umformungen und logische Gedankenketten nachzuvollziehen. Dann wird man allmählich lernen, mathematische Formeln in ähnlicher Weise zu lesen und zu verstehen, wie man Prosatexte liest und versteht.

In den **Beispielen** im Text findet man zusätzliches Material (meist aus dem Umfeld der Quantenmechanik) mit oft recht ausführlichen Rechnungen. Hier hängt es von den Vorkenntnissen der Leserinnen oder Leser ab, ob sie diese erläuternden Beispiele nur überfliegen, oder ob sie die Details sorgfältig durcharbeiten.

Die vielen eingestreuten **Aufgaben** verfolgen ein doppeltes Ziel: Einmal enthalten sie zusätzliches Material, auf das weiter hinten im Text zurückgegriffen wird, und zweitens sollen sie helfen, die vorgestellten Techniken an einem relativ einfachen und klar formulierten Problem zu erproben. Es ist in jedem Fall wünschenswert, diese Aufgaben *selbstständig* zu lösen. Nur zur Kontrolle sollte man auf die ausgearbeiteten **Lösungen** am Ende jedes Kapitels zurückgreifen.

Am Schluss des Buches findet man **mathematische Bezeichnungen und Symbole** aus diesem Buch aufgelistet mit einem Verweis auf die Seite, auf der sie erstmals auftreten und erklärt werden. Da in der Quantenmechanik häufig von griechischen Buchstaben Gebrauch gemacht wird, sollte auch das dort angegebene **griechische Alphabet** nützlich sein.

Einige Abschnitte enthalten Material, das zwar in der Quantenmechanik wichtig ist, jedoch nicht von zentraler Bedeutung. Solche Abschnitte sind mit einem * gekennzeichnet und können bei einer ersten Durchsicht des Textes übersprungen werden. Das gilt insbesondere für die Abschnitte, die durch ein ** gekennzeichnet sind.

2

Grundlagen

Klassische Physik und Quantenphysik verwenden unterschiedliche Sprachen, um die Systeme der realen Welt zu beschreiben, insbesondere in ihrer Beschreibung durch die Mathematik. Dieses Kapitel führt in die abstrakte mathematische Formulierung der Quantenmechanik ein und motiviert die folgenden Ausflüge in die Welt der linearen Algebra. Dabei werden wir uns auf mathematische Vorkenntnisse stützen, die im letzten Abschnitt dieses Kapitels kurz vorgestellt werden.

■ 2.1 Die Sprache der Physik

Als „Klassische Physik“ bezeichnet man traditionell die Gebiete der Klassischen Mechanik, Elektrodynamik und Thermodynamik. Zum Verständnis der hier vermittelten Theorien reicht in aller Regel der *gesunde Menschenverstand* aus, was auch immer man darunter versteht, und zur Beschreibung der Phänomene und der Theorien genügt unsere alltägliche Sprache. Vor etwa hundert Jahren zeigte es sich dann, dass diese simple Vorstellung trügerisch ist. Sobald man in neue extreme Bereiche vorstieß, wurde die Welt überraschend andersartig als erwartet. Man konnte die alten Vorstellungen nicht einfach extrapolieren.

Für große Geschwindigkeiten versagte die klare und selbstverständliche Trennung von Raum und Zeit und man musste ein Raum-Zeit-Kontinuum akzeptieren, beschrieben durch die Spezielle Relativitätstheorie. Für große Skalen wurde der Raum durch große Massen gekrümmt, beschrieben durch die Allgemeine Relativitätstheorie. Auf sehr kleinen Skalen schließlich wurde die Welt völlig unverständlich. In dem Buch „**Der Zauberberg**“ von Thomas Mann konnte Hans Castorp noch davon träumen, dass die Welt im Kleinen der Welt im Großen ganz ähnlich war, nur eben viel kleiner:

„Das Atom war ein energiegeladenes kosmisches System, worin Weltkörper rotierend um ein sonnenhaftes Zentrum rasten und durch dessen Ätherraum mit Lichtgeschwindigkeit Kometen fuhren, welche die Kraft des Zentralkörpers in ihre exzentrischen Bahnen zwang.“

