



# Zeit- und Orts-Translationen in der nichtrelativistischen Quantenmechanik

## Vorwort

Der Sinn dieses Skripts liegt nicht darin, Leser und Leserin die Schrödingergleichung usw. noch einmal plausibel zu machen — es wird angenommen, dass das alles schon gut bekannt ist.

Es geht vielmehr darum, klarzumachen, wie fundamental die Annahmen sind, die in diese Überlegungen eingehen, um verständlich zu machen, an welchen Stellen die (klassische Spezial-) Relativitätstheorie Abweichungen von der nichtrelativistischen Quantenmechanik überhaupt zulässt bzw. erfordert.

## 1 Zeit-Entwicklung

Ein gegebenes (abgeschlossenes) physikalisches System sei zur Zeit  $t = t_0$  beschrieben durch den Zustandsvektor  $|\psi(t_0)\rangle$ . Wie entwickelt sich dieser Zustandsvektor mit der Zeit?

### 1.1 Zeitentwicklungsoperator

Wir führen zunächst einen “Zeitentwicklungsoperator”  $\hat{U}(t_1, t_0)$  ein durch

$$|\psi(t_1)\rangle =: \hat{U}(t_1, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad ,$$

dessen mathematische Eigenschaften wir nun aus seiner physikalischen Funktion heraus näher bestimmen wollen.

0. Zunächst folgt aus der Erhaltung der Wahrscheinlichkeit,

$$\langle \psi(t_1) | \psi(t_1) \rangle \stackrel{!}{=} \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle \quad ,$$

dass  $\hat{U}(t_1, t_0)$  *isometrisch*<sup>1</sup> ist:

$$\begin{aligned} \langle \psi(t_1) | \psi(t_1) \rangle &= \langle \hat{U}(t_1, t_0) \psi(t_0) | \hat{U}(t_1, t_0) \psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | \hat{U}^\dagger(t_1, t_0) \hat{U}(t_1, t_0) \psi(t_0) \rangle \\ &\stackrel{!}{=} \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle \end{aligned}$$

↷

$$\hat{U}^\dagger(t_1, t_0) \hat{U}(t_1, t_0) = \mathbf{1} \quad .$$

1. Die Zeitentwicklung ist kontinuierlich, d.h. die Entwicklung von  $t_0$  nach  $t_2$  führt über die Zwischenzeit  $t_1$ . Es folgt

$$\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0) \quad .$$

---

<sup>1</sup>Wenn nicht nur  $\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbf{1}$ , sondern auch  $\mathbf{U} \mathbf{U}^\dagger = \mathbf{1}$  gilt, wird  $\mathbf{U}$  *unitär* genannt. Einen Operator, für den nur  $\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbf{1}$  gilt, nennen die Mathematiker *isometrisch*. Diese feine Unterscheidung in der mathematischen Begriffsbildung ist für die Physik (außer im Rahmen der Streutheorie) aber eher nebensächlich.

2. Für  $t_1 = t_0$  bleibt der Zustand unverändert:  $|\psi(t)\rangle_{t_1} = |\psi(t)\rangle_{t_0}$ . Es folgt

$$\hat{\mathbf{U}}(t_0, t_0) = \mathbf{1} \quad .$$

3. Eine Zeitverschiebung von  $t_0$  nach  $t_1$  und danach wieder zurück von  $t_1$  nach  $t_0$  ist das selbe wie gar keine Verschiebung, es gilt also

$$\hat{\mathbf{U}}(t_0, t_1) \hat{\mathbf{U}}(t_1, t_0) = \hat{\mathbf{U}}(t_0, t_0) = \mathbf{1} \quad ,$$

woraus unmittelbar folgt

$$\hat{\mathbf{U}}(t_0, t_1) = \hat{\mathbf{U}}^{-1}(t_1, t_0) \quad .$$

4. Es gibt keinen absoluten *Zeit-Nullpunkt*, sondern nur *Zeit-Intervalle*. Das bedeutet:

$$\hat{\mathbf{U}}(t_1, t_0) \text{ kann nur von der Zeit-Differenz } (t_1 - t_0) \text{ abhängen.}$$

setzen

$$\mathbf{U}(t_1 - t_0) := \hat{\mathbf{U}}(t_1, t_0)$$

und erhalten so

- |     |  |                    |
|-----|--|--------------------|
| (0) | $\mathbf{U}^+(t)\mathbf{U}(t) = \mathbf{1}$              | (Isometrie)        |
| (1) | $\mathbf{U}(t_2)\mathbf{U}(t_1) = \mathbf{U}(t_1 + t_2)$ | (Gruppengesetz)    |
| (2) | $\mathbf{U}(0) = \mathbf{1}$                             | (Einheitsselement) |
| (3) | $\mathbf{U}^{-1}(t) = \mathbf{U}(-t)$                    | (Inverses Element) |

Außerdem gilt für die Transformationen  $\mathbf{U}$  – wie für jedes Operatorprodukt –

$$(4) \quad \mathbf{U}(t_3) [\mathbf{U}(t_2) \mathbf{U}(t_1)] = [\mathbf{U}(t_3) \mathbf{U}(t_2)] \mathbf{U}(t_1) \quad (\text{Assoziativgesetz})$$

Die Zeitentwicklungsoperatoren  $\mathbf{U}(t)$  bilden also eine *Gruppe* die offenbar isomorph ist zur Gruppe der *Addition der reellen Zahlen*, welche wiederum isomorph ist zur Gruppe der Translationen längs einer reellen Achse.

