


# Vorwort

Vorgelegt werden hier Notizen zur Vorlesung “Quantenmechanik II” die als Kursvorlesung “Theoretische Physik V” im Format 3V1Ü in Potsdam im 7. Semester (1. Semester Master) angeboten wird.

Die Notizen spiegeln den Gang der Vorlesung wieder. An manchen Stellen sind sie ausführlicher, anderes ist in die Übungen verwiesen.

Die Inhalte des Kurses sind weniger “kanonisiert” als etwa im QM-I Kurs. Zunächst W’hlg, dann Ergänzungen zur QM-I: Streutheorie und – ja nach Geschmack – Pfadintegrale oder Irreversibilität. Sodann relativistische Quantenmechanik mit Klein-Gordon und Dirac Wellenmechanik als Auftakt, gefolgt von Quantisierung des Strahlungsfeldes, Diracfeldes und QED. Alternativ auch “2-te Quantisierung” nicht-relativistischer Vielteilchensysteme in Hinblick auf Anwendungen in Festkörperphysik . . .

 Die Notizen sind voller Fehler und erheben keinerlei Anspruch auf Originalität. Lehrbücher zur QM-II gibt es zuhauf, mehr als etwa zur klassischen Mechanik oder zur Elektrodynamik. Eine kurze kommentierte Auswahl:

W’hlg QM-I Unnötig zu sagen, aber geeignet ist

- jedes Lehrbuch der QM, z.B. Schwabel, Nolting, Greiner usw. Mein derzeitiger Favorit: “Quantenmechanik – Nichtrelativistische Quantentheorie” von Norbert Straumann. Schweizer Präzisionsarbeit. Eher mathematisch orientiert, aber immer mit Bezug zur Physik. Auch der Nachfolgebund “Relativistische Quantentheorie – Eine Einführung in die Quantenfeldtheorie” folgt dieser Leitidee. Empfehlenswert – insbesondere wenn man eher theoretisch orientiert ist.

### Streutheorie jedes Lehrbuch der Quantenmechanik

- ... also beispielsweise Schwabl I

### Relativistische Quantenmechanik jedes Lehrbuch zur “Quantenmechanik II”, insbesondere aber

- Bjorken und Drell *Relativistische Quantenmechanik*: Der Klassiker. Wohltuend der Verzicht auf den formalen Schnick-Schnack der die heutige Generation von Lehrbüchern zur Quantenfeldtheorie prägt ...
- Schwabl II: Solide. Empfehlenswert.
- Itzykson und Zuber “Quantum Field Theory” (Kap. 1 und 2): Auch ein Buch der “klassischen Moderne”. Hart aber für Aficionados durchaus empfehlenswert.

Allerdings muss gesagt werden, dass eigenständige Lehrbücher (mit Ausnahmen Bjorken-Drell) zur Relativistischen Quantenmechanik rar sind. Der Grund ist einfach: die relativistische QM wird generell nur als “Durchgangsstation” zur Quantenfeldtheorie gesehen.

### Quantenelektrodynamik wie gesagt

- Itzykson und Zuber “Quantum Field Theory” ist ein Klassiker

- Mandl und Shaw “Quantum Field Theory” – etwas moderner als IZ und dann gibt es viele dicke Bücher zur QFT in denen viele Formeln stehen ...

**Vielteilchensysteme** hier wird die Luft schon dünner (wenn es um “konkrete Anwendungen” geht), trotzdem

- Schwabl II: Solide. Empfehlenswert.
- Mahan “Many-Particle Systems” – so was wie der Jackson der Vielquantenphysik.
- Negele and Orland “Quantum Many-Particle Systems” – gut für den systematischen Aufstieg von Ein-Teilchen QM zur Vielteilchen-QM, aber nicht ganz so so breit wie Schwabl II.

Abschließend eine Empfehlung für die Strandbar – oder einsame Abende unter dem Blue Moon: *Quantum Field Theory – in a nutshell* von A. Zee [Princeton University Press 2003; ISBN 0-691-01019-6]. Gewürzt mit Anekdoten zu den physikalischen Entdeckungen der Quantenfeldtheorie (QFT) vermittelt dieses Buch einen hervorragenden Überblick über die Konzepte der modernen QFT und ihre Genese ohne den Leser mit detaillierten Rechnungen zu traktieren.



# Kapitel 1

## Wichtig Prinzipien der QM

Wir wiederholen – es ist schließlich schon mehr als ein Jahr her – die Prinzipien der Quantenmechanik wie Sie sie in “QM-I” kennengelernt haben. Unter dem Stichwort “Kinematik” Begriffe wie Zustand und alles was mit der Messung zu tun hat. Unter dem Stichwort “Dynamik” das Schicksal von unbeobachteten Quantensystemen. Und unter dem Stichwort “Identische Teilchen” die quantenmechanischen Besonderheiten der Ununterscheidbarkeit.

### 1.1 Kinematik

Sie erinnern sich: ein quantenphysikalisches System (Elektron, Atom, Kartoffel, Universum) ist charakterisiert durch einen **Hilbertraum**  $\mathcal{H}$ , dessen Elemente  $\psi$  die möglichen **Zustände** des Systems beschreiben, und eine Menge selbstadjungierter Operatoren, deren Elemente  $\hat{A}$  als **Observable** des Systems fungieren. Im Unter-

Hilbertraum? ... ist ein komplexer, vollständiger und separabler Vektorraum  $\mathcal{H}$  mit Skalarprodukt, für zwei Vektoren  $\phi, \psi$  notiert  $\langle \phi | \psi \rangle$ . Das Skalarprodukt vermittelt die Norm  $\|\psi\| := \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$ , und die wiederum die Metrik  $d(\psi, \phi) := \|\psi - \phi\|$ .

Operator? ... ist in der Quantenmechanik ein Tupel  $(\hat{A}, \mathcal{D})$ , wo  $\hat{A}$  eine lineare Abbildung von  $\mathcal{H}$  (dem Hilbertraum des Systems) mit Definitionsbereich  $\mathcal{D} \subset \mathcal{H}$ . Linear bedeutet  $\hat{A}(\alpha\phi + \beta\psi) = \alpha\hat{A}\phi + \beta\hat{A}\psi$  für alle  $\phi, \psi$  aus dem Definitionsbereich und alle komplexen Koeffizienten  $\alpha, \beta$ . Meist wird ein Operator einfach beim Namen der Operationsvorschrift  $\hat{A}$  gerufen.