Ja, konnte er es sogar spielerisch wagen

„...zu denken, daß gewisse Planeten des atomischen Sonnensystems – dieser Heere und Milchstraßen von Sonnensystemen, die die Materie aufbauten –, daß also einer oder der andere dieser innerweltlichen Weltkörper sich in einem Zustande befand, der demjenigen entsprach, der die Erde zu einer Wohnstätte des Lebens machte?“

Inzwischen wissen wir, dass die Welt auf kleinen Maßstäben eben *nicht* so ist. Sie ist *kein* verkleinertes Abbild der Welt auf unseren Skalen, sondern ganz anders. Aber wie? Hier reicht die

Beschreibung durch unsere gewohnte Alltagssprache nicht aus. Diese Sprache ist zu sehr an unserer gewohnten Umgebung und unserem Denken orientiert. Ludwig Wittgenstein hat einmal gesagt „*Die Grenzen meiner Sprache bedeuten die Grenzen meiner Welt.*“ Wir müssen unsere sprachlichen Möglichkeiten erweitern, wenn wir die Welt im Kleinen beschreiben wollen.

In diesem Buch haben wir es mit der Theoretischen Physik zu tun. Sie verwendet großzügig die Sprache der Mathematik. Ja, man sagt sogar Mathematik sei *die* Sprache der Physik, allerdings verknüpft mit unserer real existierenden Welt. Unser Anliegen ist es hier, in diese mathematische Sprache einzuführen ohne den jeweiligen physikalischen Kontext zu vergessen. In den folgenden Abschnitten werfen wir einen kurzen Blick auf die Klassische Mechanik und die Quantenmechanik im Hinblick auf ihre mathematischen Methoden.

■ 2.2 Klassische Mechanik

In der klassischen Mechanik muss die Theorie das Zeitverhalten eines physikalischen mechanischen Systems beschreiben. Solche physikalischen Systeme sind beispielsweise eine Anzahl von Teilchen, die miteinander wechselwirken, oder ein schwingendes Pendel. Als mathematisches Werkzeug benötigen wir unter anderem die Analysis und die Theorie der gewöhnlichen Differentialgleichungen. Teilchen werden als Massenpunkte idealisiert, die man jeweils durch einen Ortsvektor $\vec{x}$ beschreibt, der sich zeitlich mit einer Geschwindigkeit $\dot{\vec{x}} = d\vec{x}/dt$ verändert. Die Bahn eines Teilchens mit einer Masse m im Raum, also die Kurve $\vec{x}(t)$, wird bestimmt durch eine Differentialgleichung, die **newtonsche Bewegungsgleichung**

$$m\ddot{\vec{x}} = \vec{F}(\vec{x}, t). \quad (2.1)$$

Hier wird die Beschleunigung $\ddot{\vec{x}} = d^2\vec{x}/dt^2$ durch eine Kraft $\vec{F}$ bewirkt, genauer ein Kraftfeld, das vom Ort $\vec{x}$ abhängt und eventuell auch explizit von der Zeit t . Andere dynamische Größen, wie der Impuls $\vec{p} = m\dot{\vec{x}}$ oder der Drehimpuls $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$ werden daraus abgeleitet. Die Bewegungsgleichungen (2.1) muss man für eine vorgegebene Anfangsbedingung lösen. Aus der Theorie der Differentialgleichungen weiß man, dass dazu in der Regel die Kenntnis von Ort $\vec{x}_0 = \vec{x}(t_0)$ und Geschwindigkeit $\dot{\vec{x}}_0 = \dot{\vec{x}}(t_0)$ zu einer Zeit t_0 ausreichen. Die Lösung liefert dann die Bahn $\vec{x}(t)$ für alle Zeiten.

Entsprechend lassen sich auch Systeme mehrerer oder vieler Teilchen beschreiben und in den Erweiterungen der Lagrange- oder Hamilton-Mechanik auch allgemeinere mechanische Systeme. Wir werden sehen, dass in der Quantenmechanik die adäquate mathematische Sprache eine völlig andere ist. Vorher aber wollen wir uns ein einfaches Beispiel der Newton-Mechanik mit nur einem Freiheitsgrad etwas näher ansehen.