Sind die  $\mathbf{U}(t)$  auch *unitär*? Bisher hatten wir nur die Isometrie  $\mathbf{U}^+\mathbf{U} = \mathbf{1}$  gezeigt, nicht aber auch das umgekehrte  $\mathbf{U}\mathbf{U}^+ = \mathbf{1}$ . Das aber ist aufgrund der Gruppenstruktur der Fall:

$$\begin{aligned} \mathbf{1} & \stackrel{2}{=} \mathbf{U}(0) \\ & \stackrel{1}{=} \mathbf{U}(t) \mathbf{U}(-t) = \mathbf{U}(t) [\mathbf{U}^+(t) \mathbf{U}(t)] \mathbf{U}(-t) \\ & \stackrel{4}{=} [\mathbf{U}(t) \mathbf{U}^+(t)] [\mathbf{U}(t) \mathbf{U}(-t)] \\ & \stackrel{3}{=} [\mathbf{U}(t) \mathbf{U}^+(t)] \mathbf{U}(t) \mathbf{U}^{-1}(t) \\ & = \mathbf{U}(t) \mathbf{U}^+(t) \end{aligned} \quad \text{q.e.d.}$$

[Um deutlich zu machen, wie hier *alle vier* Gruppeneigenschaften in den Beweis eingehen, ist bei jeder Gleichsetzung angegeben, aufgrund welcher Gruppeneigenschaft sie erfolgt.]

Wir haben also gefunden:

Die Operatoren  $\mathbf{U}(t)$  bilden eine (treue) *unitäre Darstellung* der Zeit-Translationen.

## 1.2 Schrödinger-Gleichung

Wie kann man  $\mathbf{U}(t)$  näher bestimmen? Dazu leiten wir eine Differentialgleichung her, der  $\mathbf{U}(t)$  genügen muss.

Es ist [Beachte das Gruppengesetz!]

$$\frac{d\mathbf{U}}{dt} := \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{U}(t + \Delta t) - \mathbf{U}(t)}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{U}(\Delta t) \cdot \mathbf{U}(t) - \mathbf{U}(t)}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\mathbf{U}(\Delta t) - \mathbb{1}}{\Delta t} \cdot \mathbf{U}(t) \quad ;$$

Entwicklung von  $\mathbf{U}(\Delta t)$  in eine Taylor-Reihe ergibt

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(\Delta t) &= \mathbf{U}(0) - i\mathbf{\Omega} \cdot \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ &= \mathbb{1} - i\mathbf{\Omega} \cdot \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad , \end{aligned}$$

mit einem noch zu bestimmenden Operator  $\mathbf{\Omega}$ .

Damit  $\mathbf{U}$  unitär bleibt, muss der Entwicklungskoeffizient 1.Ordnung,  $\mathbf{\Omega}$ , *Hermite-sch*<sup>2</sup> sein. Wir haben so als dynamische Bewegungsgleichung des Systems die Gleichung gefunden

$$\boxed{\frac{d\mathbf{U}}{dt} = -i \cdot \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{U}}$$

gefunden, mit der – zunächst formalen – Lösung

$$\mathbf{U}(t) = \mathbf{U}(t_0) \cdot e^{-i\mathbf{\Omega}(t-t_0)}$$

Man beachte, dass aufgrund der ganzen Konstruktion  $\mathbf{\Omega}$  (als Entwicklungskoeffizient der Taylorreihe) *zeitunabhängig* ist.

▷ **Übung:** In welcher physikalischen Grundannahme/an welcher Stelle der beweisführung ist diese Zeitunabhängigkeit versteckt?