Der adjungierte von  $\hat{A}$ , notiert  $\hat{A}^\dagger$ , ist definiert  $\langle \phi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle := \langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle^*$  für alle  $\phi \in \mathcal{D}(\hat{A}) \subset \mathcal{H}$  und alle  $\psi \in \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger) \subset \mathcal{H}$ . Selbstadjungiert bedeutet nun, dass sich die Abbildungen und die Definitionsbereiche gleichen, kurz  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$  bzw.  $\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle^*$  für alle  $\phi, \psi \in \mathcal{D}(\hat{A}) = \mathcal{D}(\hat{A}^\dagger)$ . Um den Text nicht mit zuviel technischen Details zu belasten, nehmen wir hier immer an, dass alle Bereichfragen geklärt sind ... und dass insbesondere alle Definitionsbereiche wenn schon nicht ganz  $\mathcal{H}$ , dann doch zumindest dicht in  $\mathcal{H}$ .

schied zur klassischen Mechanik kodiert ein Zustand(svektor) dabei nicht die Eigenschaften eines individuellen Systems (das Elektron, das ich hier gerade in der Hand halte), sondern die statistischen Eigenschaften eines **Ensembles** gleichartig (nämlich  $\psi$ -) präparierter Teilchen. Wird so ein Ensemble im Zustand  $\psi$  einer  $A$ -Messung unterworfen, so sind die Messwerte zufällig verteilt, mit Mittelwert

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi := \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (1.1)$$

Ist der Zustandsvektor normiert,  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ , entfällt der Nenner. In diesem Fall ist der statistische Mittelwert offensichtlich gleich dem Diagonalelement von  $\hat{A}$ , dann auch genannt **Erwartungswert** von  $A$  im Zustand  $\psi$ .

Unterschiedliche physikalische Zustände werden durch unterschiedliche Vektoren beschrieben, aber Ununterscheidbarkeit von Zuständen impliziert nicht Ununterscheidbarkeit der zugeordneten Vektoren. Zwei nichttriviale Vektoren  $\psi$  und  $\psi'$ , die sich nur dadurch unterscheiden, dass der eine ein Vielfaches des anderen – die also linear abhängig sind – geben nach (1.1) für alle Observable den gleichen Erwartungswert. Mathematisch sind sie verschieden, physikalisch aber ununterscheidbar.<sup>1</sup> “Jüngere Äquivalenzrelation” ist eine Äquivalenzrelation, die Äquivalenzklassen nennt man Strahl, bei Beschränkung auf normierte Vektoren genannt **Einheitsstrahl**, notiert  $[\psi] := \{e^{i\varphi}|\psi\rangle \mid |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \|\psi\| = 1, \varphi \in \mathbb{R}\}$ . Die Menge aller Einheitsstrahlen bildet einen eigenen Raum, genannt der (komplexe) **projektive Raum** über  $\mathcal{H}$ , bezeichnet  $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ . Einheitsstrahlen, im Gegensatz zu Vektoren, sind in einer eins-zu-eins Korrespondenz mit physikalischen Zuständen. Das klingt gut. Leider erweist sich die Formulierung der QM unter Rückgriff auf projektive Räume als etwas sperrig. Das Superpositionsprinzip, beispielsweise, lässt sich mit Einheitsstrahlen nur äußerst unständig formulieren: die Linearkombination  $\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle := |X\rangle$  ist ein Vektor,

<sup>1</sup>Nichttrivial sind alle Vektoren außer dem Null-Vektor.

beschreibt also nach Normierung einen physikalischen Zustand, aber der Einheitsstrahl  $[\chi]$  ist eben keine Linearkombination der Strahlen  $[\psi]$  und  $[\phi]$ . Wir werden daher die “Strahlsprache” so weit wie möglich vermeiden, und stattdessen weiterhin etwas lax von “Zustandsvektoren” sprechen.

Neben dem Mittelwert ist häufig auch die (quadratische) Varianz in einem statistischen Experiment von Bedeutung, für normierte Zustände definiert

$$\Delta_{\psi}^2(A) := \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_{\psi})^2 | \psi \rangle. \quad (1.2)$$

Sie erinnern sich – die Wurzel aus der quadratischen Varianz vermittelt ein Maß für die Streuung der Messwerte um den Mittelwert.

Die Menge der möglichen Messwerte einer  $A$ -Messung ist durch das Spektrum  $\sigma_A$  des zugeordneten Operators  $\hat{A}$  gegeben. Mit  $\hat{A}$  selbstadjungiert ist das Spektrum in jedem Fall reell. Instrukтив der Fall des reinen Punktspektrums  $\sigma_A = \{a_1, a_2, \dots\}$  worin  $a_i$  die diskreten Eigenwerte von  $\hat{A}$ , also  $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$  mit  $|a_i\rangle$  Eigenvektor von  $\hat{A}$  zum Eigenwert  $a_i$ . Die Eigenvektoren bilden eine vollständiges Orthonormalsystem,

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}, \quad \sum_i |a_i\rangle \langle a_i| = \hat{1}. \quad (1.3)$$

Vollständigkeit garantiert, dass jede Präparation vermessen werden kann: jede Wellenfunktion  $|\psi\rangle$  gestattet eine Entwicklung nach den  $|a_i\rangle$ ,

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |a_i\rangle \quad (1.4)$$

mit eindeutig bestimmten Entwicklungskoeffizienten  $\psi_i = \langle a_i | \psi \rangle$ .<sup>2</sup> Orthogonalität garantiert, dass die einzelnen Messausgänge  $|a_i\rangle$  wohlunterscheidbar sind. Ausgedrückt durch Eigenwerte  $a_i$  und Eigenvektoren  $|a_i\rangle$  liest sich Gl. (1.1)  $\langle \hat{A} \rangle = \sum_i a_i |\langle a_i | \psi \rangle|^2$ , kurz: bei der  $A$ -Messung wird mit W'keit  $|\psi_i|^2 \equiv |\langle a_i | \psi \rangle|^2$  der Messwert  $a_i$  abgelesen.