Beispiel 2.1 Der harmonische Oszillator, eine Masse m , auf die eine lineare Kraft $F(x) = -kx$ mit $k > 0$ wirkt, wird durch die Bewegungsgleichung

$$m\ddot{x} = -kx \quad (2.2)$$

beschrieben. Aus der Schulphysik ist uns sicher noch im Gedächtnis geblieben, dass man dadurch die Schwingung einer Masse an einer Spiralfeder verstehen kann, sicher kein sehr aufregendes System. Bevor wir uns in mathematische Einzelheiten verlieren, sollten wir uns

deshalb davon überzeugen, dass dieser harmonische Oszillator ein wirklich wichtiges System darstellt. Dazu überlegen wir uns, dass man jede Kraft $F(x)$ um eine Gleichgewichtslage mit $F = 0$ in eine Potenzreihe entwickeln kann. Wenn wir die Gleichgewichtslage als $x = 0$ wählen, ergibt sich für kleine Auslenkungen mit $F(x) \approx F'(0)x$ die Bewegungsgleichung (2.2), wobei wir die Konstante k mit der negativen Ableitung der Kraft bei $x = 0$ identifizieren: $k = -F'(0)$. Also ist für $F'(0) < 0$ jede Bewegung in einer kleinen Umgebung einer Gleichgewichtslage harmonisch. Zur Lösung der Bewegungsgleichung dividieren wir durch die Masse und erhalten

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0 \quad \text{mit} \quad \omega = \sqrt{k/m}. \quad (2.3)$$

Hier können wir zwei Lösungen erraten, nämlich die Funktionen $x_1(t) = \sin(\omega t)$ und $x_2(t) = \cos(\omega t)$. Aber mehr noch, wir können auch zeigen, dass die Funktion

$$x(t) = a_1 x_1(t) + a_2 x_2(t) = a_1 \sin(\omega t) + a_2 \cos(\omega t) \quad (2.4)$$

mit beliebigen Konstanten a_1 und a_2 die Bewegungsgleichung löst. Diese Aussage, ein **Superpositionsprinzip**, ist ein wichtiges Resultat und man sollte dies einmal im Leben durch eine kurze Rechnung überprüfen! Die Ursache liegt darin, dass die Bewegungsgleichung des harmonischen Oszillators **linear** ist. Man bezeichnet dann einen Ausdruck wie (2.4) als eine **Linearkombination** der beiden Lösungen $x_1(t)$ und $x_2(t)$.

Wir wollen uns noch kurz davon überzeugen, dass wir auf diese Weise die *allgemeine* Lösung der Bewegungsgleichung erhalten haben. Das soll heißen: Wir können durch eine geeignete Wahl der Konstanten a_1 und a_2 jede beliebige vorgegebene Anfangsbedingung $x_0 = x(t_0)$ und $v_0 = \dot{x}(t_0)$ erfüllen. Die Linearkombination (2.4) führt dann auf die linearen Gleichungen

$$x_0 = a_1 \sin(\omega t_0) + a_2 \cos(\omega t_0) \quad (2.5)$$

$$v_0 = \omega a_1 \cos(\omega t_0) - \omega a_2 \sin(\omega t_0) \quad (2.6)$$

mit der Lösung

$$a_1 = x_0 \sin(\omega t_0) + \frac{v_0}{\omega} \cos(\omega t_0), \quad a_2 = x_0 \cos(\omega t_0) - \frac{v_0}{\omega} \sin(\omega t_0). \quad (2.7)$$

Die Anfangsbedingung ist also erfüllbar. Außerdem können wir uns vergewissern, dass jede Lösung beschränkt bleibt, denn sicher gilt $|x(t)| \leq |a_1| + |a_2|$, sodass unsere Anfangsannahme einer kleinen Auslenkung bei der Entwicklung um die Gleichgewichtslage nicht mit wachsender Zeit verletzt wird. Das wäre beispielsweise anders für den Fall einer instabilen Gleichgewichtslage mit $k < 0$. In ganz ähnlicher Weise kann man für ein mehrdimensionales System vorgehen und die Bewegungsgleichungen um eine Gleichgewichtslage linearisieren.