Der Zeitentwicklungs-Operator  $\mathbf{\Omega}$  hat die Dimension einer *Frequenz*. Um seine physikalische Bedeutung zu klären, berechnen wir die Zeitabhängigkeit des Erwartungswerts einer beliebigen Observablen  $\mathbf{A}$  in einem vorgegebenen Zustand  $|\psi(t)\rangle$ <sup>3</sup>:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \mathbf{A} | \psi(t) \rangle &= \frac{d}{dt} \langle \psi(t_0) | \mathbf{U}^\dagger(t-t_0) \mathbf{A} \mathbf{U}(t-t_0) | \psi(t_0) \rangle \\ &= \left\langle \psi(t_0) \left| \frac{d\mathbf{U}^\dagger(t-t_0)}{dt} \mathbf{A} \mathbf{U}(t-t_0) \right| \psi(t_0) \right\rangle \\ &\quad + \left\langle \psi(t_0) \left| \mathbf{U}^\dagger(t-t_0) \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{U}(t-t_0) \right| \psi(t_0) \right\rangle \\ &\quad + \left\langle \psi(t_0) \left| \mathbf{U}^\dagger(t-t_0) \mathbf{A} \frac{d\mathbf{U}(t-t_0)}{dt} \right| \psi(t_0) \right\rangle \\ &= +i \langle \psi(t_0) | \mathbf{U}^\dagger(t-t_0) \mathbf{\Omega} \mathbf{A} \mathbf{U}(t-t_0) | \psi(t_0) \rangle \\ &\quad + \left\langle \psi(t_0) \left| \mathbf{U}^\dagger(t-t_0) \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \mathbf{U}(t-t_0) \right| \psi(t_0) \right\rangle \\ &\quad -i \langle \psi(t_0) | \mathbf{U}^\dagger(t-t_0) \mathbf{A} \mathbf{\Omega} \mathbf{U}(t-t_0) | \psi(t_0) \rangle \end{aligned}$$

<sup>2</sup> Genau um das zu erreichen, ist in der Definition von  $\mathbf{\Omega}$  – d.h. in der Taylorentwicklung von  $\mathbf{U}(\Delta t)$  – der Faktor  $i$  herausgezogen.

Das Vorzeichen des Faktors ist im Prinzip willkürlich: wie die klassische Mechanik ist auch die Quantenmechanik symmetrisch gegenüber der Vertauschung von Vergangenheit und Zukunft. Die hier gewählte Vorzeichenkonvention ist die in der Quantenmechanik universell übliche. Vgl. hierzu auch die Bemerkung am Schluss von Abschn. 2.2.

<sup>3</sup>Beachte in der Rechnung  $\mathbf{\Omega}^\dagger = \mathbf{\Omega}$  und  $\mathbf{\Omega} \mathbf{U} = \mathbf{U} \mathbf{\Omega}$  (aber *nicht notwendig*  $\mathbf{A} \mathbf{U} = \mathbf{U} \mathbf{A}$ ).

$$\begin{aligned}
&= +i \langle \psi(t) | \boldsymbol{\Omega} \mathbf{A} | \psi(t) \rangle + \left\langle \psi(t) \left| \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right| \psi(t) \right\rangle - i \langle \psi(t) | \mathbf{A} \boldsymbol{\Omega} | \psi(t) \rangle \\
&= \langle \psi(t) | -i(\mathbf{A} \boldsymbol{\Omega} - \boldsymbol{\Omega} \mathbf{A}) | \psi(t) \rangle + \frac{\partial \langle \mathbf{A} \rangle_t}{\partial t} \quad ,
\end{aligned}$$

also schließlich

$$\frac{d \langle \mathbf{A} \rangle_t}{dt} = -i \langle [ \mathbf{A}, \boldsymbol{\Omega} ] \rangle_t + \frac{\partial \langle \mathbf{A} \rangle_t}{\partial t} \quad .$$

Dies erinnert stark <sup>4</sup> an die Hamilton-sche Bewegungsgleichung

$$\dot{A} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t}$$

der klassischen Mechanik in der Poisson-Klammer-Formulierung. Es war **Heisenberg**, der daraus die Konsequenz gezogen hat, den Zeitentwicklungs-Operator  $\boldsymbol{\Omega}$  – bis auf einen Maßsystem-Faktor – mit dem Operator der *Gesamtenergie* des Systems, dem **Hamilton-Operator**, zu identifizieren.

---

<sup>4</sup>Die Analogie wird noch deutlicher, wenn man sich die algebraische Isomorphie von Poisson-Klammern und Vertauschungsklammern vor Augen führt (Übungsaufgabe!).

Der Maßsystem-Faktor ergibt sich unmittelbar aus der Einstein-schen Relation

$$E = \hbar\omega \quad ;$$

man hat also

$$\mathbf{H} \equiv \hbar \cdot \boldsymbol{\Omega} \quad .$$

Damit haben wir schließlich als dynamische Bewegungsgleichung des Systems die *Schrödinger-Gleichung*<sup>5</sup>

$$\frac{d}{dt} \mathbf{U}(t) = -\frac{i}{\hbar} \cdot \mathbf{H} \cdot U(t)$$

bzw.

$$\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \cdot \mathbf{H} |\psi(t)\rangle$$

mit der Lösung

$$|\psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t - t_0) |\psi(t_0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle$$

## 2 Orts-Translationen

Wir betrachten jetzt einen Zustand  $|\psi(t)_{(\vec{r}_0)}\rangle$ ; dabei steht der Index  $(\vec{r}_0)$  dafür, dass es sich um einen quantenmechanischen Zustand handelt, der – in irgendeiner Weise – durch die *Ortskoordinate*  $\vec{r}_0$  charakterisiert ist (Genauerer hierzu s. Abschn. 2.1).