<sup>2</sup>Die Folge  $(\psi_i = \langle a_i | \psi \rangle)_{i=1}^{\dim \mathcal{H}}$  vermittelt die sog.  $A$ -Darstellung von  $|\psi\rangle$ .

Wird bei einer  $A$ -Messung ein Wert  $a_i$  abgelesen, und wird dieser Messwert in einer unmittelbar anschließenden Kontrollmessung bestätigt, ist die  $A$ -Messung in einem idealen Messgerät verwirklicht. Messgeräte im Labor sind natürlich nie ideal; wer aber nur genügend Geld in die Hand nimmt, kann die Abweichungen seines Geräts vom Ideal beliebig klein machen. Wenn im Folgenden von einer  $A$ -Messung die Rede ist, ist immer die Messung mit einem idealen Messgerät gemeint. In diesem Fall bedeutet die  $A$ -Messung eine Zustandsänderung

$$|\psi\rangle \rightarrow |a_i\rangle \quad \text{mit W'keit } |\langle a_i|\psi\rangle|^2 \quad (1.5)$$

zuweilen genannt *Kollaps der Wellenfunktion*. Man beachte, dass eine quantenmechanische Messung irreversibel ist: aus den W'keiten  $\langle a_i|\psi\rangle|^2$  lässt sich der Zustand  $\psi$  i.A. nicht rekonstruieren: Dazu bräuchte man nämlich sowohl Betrag (der experimentell ermittelt werden kann) als auch Phase (über die eine  $A$ -Messung nichts zu sagen hat) von  $\langle a_i|\psi\rangle$ .

Um etwas vor Augen zu haben, rufen wir uns Spin- $\frac{1}{2}$  in Erinnerung. Hilbertraum  $\mathcal{H}_{\text{spin}}$  ist  $\simeq \mathbb{C}^2$ . Observable sind die Paulioperatoren  $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ . Die Paulis sind selbstadjungiert und genügen der Algebra  $[\sigma_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\sigma_z$  ( $xyz$  zyklisch) nebst  $\hat{\sigma}_a^2 = \hat{1}$ , worin  $\hat{1}$  die Identität auf  $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ , für alle  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{\text{spin}}$  also  $\hat{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle$ . Die Algebra garantiert, dass jede Liniarkombination  $\hat{\sigma}_a := a_x\hat{\sigma}_x + a_y\hat{\sigma}_y + a_z\hat{\sigma}_z$  mit reellen Koeffizienten  $a_x, a_y, a_z$ , normiert  $a_x^2 + a_y^2 + a_z^2 = 1$ , eine Observable "Spin-Einstellung in  $a$ -Richtung" mit Eigenwerten  $+1$  und  $-1$ , die zugehörigen Eigenvektoren bezeichnet  $|\uparrow_a\rangle$  und  $|\downarrow_a\rangle$  (lies: "rauf" und "runter").<sup>3</sup> Das entsprechende Messgerät ist ein Stern-Gerlach Magnet mit Orientierung in  $a$ -Richtung (bezeichnet  $\text{SGM}_a$ ): Teilchen die den  $\text{SGM}_a$  durch den oberen Kanal verlassen (Messwert  $+1$ ) sind mit Sicherheit

<sup>3</sup>In der sog. Standarddarstellung werden die Eigenvektoren von  $\hat{\sigma}_z$  mit Spaltenvektoren identifiziert,

$$|\uparrow_z\rangle \mapsto \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow_z\rangle \mapsto \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.6)$$



im Zustand  $|\uparrow_a\rangle$ , Teilchen die den  $\text{SGM}_a$  im unteren Kanal verlassen sind mit Sicherheit im Zustand  $|\downarrow_a\rangle$ . Werden Teilchen, die im Zustand  $|\psi\rangle = |\uparrow_b\rangle$  präpariert sind, einer  $\text{SGM}_a$ -Messung unterzogen, werden sie mit W'keit  $|\langle\uparrow_a|\uparrow_b\rangle|^2 = \frac{1+\vec{a}\vec{b}}{2}$  zu einem Messwerte  $+1$  Anlass geben, entsprechend das  $\text{SGM}_a$  durch den oberen Kanal verlassen, und mit W'keit  $|\langle\downarrow_a|\uparrow_b\rangle|^2 = \frac{1-\vec{a}\vec{b}}{2}$  einen Messwert  $-1$  anzeigen, entsprechend das  $\text{SGM}_a$  durch den unteren Kanal verlassen.

Ist ein Teil oder gar das ganze Spektrum kontinuierlich entsprechend  $|\langle a|\psi\rangle|^2 da$  die W'keit, einen Messwert im Intervall  $da$  bei  $a$  abzulesen. Pedanten weisen darauf hin, dass Elemente  $a$  im kontinuierlichen Spektrum im strengen Sinne keine Eigenwerte und daher die  $|a\rangle$  auch keine Eigenvektoren: das Eigenwertproblem  $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$  hat für  $a \in \sigma_{ac}$  keine Lösung  $|a\rangle$  im Hilbertraum, sondern ledigliche in einem sog *außergewählten* Hilbertraum (engl. *rigged Hilbert space*). Streng genommen ist nur das Spektraldifferential  $\mathcal{P}(a, da) := |a\rangle\langle a|da$  von Bedeutung – vgl. Ergänzung Indikatortobservable. Trotzdem werden wir auch die Zahlen im kontinuierlichen Spektrum als Eigenwerte bezeichnen, und die  $|a\rangle$  als Eigenvektoren – wenn's denn sein muss als *verallgemeinerte Eigenvektoren*<sup>4</sup>.