Die linearen Bewegungsgleichungen sind also recht einfach, ganz im Gegensatz zu dem allgemeinen Fall. Hier sind die Bewegungsgleichungen **nichtlinear** und ihre Lösungen, die klassischen Bahnen, typischerweise chaotisch. Dann gilt immer noch, dass jede Bahn eindeutig durch ihre Anfangsbedingungen festgelegt ist, aber die meisten Bahnen sind extrem instabil. Kleine Änderungen in den Anfangsbedingungen führen zu großen Änderungen der Bahn, sodass langfristig nur Wahrscheinlichkeitsaussagen möglich sind, denn eine präzise Angabe der Anfangsbedingungen ist in der Regel unmöglich.

Wir halten fest: Der Zustand eines Systems wird beschrieben durch die Angabe der Orte und der Geschwindigkeiten oder, wenn wir sie nicht genau kennen, durch ihre Wahrscheinlichkeitsverteilung. Die Zeitentwicklung folgt den klassischen Bewegungsgleichungen.

■ 2.3 Quantenmechanik

Traditionelle einführende Kurse zur Quantenmechanik folgen meist ihrer historischen Entwicklung. Sie beginnen mit wichtigen bahnbrechenden Experimenten, deren Ergebnisse mit den bekannten klassischen Theorien nicht erklärt werden können. Typisch sind hier eine Diskussion des photoelektrischen Effekts, der diskreten Emissions- und Absorptionsspektren der Atome, der Frequenzabhängigkeit der Strahlung eines schwarzen Körpers oder des Verhaltens eines Teilchens mit „Spin“ beim Durchlaufen eines inhomogenen Magnetfeldes.

Dabei wird die klassische Beschreibung dieser Prozesse schrittweise korrigiert und gezeigt, dass einschneidende Veränderungen der alten, klassischen Vorstellungen notwendig sind. Parallel dazu wird eine theoretische Beschreibung der so entstehenden Quantenmechanik entwickelt, also eine mathematische Theorie, die auch quantitative Aussagen und Vorhersagen erlaubt. An zentraler Stelle erster Einführungen in die Quantenphysik steht der Wellen-Teilchen-Dualismus. Er bedeutet beispielsweise für Elektronen, dass diese sowohl als Welle als auch als Teilchen aufgefasst werden können, wobei man geschickt das jeweils am besten „passende“ Bild auszuwählen hat. Diese Vorgehensweise kann zu Fehlvorstellungen führen. Deshalb möchten wir sie im Folgenden kritisch hinterfragen.

Die mathematische Modellierung von Quantensystemen stützt sich in einführenden Kursen fast ausschließlich auf die **Schrödinger-Gleichung** für die **Wellenfunktion** in der Ortsdarstellung. Diese Gleichung, benannt nach dem österreichischen Physiker **Erwin Schrödinger** (1897–1961), wird dabei natürlich motiviert und erläutert, auch im historischen Kontext, und dann für ausgewählte Beispiele gelöst. Wir wollen uns diese Gleichung einmal ansehen. Für den einfachsten Fall eines einzelnen Teilchens mit Masse m , das sich in einer einzigen Raumdimension mit Koordinate x in einem Potential $V(x)$ bewegt, lautet sie

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x, t). \quad (2.8)$$

Das ist eine partielle Differentialgleichung für die Wellenfunktion $\psi(x, t)$. Sie ist **linear**, das heißt es gilt wieder das Superpositionsprinzip, das wir schon in Beispiel 2.1 für den klassischen harmonischen Oszillator kennengelernt haben: Jede Linearkombination zweier Lösungen ist wieder eine Lösung. Außerdem ist ihre Struktur uns (hoffentlich) nicht völlig fremd, denn ganz ähnliche Gleichungen haben wir in der Klassischen Physik als Wellengleichung und Diffusionsgleichung kennengelernt. Erstaunlich ist hier das Auftreten des Faktors i , der imaginären Einheit. Dadurch wird die Lösungsfunktion $\psi(x, t)$ automatisch komplex. Das ist merkwürdig, denn in der Klassischen Physik sind reelle Größen die Regel. Komplexe Größen tauchen zwar auch gelegentlich auf, werden aber nur eingesetzt, um mathematische Operationen zu erleichtern, wie zum Beispiel bei der Behandlung des angetriebenen und gedämpften harmonischen Oszillators oder bei der Fourier-Transformation. Außerdem taucht in der Gleichung eine neue Naturkonstante $\hbar = h/2\pi$ auf (gelesen „hquer“), das **plancksche Wirkungsquantum** h dividiert durch 2π .