Wie kann man dann denjenigen (eindeutig definierten!) Zustand  $|\psi(t)_{(\vec{r})}\rangle$  beschreiben, der gegenüber  $|\psi(t)_{(\vec{r}_0)}\rangle$  um die Strecke  $(\vec{r} - \vec{r}_0)$  *verschoben* ist, in allen anderen Eigenschaften aber mit ihm übereinstimmt? Zur Beantwortung dieser Frage kann man weitgehend analog zu dem Verfahren vorgehen, das wir im vorigen Abschnitt bei der Analyse der Zeitentwicklung angewendet haben.

Zunächst muss wegen der Wahrscheinlichkeitserhaltung wie oben der Zusammenhang zwischen beiden Zustandsvektoren durch einen *unitären Operator* vermittelt sein. Weiter bilden offenbar auch die Ortstranslationen eine Gruppe: in 1 Dimension ist das wieder gerade die Gruppe der reellen Zahlen bzgl. der Addition, in 3 Dimensionen einfach die Additionsgruppe der (reellen) Dreivektoren. Wir können also ansetzen<sup>6</sup>

$$|\psi(t)_{(\vec{r})}\rangle = e^{-i\vec{\mathbf{K}} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_0)} |\psi(t)_{(\vec{r}_0)}\rangle \quad ;$$

hierbei ist  $\vec{\mathbf{K}}$  ein noch näher zu bestimmender Hermite-scher Vektoroperator;  $\vec{\mathbf{K}}$  hat offenbar die Dimension eines *Wellenvektors*. Um seine physikalische Bedeutung zu klären<sup>7</sup>, müssen wir allerdings noch etwas weiter ausholen.

<sup>5</sup>Schrödinger selbst ist auf einem zunächst gänzlich anderen Weg auf diese nach ihm benannte Gleichung gestoßen.

<sup>6</sup>Wegen des auch hier zunächst willkürlichen Vorzeichens im Exponenten vgl. die Bemerkung am Schluss von Abschn. 2.2.

<sup>7</sup>Natürlich rät man aus der Analogie mit der klassischen Mechanik schon an dieser Stelle, worauf das hinausläuft:  $\vec{\mathbf{K}}$  wird (bis auf die Maßsystemkonstante  $\hbar$ ) der *Impulsoperator*.

## 2.1 Ortsdarstellung

Die physikalische Anschauung legt nahe, zur Beschreibung eines physikalischen Systems, das sich an einem bestimmten Ort befinden kann (z.B. ein Massenpunkt oder ein Teilchen), so etwas wie eine "Ortsvariable" zu benutzen<sup>8</sup>. Entsprechend den allgemeinen Grundsätzen der Quantenmechanik werden wir also als "Observable" einen Hermite-schen Operator  $\mathbf{Q}$  einführen, dessen Eigenwerte dann die möglichen Messwerte für das Ergebnis einer Ortsmessung sein müssen:

$$\mathbf{Q}|x\rangle = x \cdot |x\rangle \quad .$$

Sind die Eigenwerte  $x$  und  $x'$  verschieden (also  $x' \neq x$ ), so sind die zugehörigen Eigenvektoren orthogonal:

$$\langle x'|x\rangle = \delta_{xx'} \quad .$$

Das ist alles nichts Neues (wobei allerdings dem Kronecker-Symbol  $\delta_{xx'}$  für reelle Indices erst noch eine geeignete mathematische Bedeutung<sup>9</sup> gegeben werden müsste).

Da es physikalisch keinen Grund gibt, (zumindest für ein freies Teilchen) nicht jeden möglichen Ort auch als möglichen Messwert anzusehen, müssen wir von  $\mathbf{Q}$  fordern, dass sein Eigenwertspektrum die gesamte reelle Achse umfasst. Das bedeutet, dass die Vollständigkeitsrelation der Eigenvektoren von  $\mathbf{Q}$  gegenüber der üblichen Formulierung etwas modifiziert werden muss: in der für diskrete Eigenwerte gültigen Formel

$$\sum_{\text{alle } n} |n\rangle\langle n| = \mathbf{1}$$

ist der diskrete Index  $n$  durch  $x$ , die Summe offenbar durch ein Integral zu ersetzen:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle\langle x| = \mathbf{1} \quad .$$

Physikalisch mag diese Konstruktion ganz einleuchtend sein; bei einer sorgfältigen mathematischen Formulierung ergeben sich jedoch einige grundsätzliche Schwierigkeiten: z.B. kann man zeigen, dass es solche Eigenvektoren im strengen Sinne überhaupt nicht geben kann.