Um auch hier etwas vor Augen zu haben, rufen wir uns den Massepunkt in Erinnerung, zur Vereinfachung mit einem Freiheitsgrad. Wichtige Observable, sog *Basissobservable*, sind der Ort  $\hat{q}$  und der kanonisch konjugierte Impuls  $\hat{p}$ . Andere Observable sind Funktionen von Ort und Impuls wie beispielsweise die Hamiltonsche Energie

und die Paulioperatoren mit Matrizen

$$\hat{\sigma}_x := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.7)$$

<sup>4</sup>Wieder so ein Begriff, der eigentlich sinnlos ist. Kennen wir schon: auch die Diracfunktion ist schließlich keine Funktion – aber was soll's ...

Formal ist das Spektrum als Komplément der sog *Resolventenmenge* definiert,  $\sigma_A = \mathbb{C} \setminus \varrho_A$ , worin  $\varrho := \{z \in \mathbb{C} | (z - \hat{A})^{-1} \text{ beschränkt}\}$ . Mit  $\hat{A}$  selbstadjungiert ist das Spektrum reell, die Spektralschar vollständig. Die meisten Observablen sind durch ein Spektrum gekennzeichnet das zwei Anteile enthält,  $\sigma_A = \sigma_{pp} \cup \sigma_{ac}$ , wobei  $\sigma_{pp}$  – das sog *Punktspektrum* – die Menge der Eigenwerte von  $\hat{A}$ , und  $\sigma_{ac}$  das sog *kontinuierliche Spektrum*.

$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q})$ . Ort und Impuls genügen der *kanonischen Vertauschungsrelation*,

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (1.8)$$

In der sog. *Ortsdarstellung* wirkt  $\hat{q}$  definitionsgemäß wie “Multiplikation mit der Koordinate  $x$ ”, also  $(\hat{q}\psi)(x) = x\psi(x)$ .<sup>5</sup> Der Impulsoperator wirkt wie “Ableitung”, also  $(\hat{p}\psi)(x) = \frac{\hbar}{i}\psi'(x)$ . Hilbertraum ist in dieser Darstellung  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dx)$  – der Funktionenraum der quadratintegrierbaren komplexwertigen Funktionen über einem Maßraum  $(\mathbb{R}, dx)$ . Als Skalarprodukt fungiert  $\langle \phi | \psi \rangle = \int \phi^*(x)\psi(x)dx$ . Ist die Wellenfunktion normiert,  $\int |\psi(\vec{x}, t)|^2 dx = 1$ , vermittelt das Absolutquadrat  $|\psi(x)|^2$  die W'kheitsdichte für die Ortsmessung: mit W'keit  $|\psi(x)|^2 dx$  wird ein Teilchen, das im Zustand  $\psi$  präpariert ist, bei einer Ortsmessung in einer Umgebung  $dx$  bei  $x$  gefunden.

Ortsmessung ist nett, aber beileibe nicht die einzige Messung, die man vornehmen kann. Wenn man beispielsweise an Impulsen interessiert ist, vermittelt die Fouriertransformierte  $\tilde{\psi}(k) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ikx}\psi(x)dx$  die Wellenfunktion in der Impulsdarstellung, und  $|\tilde{\psi}(k)|^2 dk$  entsprechend die W'keit bei einer Impulsmessung einen Messwert in einer Umgebung  $\hbar dk$  bei  $\hbar k$  abzulesen.

Ach ja – die Streuungen der Messwerte von Ort und Impuls genügen der Heisenbergschen Unschärferelation

$$\Delta_{\hat{\psi}}^2(q)\Delta_{\hat{\psi}}^2(p) \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad (1.9)$$

die Sie in der QM-I bewiesen und dort auch ausführlich interpretiert haben ...

<sup>5</sup>Analogie: ist  $\hat{N}$  eine Diagonalmatrix mit Matrixelementen  $M_{mn} = m\delta_{mn}$ , wirkt  $\hat{N}$  auf einen Vektor  $v$  gemäss  $(\hat{N}v)_m = \sum_n M_{mn}v_n = mv_m$ .

## 1.2 Dynamik

Die irreversible Zustandsänderung der Messung (1.5) kontrastiert scharf mit der reversiblen Zustandsänderung die das System durchmacht während es von seiner Umgebung (Umwelt, Messgerät etc) isoliert ist. Zuständig ist in diesem Fall die

### Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \quad (1.10)$$

worin  $\hat{H}$  der **Hamiltonoperator** des Systems.

Um nicht in Konflikt mit der Wirkheitsinterpretation zu geraten, ist der Hamiltonoperator notwendig selbstadjungiert. Formal fungiert er als *Erzeugender*, gebildet *Generator*, zeitlicher Verschiebungen. Abstrakt notiert

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\Psi(0)\rangle \quad (1.11)$$

worin  $\hat{U}(t) := e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t}$  unitär, sog **Zeitentwicklungsoperator**, auch *Propagator*, und  $|\Psi(0)\rangle$  ein beliebiger Zustandsvektor, sog **Anfangszustand**.

Die Dynamik des Zustandsvektors bedeutet eine Zeitabhängigkeit der Erwartungswerte,  $\langle \hat{A} \rangle_{\Psi(t)} = \langle \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t) \rangle_{\Psi(0)}$ . Verabredet man hier in einem sog **Heisenbergbild** zeitabhängige Operatoren  $\hat{A}_H(t) := \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t)$ , schaut man auf Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)], \quad (1.12)$$

mit Anfangsbedingung  $\hat{A}_H(t=0) = \hat{A}$ , und  $\hat{H}_H(t) := \hat{U}^\dagger(t) \hat{H}(t) \hat{U}(t)$  der Hamiltonoperator im Heisenbergbild ( $\hat{H}_H(t) = \hat{H}$  falls  $\hat{H}$  zeitunabhängig). Ist  $\hat{A}$  explizit zeitabhängig (Beispiel:  $\hat{A} = \hat{q} + t$ ) ist die rechte Seite um einen Term  $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}$  zu ergänzen (im Beispiel  $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 1$ ).