Einige Punkte müssen dann nach Einführung der Schrödinger-Gleichung noch genauer abgehandelt werden:

- Die Schrödinger-Gleichung kann man nicht „herleiten“. Nach dem US-amerikanischen Physiker **Richard Feynman** (1918–1988) ist sie „Schrödingers Kopf entsprungen.“
- Die Wellenfunktion muss *interpretiert* werden. Es muss erklärt werden, was genau die Größe $\psi(x, t)$ bedeutet, und es muss begründet werden, warum das Betragsquadrat $|\psi(x, t)|^2$ als eine Wahrscheinlichkeitsdichte zu verstehen ist. Genauer ausgedrückt: $|\psi(x, t)|^2 dx$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, das Teilchen zur Zeit t in einem Intervall zwischen x und $x + dx$ zu finden. Das Integral

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2, \quad (2.9)$$

die **Normierung** der Wellenfunktion, ist also die Gesamtwahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen überhaupt irgendwo zu finden. Die Normierung N hat dementsprechend immer den Wert eins, da das Teilchen nach Voraussetzung existiert. Die Wellenfunktion muss deshalb normierbar sein.¹ Man kann zeigen, dass die Normierung zeitlich erhalten bleibt, wenn sich die Wellenfunktion gemäß der Schrödingergleichung zeitlich verändert.

- Die Schrödinger-Gleichung muss gelöst werden. Für eine gegebene Funktion zu einer Zeit t_0 , also $\psi(x, t_0)$, muss eine Funktion $\psi(x, t)$ ermittelt werden, die die Gleichung (2.8) erfüllt.

Das gelingt in einfachen Fällen analytisch, wie beispielsweise für ein freies Teilchen (also für $V(x) = 0$), wenn diese Lösung auch nicht unbedingt „schön“ aussieht. Mehr darüber findet sich in Abschnitt 5.5. In anderen Fällen kann man sich mit einem Separationsansatz

$$\psi(x, t) = f(t) \varphi(x) \quad (2.10)$$

weiterhelfen. Das führt auf die Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + V(x) \varphi(x) = E \varphi(x). \quad (2.11)$$

für den Ortsanteil $\varphi(x)$, die **zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung**. Normierbare Lösungen $\varphi(x)$ gibt es nur für bestimmte Werte des Parameters E , also beispielsweise für diskrete Werte E_n mit $n = 0, 1, \dots$, den sogenannten **Eigenwerten**. Für den Zeitanteil in (2.10) erhält man dann $f(t) = e^{-iEt/\hbar}$. Das wird in Abschnitt 5.5 näher erläutert. Die Gesamtlösung ergibt sich als Linearkombination der Produkte der separablen Lösungen:

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(x). \quad (2.12)$$

Die Linearität der Wellenfunktion gewährleistet hierbei die Existenz dieser Lösung. Außerdem kann man zeigen, dass man durch eine geeignete Wahl der Koeffizienten c_n die Anfangsbedingung $\psi(x, t_0)$ zur Zeit t_0 erfüllen kann.

Sehr viel an diesem Vorgehen beruht auf Komponenten, die bekannt sind, und die in ähnlicher Weise auch in anderen Problemkreisen benutzt werden, beispielsweise zur Lösung der

¹ Wenn das Integral überhaupt existiert, lässt sich wegen der Linearität der Schrödinger-Gleichung jede nicht normierte Lösung durch Multiplikation mit einem Faktor normieren.

klassischen Wellengleichung. Auch kann man das gleiche Vorgehen auf zwei und drei Raumdimensionen übertragen.

Danach wird in der Quantenmechanik meist darauf hingewiesen, dass dieses Wellenmodell letztlich doch nicht richtig ist, weil – im Gegensatz zu Wasserwellen oder elektromagnetischen Wellen – der Teilchencharakter deutlich in Erscheinung treten kann. Beispielsweise wird immer ein einzelnes Teilchen in dem Detektor nachgewiesen. Außerdem kann man der Frage nachgehen, was mit der ganzen Wellenfunktion passiert, wenn man das Teilchen irgendwo gemessen hat (Stichwort: „Kollaps der Wellenfunktion“). Das Ganze liefert dann den bekannten Themenkreis **„Dualismus zwischen Welle und Teilchen“**.