### Exkurs: die Dirac-sche $\delta$ -Funktion

Dirac hat alle diese Schwierigkeiten mit der Schaffung eines einzigen neuen mathematischen Begriffs überwunden, der sogenannten "Dirac-schen  $\delta$ -Funktion"  $\delta(x)$ . Dies ist eine genial einfache, im Grunde anschauliche Verallgemeinerung des Kronecker-Symbols  $\delta_{ik}$  auf 'kontinuierliche Indices'. Dazu betrachten wir dessen beide wichtigsten Eigenschaften:

- (a)  $\delta_{ik} = 0$  für  $i \neq k$
- (b)  $\sum_{\text{alle } k} f(k) \cdot \delta_{ik} = f(i)$  ,

[Stattdessen könnte man auch

- (a)  $\delta_{(i-k)} = 0$  für  $i \neq k$
- (b)  $\sum_{\text{alle } k} f(k) \cdot \delta_{(i-k)} = f(i)$

schreiben, was auf dasselbe hinausläuft.]

Diese beiden Gleichungen verallgemeinert Dirac nun in einer genial-burschikosen Weise auf eine kontinuierliche Variable, in dem er eine neue "Funktion"  $\delta(x)$  postuliert mit den Eigenschaften

- (i)  $\delta(x) := 0$  für  $x \neq 0$  ,
- (ii)  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \cdot \delta(x - x_0) := f(x_0)$  .

<sup>8</sup>Der Einfachheit halber betrachten wir zunächst nur 1 räumliche Dimension. Die Verallgemeinerung auf 3 räumliche Dimensionen macht keine zusätzlichen Schwierigkeiten.

<sup>9</sup>Wem die  $\delta$ -Funktionen (mathematisch genauer:  $\delta$ -Distributionen) genügend geläufig sind – das sind hoffentlich alle! – kann diesen Abschnitt getrost übergehen.

Mit gewöhnlichen Funktionen geht sowas natürlich nicht, denn das Integral einer Funktion, die nur für ein einziges  $x$  von Null verschieden ist, verschwindet immer (selbst wenn man  $\delta(0)$  noch so sehr  $\rightarrow \infty$  gehen lässt). Aber als limes einer extrem scharf gebündelten (aber dennoch immer auf 1 normierten) Funktion – z.B. einer Gauß-Verteilung mit verschwindender Streuung – ist das eine für Physiker sehr anschaulich vorstellbare und vor allem rechnerisch höchst brauchbare ‘Nicht-Funktion’<sup>10</sup>.

Die Eigenschaften der  $\delta$ -Funktion ergeben ziemlich unmittelbar aus deren Definition. Einige für das praktische Rechnen mit  $\delta$ -Funktionen besonders wichtige sind (ohne Beweis) in der folgenden Tabelle aufgeführt:

$$\begin{aligned} \delta(-x) &= \delta(x) \\ \delta(cx) &= \frac{1}{|c|} \delta(x) \\ x\delta(x) &= 0 \\ f(x)\delta(x-x_0) &= f(x_0)\delta(x-x_0) \\ \delta(x^2-c^2) &= \frac{1}{2|c|} \{\delta(x+c) + \delta(x-c)\} \\ \delta(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ikx} \end{aligned}$$

Man kann – nach einiger Eingewöhnung – mit der Dirac-schen  $\delta$ -Funktion (fast) genauso gut rechnen wie mit einer gewöhnlichen Funktion; man muss sich lediglich vorstellen, man hätte (z.B.) eine Gauß-Funktion mit *sehr kleiner*, aber immer noch endlicher Streuung.

Aus dieser Bemerkung folgt auch die einzige wirkliche Vorsichtsmaßregel, die man zu beachten hat:

*Formeln, die  $\delta$ -Funktionen enthalten, sind immer nur als Zwischenergebnisse anzusehen; damit Endergebnisse einen wohldefinierten Sinn haben, muss über alle  $\delta$ -Funktionen integriert worden sein.*

Mit der Dirac-schen  $\delta$ -Funktion können wir nun die Ortseigenzustände in konsistenter Weise quasi normieren: “auf die  $\delta$ -Funktion normieren”, wie man sagt, und erhalten so die folgenden Formeln für die Eigenzustände des Ortsoperators:

$$\begin{aligned} \langle x'|x \rangle &= \delta(x' - x) && \text{(Orthogonalität)} \\ \int dx |x\rangle\langle x| &= \mathbf{1} && \text{(Vollständigkeit)} \\ \mathbf{Q} &= \int dx x \cdot |x\rangle\langle x| && \text{(Spektraldarstellung von } \mathbf{Q} \text{)} \end{aligned}$$

Das ist alles ganz analog zum Fall eines diskreten Spektrums, für den wir hatten

$$\begin{aligned} \langle n'|n \rangle &= \delta_{n'n} && \text{(Orthogonalität)} \\ \sum_n |n\rangle\langle n| &= \mathbf{1} && \text{(Vollständigkeit)} \\ \mathbf{A} &= \sum_n a_n \cdot |n\rangle\langle n| && \text{(Spektraldarstellung von } \mathbf{Q} \text{)} \end{aligned}$$

Ähnliches gilt für andere Observable mit kontinuierlichem Spektrum<sup>11</sup>.