Eine Operator, der sich unter der Zeitentwicklung nicht ändert – alternativ: dessen Erwartungswert zeitunabhängig – heißt eine Konstante der Bewegung, auch **Erhaltungsgröße**. Offensichtlich konstruiert  $\hat{A}$  genau dann eine Erhaltungsgröße, wenn  $\hat{A}$  mit dem Hamiltonoperator kommutiert. Das Paradebeispiel vermittelt atomarer Wasserstoff, nicht-relativistisch und ohne Spin, wie Sie ihn in der QM-I Vorlesung kennengelernt haben. Der Bahndrehimpuls  $\hat{\vec{\ell}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$  – genauer gesagt: jede kartesische Komponente  $\hat{\ell}_a = \vec{a} \cdot \hat{\vec{\ell}}$  mit  $\vec{a}$  Euklidischer Einheitsvektor “in  $a$ -Richtung” – kommutiert mit dem Hamiltonoperator  $\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}|}$  und ist daher eine Erhaltungsgröße,  $\langle \psi(t) | \hat{\vec{\ell}} | \psi(t) \rangle = \overrightarrow{const.}$

Zwei kommutierende Observable  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  besitzen ein gemeinsames System von Eigenvektoren (kurz:  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  lassen sich gemeinsam diagonalisieren). Im Falle atomaren Wasserstoffs sind die  $\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)$  mit  $n = 1, 2, \dots$ ,  $\ell = 0, 1, \dots, n - 1$ ,  $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$  sowohl Eigenfunktionen von  $\hat{H}$ , nämlich  $\hat{H}\psi_{nlm} = \epsilon_{nl}\psi_{nlm}$  mit  $\epsilon_{nl} = -\frac{Ry}{n^2}$ , als auch Eigenfunktionen von  $\hat{\ell}_z$  und  $\hat{\ell}^2$ , nämlich  $\hat{\ell}_z\psi_{nlm} = \hbar m\psi_{nlm}$  und  $\hat{\ell}^2\psi_{nlm} = \hbar^2\ell(\ell + 1)\psi_{nlm}$ . Kein Wunder – schließlich kommutieren  $\hat{\ell}_z$  und  $\hat{\ell}^2$  sowohl untereinander (das gemeinsame System von Eigenfunktionen sind die Kugelflächenfunktionen  $Y_{\ell m}$ ) als auch mit  $\hat{H}$ . Die Index-Variablen  $\ell$  und  $m$  sind sog. **gute Quantenzahlen**

### 1.3 Symmetrien und Erhaltungsgrößen

Viele Systeme sind durch ihre Symmetrien charakterisiert. Das System “Massepunkt im Zentralfeld”, beispielsweise, ist “drehsymmetrisch”, womit gemeint ist, dass die Hamiltonfunktion  $H(\vec{p}, \vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(|\vec{r}|)$  invariant ist unter Drehungen, kanonisch dargestellt  $(\vec{r}, \vec{p}) \mapsto (\underline{R}\vec{r}, \underline{R}\vec{p})$ , wo  $\underline{R} \in SO(3)$  orthogonale  $3 \times 3$ -Matrix,  $R^{-1} = R^T$ ,

die die Orientierung respektiert,  $\text{Det}(\underline{R}) = 1$ .

Symmetrie impliziert Erhaltungstze – so lässt sich das **Noether'sche Theorem** in drei Worten zusammenfassen. Etwas ausführlicher: die Erzeugenden einer kontinuierlichen Symmetriegruppe sind erste Integrale der Bewegung. So ist beispielsweise die  $z$ -Komponente des Bahndrehimpulses Erzeugende einer infinitesimalen Drehung um die  $z$ -Achse. Durch Hintereinanderausführen derartiger infinitesimaler Drehungen lässt sich jede endliche Drehung um die  $z$ -Achse erzeugen. Weist das System Rotationssymmetrie bezüglich Drehungen um die  $z$ -Achse auf, ist nach dem Noether'schen Theorem die Erzeugende  $\ell_z$  eine Konstante der Bewegung.<sup>6</sup>

In der Quantenmechanik werden kanonische Transformationen wie Drehungen, aber auch Verschiebungen, Spiegelungen durch die sog **Wigner-Automorphismen** dargestellt. Unter einem Wigner-Automorphismus  $T$  ("T" wie Transformation) versteht man in diesem Zusammenhang eine bijektive Abbildung von Zuständen (=Einheitsstrahlen)  $|\psi\rangle \mapsto T(|\psi\rangle)$ , die von einer Abbildung der Observablen (=selbstadjungierte Operatoren)  $\hat{A} \mapsto T(\hat{A})$  begleitet wird, derart, dass die Verteilungen bzw. Übergangswahrscheinlichkeiten unter  $T$  invariant sind. Ist gar der Hamiltonoperator unter  $T$  invariant, also  $T(\hat{H}) = \hat{H}$ , ist  $T$  eine Symmetrietransformation für das betrachtete System.

Der **Satz von Wigner** besagt nun, dass jeder derartige Automorphismus im Hilbertraum realisiert werden kann

$$\psi \mapsto \psi' = \hat{U}\psi, \quad \hat{A} \mapsto \hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1} \quad (1.13)$$

<sup>6</sup>Im übrigen verdanken Symmetrietransformationen ihre hervorragende Bedeutung dem einfachen Umstand, dass sich mit ihrer Hilfe verschiedene Lösungen zu einer gegebenen Bewegungsgleichung generieren lassen. Hat man beispielsweise eine bestimmte Keplerellipse, die die Bewegung des Probedeilchens im Schwerfeld beschreibt, erhält man durch eine einfache Drehung dieser Ellipse eine weitere, physikalisch realisierbare Bahn. Die beiden Ellipsen mögen verschieden sein, die Bewegungsgleichungen, die ihnen zugrunde liegen, sind es wegen der Rotationsinvarianz der Hamiltonfunktion nicht.

Eine **kanonische Transformation** ist eine Selbstabbildung des  $(q, p)$ -Phasenraums unter der Hamiltonsche Vektorfelder auf Hamiltonsche Vektorfelder abgebildet werden. Eine Menge kanonischer Transformationen, in der zu jeder in ihr enthaltenen Transformation auch eine Umkehrung in der Menge existiert, und die unter der Verknüpfung "Hintereinanderausführung" abgeschlossen ist, definiert eine bestimmte **Transformationsgruppe**. Ist die Hamiltonfunktion eines physikalischen Systems invariant unter den kanonischen Transformationen einer Transformationsgruppe spricht man von einer **Symmetriegruppe** des Systems. Eine Transformations- bzw. Symmetriegruppe heißt eine **kontinuierliche** der Dimension  $d$ , wenn sich die Transformationen mit  $d$  wesentlichen Parametern analytisch parametrisieren lassen (d. h. die Parameter sollen sich nicht als Funktionen von weniger Parametern darstellen lassen) und **diskret**, falls die Parametermängigkeit eine Teilmenge der natürlichen Zahlen.