Dieses Vorgehen ist nicht falsch, aber problematisch. Insgesamt erscheint der ganze Aufbau eigentlich plausibel, nach einiger Eingewöhnung auch ganz verständlich und sogar anschaulich. Eine grafische Darstellung der Wellenfunktionen oder ihre Computer-Animation unterstützen die Anschaulichkeit, und am Ende entsteht der Eindruck, dass es sich bei der Wellenfunktion auch wirklich um eine Welle handelt, die sich im Raum ausbreitet. Diese Wellenfunktion ist zwar komplexwertig,² aber erscheint als durchaus real und wirklich existent. Dass diese Vorstellung *nicht* richtig ist, muss dann auf irgendeine Weise wieder herausgearbeitet werden. Die Wellenfunktion ist nämlich *„kein Element der Realität“*. Man erzeugt also durch eine anschauliche und verständliche Darstellung eine Vorstellung, die letztlich falsch ist und später wieder eliminiert werden muss.

Heute, mehr als hundert Jahre nach dem Aufkommen der Quantenmechanik, ist das frühere Erstaunen über die (damals) neuen, überraschenden und unerwarteten Phänomene kaum mehr zu spüren – man hat sich daran gewöhnt. Aktuelle Wunder der Quantenwelt sind anders geartet. Dabei geht es um Experimente mit verzögerter Wahl, um Verschränkung, Quantenteleportation, Quantenkryptographie, Quantencomputer, oder ganz allgemein um ein aktives, fast schon ingenieurmäßiges Umgehen mit der Quantenwelt. Ein korrespondierendes theoretisches Verständnis ist unbedingt notwendig, um die (reale!) Quantenwelt von Zauberei und Hokusfokus zu unterscheiden.

Hier wollen wir einen Versuch starten und ganz von der theoretisch mathematischen Seite her beginnen. Wir versuchen, in einer Art Gedankenspiel eine Theorie eines physikalischen Systems zu entwickeln. Dabei lassen wir uns von der Idee leiten, dass eine Theorie möglichst einfach sein sollte, allerdings nicht *zu* einfach, worauf schon Albert Einstein hinwies. Auch wenn die ganze Darstellung sehr mathematisch aussieht: Es ist keine Mathematik. Das überlassen wir besser den Mathematikern selbst oder der Mathematischen Physik. Wir benutzen hier einen vorhandenen mathematischen Apparat, um die Quantenwelt zu modellieren. Das sollte man unterscheiden: Die eingesetzte Mathematik ist vorhanden und höchstens schwer verdaulich, aber

„Theoretische Physik ist teils Mathematik und teils Semantik“

(Ulrich Mohrhoff). Wir müssen immer einen Bezug zwischen den mathematischen Symbolen und der Realität herstellen. Die Mathematik liefert den Formalismus der Symbole, die Semantik ihre Bedeutung. Diese Wechselbeziehung ist in keiner Weise einfach und in der Quantentheorie wird das ganz besonders deutlich.

² Das macht Schwierigkeiten bei denen, die mit komplexen Zahlen nicht umgehen können. Dazu werden oft einfache Zeigerdiagramme entwickelt, bei denen der Wert der Wellenfunktion als Zeiger dargestellt wird, der sich längs des Weges verändert.

2.4 Die lineare Welt – ein Gedankenspiel

Unsere Welt erscheint uns kompliziert und entsprechend kompliziert ist auch die zu ihrer theoretischen Modellierung notwendige Mathematik. Wer hier ein Beispiel benötigt, der sehe sich einmal die **Navier-Stokes-Gleichungen** in der Strömungsdynamik an oder forsche nach einem Beweis für das **Kolmogorov-Arnold-Moser-Theorem** oder kurz KAM-Theorem in der Hamilton-Mechanik. Wenn man mehr über solche Gebiete der Physik nachdenkt, dann könnte man auf den Einfall kommen, dass es die **Nichtlinearitäten** in den Gleichungen sind, die zu Schwierigkeiten führen.