<sup>10</sup>Nachdem Physiker diese Dirac-sche “ $\delta$ -Funktion” bereits jahrelang – obwohl es sie mathematisch eigentlich garnicht geben konnte! – mit großem Erfolg benutzt hatten, haben Mathematiker auch den zugrundeliegenden mathematischen Sachverhalt durch Schaffung eines neuen Begriffs samt zugehöriger Theorie aufgeklärt: es handelt sich um eine (Schwarz-sche) *Distribution*; solche Objekte sind Gegenstand der *Distributionstheorie*.

Die Details dieser Theorie sind aber für Physiker nicht sonderlich von Interesse.

<sup>11</sup>Es kommen auch Fälle vor, in den das Spektrum eines Operators sowohl diskrete als auch kontinuierliche Teile hat (z.B. Atome, bei denen die gebundenen Zustände ein diskretes, die Ionisationszustände ein kontinuierliches Spektrum haben). Um in solchen Fällen die Notation nicht unnötig zu komplizieren, schreiben manche Autoren für Summe bzw. Integral einfach  $\sum_f$  – man suche sich aus, was im konkreten Fall gerade richtig ist!

Wir sind nur endlich in der Lage, die folgende praktisch wichtige Frage zu beantworten: Ein bestimmtes quantenmechanisches System sei im Zustand  $|\psi(t)\rangle$  vorgegeben. *Was ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das System am Ort  $x$  vorzufinden?* Genauer: da die Ortskoordinate kontinuierlich ist, müssen wir nach der Wahrscheinlichkeits*dichte* fragen, oder: was ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das System an einem Ort zwischen  $x$  und  $x + dx$  vorzufinden?

Die Antwort ist, nach den allgemeinen Regeln der Quantenmechanik:

$$\wp(x)dx = |\langle x|\psi(t)\rangle|^2 \quad .$$

Die Wahrscheinlichkeits*amplitude* (genau: Wahrscheinlichkeitsamplitudend*ichte*)  $\langle x|\psi(t)\rangle$  ist für jedes  $x$  eine bestimmte komplexe Zahl, insgesamt also eine komplexwertige *Funktion*. Sie wird oft in der gewöhnlichen Form für Funktionen

$$\psi(t)(x) := \langle x|\psi(t)\rangle$$

geschrieben und heisst dann ‘Zustandsfunktion in der Ortsdarstellung’ oder einfach ‘Wellenfunktion’, ihr Absolutquadrat wird oft – sehr anschaulich – ‘Aufenthaltswahrscheinlichkeit’ genannt.

Man sieht jetzt auch, auf was in diesem Fall die oben angemerkte Vorsichtsmaßregel hinausläuft. Für die Wahrscheinlichkeitsinterpretation muss der Zustand  $|\psi(t)\rangle$  ja auf 1 normiert sein:  $\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$ . Mit der Vollständigkeit des Systems der Ortseigenzustände (‘Einschieben der Eins’) erhalten wir

$$\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle = \int dx \langle \psi(t)|x\rangle \langle x|\psi(t)\rangle = \int dx |\psi(t)(x)|^2 \quad ,$$

das Integral des Absolutquadrats von  $\psi(t)(x)$  muss also wegen der Normierbarkeit jedenfalls  $< \infty$  sein — man sagt:  $\psi(t) * x$  muss ‘quadratintegrabel’ sein. Das bedeutet:  $\psi(t)(x)$  muss auf jeden Fall im Unendlichen verschwinden — es gibt physikalisch keine unendlich ausgedehnten Objekte!

## 2.2 Translationsoperator

Wir kommen jetzt zurück auf die am Anfang von Abschn. 2 gestellte Frage nach der physikalischen Bedeutung des Orts-Translationsoperators  $\vec{\mathbf{K}}$ .

Wie sieht  $\vec{\mathbf{K}}$  in der Ortsdarstellung aus? Wir betrachten dazu wie oben einen Zustand  $|\psi(t)_{(\vec{r}_0)}\rangle$ <sup>12</sup>. Zunächst macht man sich klar, dass

$$\langle \vec{r}|\psi(t)_{(\vec{r}_0-\vec{a})}\rangle = \langle (\vec{r} + \vec{a})|\psi(t)_{(\vec{r}_0)}\rangle =: \psi(t)_{(\vec{r}_0)}(\vec{r} + \vec{a})$$

ist, denn eine ‘aktive’ Verschiebung des *Zustands* um die Strecke  $-\vec{a}$  (linke Seite der Gleichung) ist physikalisch völlig äquivalent zur ‘passiven’ Verschiebung des *Koordinatenursprungs* um  $+\vec{a}$  (rechte Seite). Man findet also generell

$$\psi(t)(\vec{r} + \vec{a}) = \langle \vec{r}|e^{-i\vec{\mathbf{K}}\cdot(-\vec{a})}|\psi(t)\rangle = \langle \vec{r}|e^{+i\vec{\mathbf{K}}\cdot\vec{a}}|\psi(t)\rangle \quad .$$