Eine infinitesimale Transformation  $q \mapsto Q_\epsilon = q + \epsilon\eta(q, p) + \dots$ ,  $p \mapsto P_\epsilon = p + \epsilon\zeta(q, p) + \dots$  mit  $\dots$  von Ordnung  $\epsilon^2$  für  $|\epsilon| \ll 1$ , ist kanonisch, wenn es eine Funktion  $F(q, p)$  – genannt die **Erzeugende** der Transformation – gibt, so dass  $\eta = \frac{\partial F}{\partial p}$  und  $\zeta = -\frac{\partial F}{\partial q}$ .

wobei  $\hat{U} \equiv \hat{U}(T)$ , bis auf eine globale Phase durch  $T$  eindeutig bestimmt, entweder unitär und linear,

$$\langle \hat{U}\phi | \hat{U}\psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle, \quad \hat{U}(\alpha|\phi\rangle + \beta|\psi\rangle) = \alpha\hat{U}|\phi\rangle + \beta\hat{U}|\psi\rangle \quad (1.14)$$

oder **antunitär und antilinear**

$$\langle \hat{U}\phi | \hat{U}\psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle^*, \quad \hat{U}(\alpha|\phi\rangle + \beta|\psi\rangle) = \alpha^*\hat{U}|\phi\rangle + \beta^*\hat{U}|\psi\rangle \quad (1.15)$$

Ob nun unitär oder antunitär – in jedem Fall

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}. \quad (1.16)$$

Antunitäre begegnen einem in der Quantenmechanik bei der Zeitumkehr und der Ladungskonjugation. Andere Transformationen, wie beispielsweise räumliche Spiegelungen, räumliche Verschiebungen und Drehungen, aber auch Schlitze (Galilei bzw. Lorentz) werden durch unitäre Operatoren dargestellt. Der unitäre  $\hat{U}_a := e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}$ , beispielsweise, dient der Darstellung einer Transformation ‘‘Verschiebung’’. In der Ortsdarstellung  $\hat{p} \mapsto \hbar \frac{d}{dx}$  ist  $(\hat{U}_a\psi)(x) = \psi(x-a)$ . Lies: erzeugt eine Maschine  $M$  Teilchen im Zustand  $\psi(x)$ , so erzeugt die um  $a$  verschobene Maschine Teilchen im Zustand  $\psi'(x) = \psi(x-a)$ . Aus der infinitesimalen Verschiebung um  $\varepsilon$ ,  $\psi \mapsto \psi' = \psi - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{p}\psi$  liest man die Erzeugende der Verschiebung ab – der kanonische Impuls! Gefragt, was denn nun der kanonische Impuls sei, dürfen Sie nun gebildet antworten ‘‘Die Erzeugende der Verschiebung!’’<sup>7</sup>

Sei nun  $\hat{A}$  eine Observable, nicht notwendig eine Erhaltungsgröße, die im Folgenden die Rolle einer Erzeugenden übernimmt. Dann ist der Operator  $\hat{U}_\varepsilon := e^{-i\varepsilon\hat{A}}$ , worin  $\varepsilon$  eine reelle Zahl, in jedem Fall unitär, daher legitimer Kandidat für einen Wigner-Automorphismus. Hat man dann eine Lösung  $|\Psi(t)\rangle$  einer Schrödingergleichung zum

<sup>7</sup>Noch besser: ‘‘Die Erzeugende der virtuellen Verrückung.’’

Hamiltonoperator  $\hat{H}$ , so ist  $|\Psi_\epsilon(t)\rangle := \hat{U}_\epsilon|\Psi(t)\rangle$  Lösung einer Schrödingergleichung zum Hamiltonoperator  $\hat{H}_\epsilon := \hat{U}_\epsilon\hat{H}\hat{U}_\epsilon^\dagger$ . Im Allgemeinen sind die Hamiltonoperatoren  $\hat{H}$  und  $\hat{H}_\epsilon$  verschieden, sind also unterschiedlichen Systemen zugeordnet. Ist jedoch  $\hat{A}$  eine Erhaltungsgröße, kommutieren also  $\hat{H}$  und  $\hat{U}_\epsilon$ , ist  $\hat{H} = \hat{H}_\epsilon$ , d.h. das System (nicht die Zustände!) ist invariant unter der Transformation mit  $\hat{U}_\epsilon$ , kurz: die mit  $\hat{A}$  erzeugte kontinuierliche Transformationsgruppe ist eine Symmetriegruppe des Systems.

In der Elementarteilchenphysik stellt man zunächst experimentell Erhaltungssätze fest, postuliert entsprechende Symmetriegruppen, und schränkt so die möglichen Hamiltonoperatoren ein. Rotationsinvarianz, beispielsweise, bedeutet dass die Spin-Wechselwirkung zweier Teilchen 1 und 2 notwendig von der Form  $\gamma\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2$ , worin  $\gamma$  eine experimentell zu ermittelnde Funktion, die nur vom Abstand der beiden Teilchen abhängen kann.