Also starten wir doch einmal einen Versuch und konstruieren in einem Gedankenspiel eine extrem einfache Welt. Eine Welt, in der alles linear ist. Dazu sollten wir uns noch einmal über den Begriff **Linearität** Klarheit verschaffen. Laut Wikipedia ist Linearität „die Eigenschaft eines Systems auf die Veränderung eines Parameters stets mit einer dazu proportionalen Änderung eines anderen Parameters zu reagieren.“ Am einfachsten macht man sich das an Funktionen $f(x)$ klar. Hier muss $f(\lambda x) = \lambda f(x)$ gelten, woraus $f(x) = ax$ folgt. (Manchmal werden auch Funktionen wie $f(x) = ax + b$ als linear bezeichnet, aber diese sind keine eigentlichen linearen Funktionen, sondern sie vermitteln eine *affine* Abbildung.)

Der uns interessierende Ausschnitt aus der Realwelt, unser *physikalisches System*, wird also als ein **Linearer Raum** beschrieben, der auch **Vektorraum** genannt wird. Ein Element dieses Raums nennt man Vektor. Genauer handelt es sich um einen Vektorraum über einem Zahlenkörper. Wir werden sehen, dass wir hier mit dem Körper der reellen Zahlen, $\mathbb{R}$, nicht weit kommen. Also nehmen wir gleich zu Anfang eine Erweiterung zu Hilfe, die komplexen Zahlen $\mathbb{C}$ (eine kurz Einführung findet man auf Seite 24). Außerdem benötigen wir Abbildungen dieses Vektorraumes auf sich selbst. Eine solche **Abbildung**, die einen Vektor in einen anderen überführt, nennt man auch **Operator**. In unserem linearen Ansatz handelt es sich natürlich um lineare Abbildungen und lineare Operatoren.

Wenn wir die abstrakten Elemente unseres Vektorraums mit griechischen Buchstaben wie φ oder ψ bezeichnen und die Operatoren durch Großbuchstaben mit einem aufgesetzten Dach wie $\hat{A}$, dann fordert man für die Linearität von $\hat{A}$ die beiden Eigenschaften

$$\hat{A}(\varphi + \psi) = \hat{A}(\varphi) + \hat{A}(\psi) \quad (\text{additiv}) \quad (2.13)$$

$$\hat{A}(\lambda\psi) = \lambda\hat{A}(\psi) \quad (\text{homogen}) \quad (2.14)$$

für alle Vektoren φ und ψ und alle Zahlen λ . Es sei angemerkt, dass diese beiden Eigenschaften unabhängig voneinander sind: Es gibt Abbildungen, die homogen sind und nicht additiv und es gibt solche, die additiv sind und nicht homogen. Für beschränkte Abbildungen (mehr darüber weiter unten auf Seite 84) folgt die Homogenität aus der Additivität.

Unser System ist in einem bestimmten Zustand und es gibt einige beobachtbare Größen in unserem System, wie beispielsweise der Ort eines Teilchens, der Impuls, der Drehimpuls oder die Energie. Nennen wir eine solche beobachtbare Größe ganz allgemein eine **Observable**.

In einem ersten Ansatz wäre man versucht, den momentanen Systemzustand durch einen Vektor zu charakterisieren und die Observablen durch lineare Operatoren:

System	$\iff$	Vektorraum $\mathcal{H}$ über $\mathbb{C}$
Zustand	$\iff$	Vektor $\psi \in \mathcal{H}$
Observable A	$\iff$	linearer Operator $\hat{A}$ auf $\mathcal{H}$.

Der Zustand, in dem sich unser System befindet, kann sich zeitlich³ ändern. Diese **zeitliche Entwicklung** eines Zustandes, das heißt des Vektors $\psi = \psi(t)$, müssen wir beschreiben können. Wir erwarten, dass sie in unserer einfachen linearen Welt durch einen linearen Operator beschrieben wird. Dies führt zu der linearen Differentialgleichung

$$\frac{d\psi}{dt} = \hat{O}\psi. \quad (2.15)$$

Der für die Zeitentwicklung verantwortliche Operator wird zunächst einmal mit $\hat{O}$ bezeichnet.