Entwickeln wir nun diese Gleichung auf beiden Seiten bis zur 1.Ordnung in  $\vec{a}$ . Links ergibt sich

$$\psi(t)(\vec{r} + \vec{a}) = \psi(t)(\vec{r}) + \sum_{m=1}^3 a_m \frac{\partial}{\partial x_m} \psi(t)(\vec{r}) + \mathcal{O}(a^2) \quad ;$$

rechts finden wir

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}|e^{+i\vec{\mathbf{K}}\cdot\vec{a}}|\psi(t)\rangle &= \left\langle \vec{r} \left| \mathbb{1} + i \sum_{m=1}^3 \mathbf{K}_m \cdot a_m + \mathcal{O}(a^2) \right| \psi(t) \right\rangle \\ &= \psi(t)(\vec{r}) + i \sum_{m=1}^3 a_m \langle \vec{r}|\mathbf{K}_m|\psi(t)\rangle + \mathcal{O}(a^2) \quad . \end{aligned}$$

<sup>12</sup>Was man sich darunter vorzustellen hat, sollte jetzt klar sein — gemeint ist eine (normierbare) *Überlagerung* von Orts-Eigenfunktionen, die um den Ort  $\vec{r}_0$  (beliebig scharf!) gebündelt sind. Die zugehörige Wellenfunktion  $\psi(t)_{(\vec{r}_0)}(\vec{r}) = \langle \vec{r}|\psi(t)_{(\vec{r}_0)}\rangle$  könnte z.B. eine um den Punkt  $\vec{r}_0$  konzentrierte Gauß-Funktion sein.



Aus dem Vergleich der Terme 1. Ordnung liest man ab:

$$\langle \vec{r} | \vec{\mathbf{K}} | \psi(t) \rangle = -i \nabla \psi(t)(\vec{r})$$

Wir haben so den (selbstadjungierten) Orts-Translationsoperator  $\vec{\mathbf{K}}$  in der Ortsdarstellung konstruiert.

Um seine physikalische Bedeutung zu beleuchten, betrachten wir seine *Eigenwertgleichung*:

$$\vec{\mathbf{K}} | \vec{k} \rangle = \vec{k} \cdot | \vec{k} \rangle$$

oder, wieder in der Ortsdarstellung,

$$-i \nabla \psi(t)_{\vec{k}}(\vec{r}) = k \cdot \psi(t)_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad .$$

Die Lösungen (Eigenfunktionen) sind einfach ebene Wellen:

$$\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \psi(t)_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad ,$$

wobei wir gleich “auf die  $\delta$ -Funktion” normiert haben <sup>13</sup>.

Die *zeitliche* Entwicklung eines solchen Eigenzustands ist nach Abschn. 1 gegeben durch

$$\psi(t)_{\vec{k}}(t; \vec{r}) = e^{-i\Omega t} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H} t} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad .$$

Vergleicht man das z.B. mit den freien Lösungen der Vakuum-Maxwellgleichungen  $e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$ , so erkennt man die Analogie:

	Translationsoperator	physikalische Größe	Observable
Zeit	$\Omega$	Frequenz Energie	$\mathbf{H} := \hbar \cdot \Omega$
Raum	$\vec{\mathbf{K}}$	Wellenvektor Impuls	$\vec{\mathbf{P}} := \hbar \cdot \vec{\mathbf{K}}$

Wir haben also mit der Betrachtung der Orts-Translationen den *Impulsoperator* in der Ortsdarstellung gefunden <sup>14</sup>:

$$\langle \vec{r} | \vec{\mathbf{P}} | \psi(t) \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(t)(\vec{r})$$

<sup>13</sup> Diese Eigenfunktionen sind natürlich, ebenso wie die in Abschn. 2.1 ausführlich diskutierten Orts-Eigenzustände, Idealisierungen. Physikalisch müsste man normierbare *Überlagerungen* von ebenen Wellen betrachten, die um einen mittleren Wellenvektor (beliebig scharf!) gebündelt sind — völlig analog zu den in der vorigen Fußnote beschriebenen Überlagerungen von Ortseigenfunktionen.

Solche normierten Überlagerungen nennt man oft auch “Wellenpakete”.

<sup>14</sup>Der Ortsoperator in der Ortsdarstellung ist – wovon man sich sofort überzeugt – natürlich einfach die Multiplikation der Wellenfunktion mit der Ortskoordinate:

$$\langle \vec{r} | \vec{\mathbf{Q}} | \psi(t) \rangle = \vec{r} \cdot \psi(t)(\vec{r}) \quad .$$

Für ein freies Teilchen haben wir *klassisch* und *nichtrelativistisch* den Zusammenhang zwischen Energie und Impuls (“Dispersionsrelation”)

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

und entsprechend *quantenmechanisch* (‘Quantisierung’)

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad ;$$

man findet also, dass (für ein *freies* Teilchen) die Impuls-Eigenfunktionen automatisch auch Eigenfunktionen der *Energie* sind:

$$\psi(t)_{\vec{k}}(t; \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})} \quad \text{mit} \quad E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad .$$