## 1.4 Aus zwei mach eins – zusammengesetzte Systeme

Führt man zwei Systeme  $A$  und  $B$  zusammen, entsteht ein neues System, genannt *zusammengesetztes System* bzw. *Verbundsystem*, bezeichnet  $AB$ . Der Hilbertraum des zusammengesetzten Systems,  $\mathcal{H}^{(AB)}$ , ist das Tensorprodukt  $\mathcal{H}^{(AB)} := \mathcal{H}^{(A)} \otimes \mathcal{H}^{(B)}$ . Bevolktert wird  $\mathcal{H}^{(AB)}$  von den sog. *Produktzuständen*  $|\phi\rangle \otimes |\chi\rangle$ ,  $\phi \in \mathcal{H}^{(A)}$ ,  $\chi \in \mathcal{H}^{(B)}$  und deren Linearkombinationen, die im Allgemeinen nicht die Form von Produktzuständen haben. Das Skalarprodukt auf  $\mathcal{H}^{(AB)}$  wird über das Skalarprodukt der Faktorräume erklärt,

$$\langle\langle\alpha| \otimes \langle\beta|) | (\gamma\rangle \otimes |\delta\rangle\rangle = \langle\alpha|\gamma\rangle^{(A)} \langle\beta|\delta\rangle^{(B)} \quad (1.17)$$

Als Basis von  $\mathcal{H}^{(AB)}$  kann eine sog. *Produktbasis* gewählt werden

$$|c_{ij}\rangle = |a_i\rangle \otimes |b_j\rangle. \quad (1.18)$$

Ein allgemeiner Zustand des Verbundsystems ist dann die Linearkombination

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |a_i\rangle \otimes |b_j\rangle. \quad (1.19)$$

Kann man Vektoren  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}^{(A)}$  und  $|\chi\rangle \in \mathcal{H}^{(B)}$  finden, so dass  $|\psi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\chi\rangle$  nennt man  $|\psi\rangle$  einen *Produktzustand*. Andernfalls nennt man  $|\psi\rangle$  einen *verschränkten Zustand*. In den Übungen zeigen Sie, dass die verschränkten Zustände die Regel sind, die Produktzustände die Ausnahmen.<sup>8</sup>

Als Beispiel betrachten wir zwei Qubits bzw. zwei Spin- $\frac{1}{2}$ , i.e. Hilberträume  $\mathcal{H}^{(A)} \simeq \mathbb{C}^2$ ,  $\mathcal{H}^{(B)} \simeq \mathbb{C}^2$ . Der Hilbertraum des zusammengesetzten Systems ist 4-dimensional,  $\mathcal{H}^{(A)} \times \mathcal{H}^{(B)} \simeq \mathbb{C}^4$ . Mittels Matrixdarstellung in den Faktorräumen

$$|\phi\rangle \mapsto \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^2, \quad |\chi\rangle \mapsto \begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^2, \quad (1.20)$$

induzieren wir eine Matrixdarstellung eines Produktzustands,

$$|\phi\rangle \otimes |\chi\rangle \mapsto \begin{bmatrix} \phi_1 & \begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{bmatrix} \\ \phi_2 & \begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1 \chi_1 & \phi_1 \chi_2 \\ \phi_2 \chi_1 & \phi_2 \chi_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^4. \quad (1.21)$$

<sup>8</sup>Für endlichdimensionale Faktorräume mit  $M := \dim \mathcal{H}^{(A)}$ ,  $N := \dim \mathcal{H}^{(B)}$  ist die Menge der Produktzuständen eine Mannigfaltigkeit der Dimension  $2(M+N) - 4$  ( $-4$  wegen Phasen und Betrag), wohingegen die Menge aller Zustandsvektoren eine Mannigfaltigkeit der Dimension  $2MN - 2$  ( $MN$  ist die Dimension des Produkttraumes,  $-2$  wegen Phase und Betrag).



Eine Observable  $\hat{A}$  des Subsystems  $A$  wird als Observable des Verbundsystems  $p$ -dantisch notiert  $\hat{A} \otimes \hat{1}^{(B)}$ , worin  $\hat{1}^{(B)}$  die Identität auf  $\mathcal{H}^{(B)}$ . Eine allgemeine Observable des Verbundsystems kann – zumindest formal – immer als eine Summe von Produkten der Form  $\hat{A} \otimes \hat{B}$  geschrieben werden.

Die Beschreibung zusammengesetzter Systeme mittels Tensorierung ist nicht auf Bi-partite Systeme beschränkt. Atome, Moleküle und Festkörper sind “zusammengesetzte Systeme”, nur dass der Hilbertraum des Gesamtsystems ein vielfaches Produkt der Hilberträume der einzelnen Teilchen.

Eine wichtige Klasse zusammengesetzter Systeme sind die Vielteilchensysteme der Festkörperphysik, der (ultrakalten) Gase oder Flüssigkeiten. Vielteilchensysteme – Sie erinnern sich an Ihre Thermodynamik-Vorlesung – werden gerne statistisch beschrieben – schließlich hat man kaum die Zeit oder die Nerven alle  $10^{23}$  Freiheitsgrade in einem Liter Luft genau zu beschreiben wenn man doch nur am Druck bei einer gegebenen Temperatur interessiert ist.

Vielteilchensysteme sind noch aus einem anderen Grund wichtig: Umgebungen eines Systems oder die Messgeräte an die das System zu Zwecken der Messung gekoppelt wird, sind typischerweise Vielteilchensysteme, involvieren viele Freiheitsgrade. Die Kopplung eines kleinen Systems mit wenig Freiheitsgraden an ein System mit vielen Freiheitsgraden – zuweilen genannt “Bad” – und sei die Kopplung noch so schwach, führt zu irreversiblen Verhalten des kleinen Systems – denken Sie nur an die Dämpfung eines Pendels (das System), das in Luft (das Bad) schwingt.

## 1.5 Identische Teilchen und Symmetrisierungspostulat

Zwei Teilchen heißen identisch, wenn sie grundsätzlich ununterscheidbar sind. Soll heißen, dass die beiden Teilchen in jedem gegebenen Präparations-Mess Aufbau zu den gleichen statistischen Verteilungen Anlass geben. Für das aus  $N$  identischen Teilchen zusammengesetzte System erfordert die Quantenmechanik, daran sei erinnert, ein zusätzliches Postulat – genannt das *Symmetrisierungspostulat* – das der klassischen Mechanik fremd ist. Demnach gibt es zwei Arten von identischen Teilchen – Bosonen und Fermionen. Die Wellenfunktion eines zusammengesetzten Systems identischer Bosonen ist vollständig symmetrisch, die Wellenfunktion eines zusammengesetzten Systems identischer Fermionen ist vollständig antisymmetrisch unter Permutation der (willkürlichen vergebenen) Teilchenamen. Ausgedrückt mittels Transposition  $i \leftrightarrow j$

$$\psi_{\eta}(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) = \eta \psi(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) \quad (1.22)$$

wobei  $\eta = +1$  für Bosonen, und  $\eta = -1$  für Fermionen.