Jetzt müssen wir uns noch die Frage stellen, was wir unter der **Messung** einer Größe verstehen könnten, also der Messung einer Observablen, die durch einen Operator $\hat{A}$ beschrieben wird. Unser Systemzustand wird durch den Vektor ψ charakterisiert. Wenden wir den Operator $\hat{A}$ auf unseren Zustandsvektor an, so erhalten wir einen neuen Zustandsvektor

$$\psi' = \hat{A}\psi \quad (2.16)$$

aus unserem komplexen Vektorraum. Als Ergebnis hätten wir aber einen Messwert für unsere Observable erwartet, also einen (reellen) Zahlenwert, den wir beispielsweise auf der Anzeige eines Messgerätes ablesen können.

Einfacher wird der Sachverhalt, wenn sich unser System in speziellen Zuständen befindet, die man als Eigenzustände bezeichnet. Der Zustand ψ heißt **Eigenzustand** zum Operator $\hat{A}$, wenn er ein **Eigenvektor** des Operators ist, wenn also gilt

$$\hat{A}\psi = a\psi, \quad a \in \mathbb{C}, \quad \psi \neq 0. \quad (2.17)$$

Den hier auftretenden Zahlenfaktor a nennt man **Eigenwert**. Bei einer Anwendung des Operators auf einen Eigenvektor bleibt also der Zustandsvektor bis auf einen multiplikativen Faktor a erhalten. Man ist versucht, diese Zahl a als Messwert der Observable zu bezeichnen. Genauer: Diesen Wert erhält man als Messwert, falls sich das System in dem Eigenzustand ψ befindet.

Das sieht doch schon sehr vielversprechend aus und wir wollen den Weg noch etwas weiter verfolgen. Zunächst überlegen wir uns, dass es wohl mehrere solche Eigenvektoren und Eigenwerte des Operators $\hat{A}$ geben kann. Kennzeichnen wir sie einmal mit einem Index j , also

$$\hat{A}\psi_j = a_j\psi_j, \quad a_j \in \mathbb{C}, \quad \psi_j \neq 0. \quad (2.18)$$

Ist unser System im Zustand ψ_j , wird man den Wert a_j der Observable messen. Da wir reelle Zahlen als Messwerte erwarten, sollte der Operator $\hat{A}$ reelle Eigenwerte besitzen. Wir werden sehen, dass dies für die spezielle Klasse hermitescher Operatoren garantiert ist.

Betrachten wir jetzt den interessanten Fall, in dem unser Systemzustand durch eine Linearkombination der Eigenvektoren ψ_j beschrieben wird, also durch die Summe

$$\psi = \sum_j c_j \psi_j, \quad c_j \in \mathbb{C}, \quad (2.19)$$

denn unsere Systemzustände bilden ja einen linearen Raum. Eine kurze Überlegung zeigt, dass die Koeffizienten c_j ein Maß für die Beimischung des Eigenzustandes ψ_j zum Zustand ψ darstellen. Wir vermuten, dass

$$p_j = |c_j|^2 \quad (2.20)$$

als Wahrscheinlichkeit, mit der der Eigenvektor ψ_j im Zustandsvektor ψ auftritt, interpretiert werden kann. Das gilt jedenfalls dann, wenn die Vektoren normiert und die Eigenvektoren

³ Die Zeit spielt in der Quantentheorie eine ganz besondere Rolle (und nicht nur dort). Wir werden darauf noch genauer eingehen.

paarweise orthogonal sind. Dabei haben wir unterstellt, dass in unserem Vektorraum ein **Skalarprodukt** definiert ist, damit die Begriffe „normiert“ und „orthogonal“ einen Sinn ergeben. Das wollen wir im Folgenden fordern.

Alles Weitere liegt dann fast auf der Hand: Eine Messung unserer Observablen $\hat{A}$ ergibt als Messwert einen der Eigenwerte a_j . Es stellt sich heraus, dass dieses Messergebnis, also der Eigenwert des Eigenzustands j , rein zufällig auftritt mit einer Wahrscheinlichkeit p_j , die sich aus dem Zustandsvektor berechnen lässt. 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 dem 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 Gedankenspiel 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 Grundlage 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 (Lösung Seite 36): (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 Sie sicher einige mathemati-