Die Analogie zu den freien Lösungen der Vakuum-Maxwellgleichungen ist noch aus einem anderen Grunde bemerkenswert. In der Quantenmechanik (wie schon in der klassischen Mechanik!) ist nämlich die *Zeit* ( $t$ ) ein reiner *Parameter* der dynamischen Entwicklung des Systems<sup>15</sup>; der *Ort* ( $\vec{r}$ ) dagegen ist eine messbare Größe: eine *Observable*. Quantenmechanisch wird also der Ort durch einen *Operator* dargestellt, während die Zeit ein reiner Parameter bleibt — **es gibt keinen ‘Zeit-Operator’** (und schon gar keinen zugehörigen Zeit-Eigenwert, das hat schon begrifflich überhaupt keinen Sinn).

Der erkenntnistheoretisch fundamentale Unterschied zwischen Zeit und Raum, der sich hier ganz direkt manifestiert, wird nun allerdings in der Relativitätstheorie *aufgehoben*: Zeit und Raum erscheinen als im Prinzip gleichwertige Koordinaten in ein und demselben physikalischen vierdimensionalen Raum, der Minkowski-schen ‘Raum-Zeit’. Schon aus diesem Grunde machte, historisch gesehen, die Entwicklung einer *relativistischen* Quantenmechanik ganz erhebliche Schwierigkeiten, die erst mit der *Quantenelektrodynamik* (u.a. durch Feynman) bewältigt wurden.

In diesem Zusammenhang ist auch die Wahl der an sich willkürlichen Vorzeichen (vgl. die entsprechenden Fußnoten auf den S. 3 und 5) in der Definition der beiden Translationsoperatoren  $e^{-i\Omega t}$  und  $e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}}$  zu sehen: unsere Wahl sorgt für Konsistenz in der Beschreibung elektrodynamischer und quantenmechanischer Wellen.

### 3 Schlussbemerkungen

Das Verfahren, das wir in diesem Skript für die Beschreibung von Zeit- und Orts-Translationen angewendet haben, ist ganz offensichtlich verallgemeinerbar und erinnert stark an die Beschreibung (infinitesimaler) kanonischer Transformationen in der klassischen (Hamilton-schen) Mechanik. Dort beschreibt man solche Transformationen in der allgemeinen Form

$$\begin{aligned} q_k &\mapsto \tilde{q}_k := q_k + \delta\lambda \cdot \frac{\partial}{\partial p_k} G(\vec{q}, \vec{p}) + \mathcal{O}(\delta\lambda^2) \\ p_k &\mapsto \tilde{p}_k := p_k - \delta\lambda \cdot \frac{\partial}{\partial q_k} G(\vec{q}, \vec{p}) + \mathcal{O}(\delta\lambda^2) \quad ; \end{aligned}$$

die Funktion  $G(\vec{q}, \vec{p})$  wird die *Erzeugende* der betreffenden kanonischen Transformation genannt. Beispiele sind<sup>16</sup>:

- die *Impulse*  $p_k$  erzeugen *Translationen* der *Koordinaten*  $q_k$  [setze  $\delta\lambda = \delta q_k$ ]:

$$\tilde{q}_k = q_k + \delta q_k + \mathcal{O}(\delta q_k^2) \quad ,$$

<sup>15</sup>Es gibt keine originären Zeitmessungen! Alle sogenannten ‘Zeitmessungen’ sind eigentlich *Frequenz*-Messungen, und das heißt: Uhrenvergleiche; Uhren aber sind physikalische Systeme, die (relativ zueinander) *regelmäßige Bewegungsabläufe* haben.

<sup>16</sup>Man rechne das explizit nach!

- die *Koordinaten*  $q_k$  erzeugen “*Translationen*” der *Impulse*  $p_k$  [setze  $\delta\lambda = -\delta p_k$ ] :

$$\tilde{p}_k = p_k + \delta p_k + \mathcal{O}(\delta p_k^2)$$

und – in unserem Zusammenhang besonders bedeutsam –

- die *Hamilton-Funktion*  $H$  erzeugt die Dynamik selbst [setze  $\delta\lambda = \delta t$ ] :

$$\begin{aligned}\tilde{q}_k &= q_k + \delta t \cdot \dot{q}_k + \mathcal{O}(\delta t^2) \\ \tilde{p}_k &= p_k + \delta t \cdot \dot{p}_k + \mathcal{O}(\delta t^2) \quad .\end{aligned}$$

Die Erzeugende haben also meist eine unmittelbar physikalische Bedeutung!

Man sieht nun die Analogie: in der Quantenmechanik haben wir statt kanonischer Transformationen *unitäre* Transformationen des Hilbertraums; sie können geschrieben werden in der Form

$$\mathbf{U} = e^{-i\lambda\mathbf{X}} \quad ,$$

wobei die ‘Erzeugende’  $\mathbf{X}$  ein (selbstadjungierter) *Operator* ist, dem meist eine unmittelbar physikalische Bedeutung zukommt.