Das Argument  $\xi$  bezeichnet einen vollständigen Satz von ein-Teilchen Quantenzahlen, beispielsweise  $\xi = (\vec{x}, m_s)$ , wobei  $\vec{x}$  Ortskoordinate und  $m_s$  magnetische Quantenzahl,  $m_s = -s, s + 1, \dots, +s$ . Das Spin-Statistik Theorem besagt, dass die Spinquantenzahl  $s$  – auch genannt “der Spin” – für Fermionen notwendig halbzahlig, für Bosonen hingegen notwendig ganzzahlig.

## 1.6 Gemische Zustände

Kann der Zustand eines Quantensystems durch einen Hilbertraumvektor beschrieben werden, sagt man das Quantensystem liege in einem reinen Zustand vor. Ein System in einem reinen Zustand zu präparieren ist allerdings nur selten möglich. Im allgemeinen wird in einem gegebenen physikalischen Aufbau das System in einem statistischen Gemisch reiner Zustände präpariert. So ein Zustandsgemisch, nennen wir es  $\rho$ , besteht beispielsweise aus einer gewissen Zahl, sagen wir  $N$ , reiner Zustände  $\psi_i$ ,  $i = 1 \dots, N$ , und einer Wahrscheinlichkeitsverteilung  $p_1, \dots, p_N$ , wobei  $p_i$  die W'keit, dass  $\psi_i$  im Gemisch vertreten ist. Die  $\psi_i$  müssen dabei weder paarweise verschieden noch paarweise orthogonal sein. In jedem Fall aber  $\sum_{i=1}^N p_i = 1$ .

Wird nun das fragliche System einer  $A$ -Messung unterzogen, wäre  $\langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle$  der Erwartungswert sofern das System im reinen Zustand  $[\psi_i]$  vorläge. Entsprechend ist der Erwartungswert für das Gemisch

$$\langle \hat{A} \rangle_\rho = \sum_{i=1}^N p_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle \quad (1.23)$$

Mit der Verabredung

$$\hat{\rho} := \sum_{i=1}^N p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (1.24)$$

läßt sich () kurz und bündig formulieren

$$\langle \hat{A} \rangle_\rho = \text{Tr}\{\rho \hat{A}\} \quad (1.25)$$

wo  $\text{Tr}\{\hat{X}\}$  die **Spur** von  $\hat{X}$  bezeichnet. In einer Matrixdarstellung bzgl. eine Hilbertraumbasis  $|\phi_\mu\rangle$  also  $\text{Tr}\{\hat{X}\} = \sum_\mu \langle \phi_\mu | \hat{X} | \phi_\mu \rangle$ .

Der in () definierte Operator ist ein Beispiel für einen sog **Dichteoperator**, zuweilen auch genannt *statistischer Operator*. Allgemein weist ein Dichteoperator folgende Eigenschaften auf:

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger \quad \text{selbstadjungiert} \quad (1.26)$$

$$\langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle \geq 0 \quad \text{positiv definit} \quad (1.27)$$

$$\text{Tr}\{\hat{\rho}\} = 1 \quad \text{normiert} \quad (1.28)$$

In den Übungen zeigen Sie, dass der in () definierte Operator diesen Anforderungen genügt.

Der Zustand eine quantenphysikalischen Systems ist vollständig durch einen Dichteoperator charakterisiert. Das bedeutet aber auch, dass die Zusammensetzung des Gemisches – also die  $\psi_i$  – sich aus einem gegebenen Dichteoperator i.A. nicht rekonstruieren lassen. Eine Ausnahme bilden Dichteoperatoren der Form  $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ . Man nennt so einen Dichteoperator einen **reinen Zustand** (wie man auch einen Dichteoperator zuweilen lax als ‘Zustand’ bezeichnet). Offensichtlich stehen die reinen Zustände der Quantenstatistik in einer eins-zu-eins Korrespondenz mit den Einheitsstrahlen der gewöhnlichen Quantenmechanik.

Für Dichteoperatoren gilt ganz allgemein

$$\text{Tr}\{\rho^2\} \leq 1 \quad (1.29)$$

wobei die Ungleichung genau für die reinen Zustände gesättigt,

$$\text{Tr}\{\rho^2\} = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \hat{\rho} \text{ ist reiner Zustand} \quad (1.30)$$

Letztere Gleichung kodiert ein einfach anzuwendendes Kriterium um die Reinheit eines Zustandes festzustellen.

Die Menge der Dichteoperatoren – genannt der **Zustandsraum**, bezeichnet  $\mathcal{S}(\mathcal{H})$  – ist eine konvexe Teilmenge der selbstadjungierten Spurklassenoperatoren. Hat man nämlich zwei Dichteoperatoren  $\rho_1$  und  $\rho_2$  so ist

$$\rho_\lambda = \lambda\rho_1 + (1 - \lambda)\rho_2 \quad (1.31)$$

für jedes reelle  $\lambda \in [0, 1]$  wiederum Dichteoperator.

Dichteoperatoren sind Ihnen aus der Thermodynamikvorlesung wohl vertraut. Der harmonische Oszillator, beispielsweise, in einem Wärmebad der Temperatur  $T$ , wird im thermodynamischen Gleichgewicht beschrieben durch

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \exp\{-\beta\hat{H}\} \quad (1.32)$$

worin  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2$  der Hamiltonoperator des Harmonischen Oszillators,  $\omega$  seine Eigenfrequenz,  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  mit  $k_B$  die Boltzmannkonstante, und  $Z = \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\}$  die kanonische Zustandssumme. In der Energiedarstellung  $\hat{\rho} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-\beta\varepsilon_n}}{Z} |n\rangle\langle n|$ , worin  $|n\rangle$  Eigenvektor von  $\hat{H}$  zum Eigenwert  $\varepsilon_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ .