

Theoretische Physik

Klassische Mechanik,  
Spezielle  
Relativitätstheorie,  
Quantenmechanik

Dozent: Prof. Dr. Reinhart Kögerler

WS 2003/04, SS 2004

Stand: November 2005

**Klassische Mechanik,  
Spezielle Relativitätstheorie,  
Quantenmechanik**

Prof. Dr. Reinhart Kögerler

**Klassische Mechanik,  
Spezielle Relativitätstheorie,  
Quantenmechanik**

Theoretische Physik  
Vorlesungsmitschrift

Dozent: Prof. Dr. Reinhart Kögerler.

WS 2003/04, SS 2004

Fakultät für Physik,  
Universität Bielefeld,  
Germany.

<http://www.physik.uni-bielefeld.de>

<http://www.uni-bielefeld.de>

Skript: Dr. Benjamin Jurke, [mail@benjaminjurke.net](mailto:mail@benjaminjurke.net).

Letzte Änderung: 2. Dezember 2011.

<http://benjaminjurke.net>

*Schriftbild:* Modern Times 11 pt    *Satzsystem:* L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 2<sub>ε</sub> mit A<sub>M</sub>S-L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X, METAFONT, X<sub>Y</sub>-pic

Enthält Literaturangaben und einen Index.

Copyright © 2004 - 2011 Prof. Dr. Reinhart Kögerler, Dr. Benjamin Jurke.

Die Verteilung dieses Dokuments in elektronischer oder gedruckter Form ist gestattet, solange sein Inhalt einschließlich Autoren- und Copyright-Angabe unverändert bleibt und die Verteilung kostenlos erfolgt, abgesehen von einer Gebühr für den Datenträger, den Kopiervorgang, etc.

# Inhaltsverzeichnis

<b>I. Klassische Mechanik</b>	<b>1</b>
<b>1. Klassische Newtonsche Mechanik</b>	<b>2</b>
1.1. Die Newtonschen Axiome . . . . .	2
1.2. Einige einfache Kraftgesetze . . . . .	4
1.2.1. Bewegung im Gravitationsfeld der Erde . . . . .	4
1.2.2. Bewegung im Gravitationsfeld der Erde mit Luftreibung . . . . .	5
1.2.3. Der harmonische Oszillator ohne Reibung . . . . .	8
1.2.4. Der harmonische Oszillator mit Stokes-Reibung . . . . .	10
1.2.5. Der periodisch angeregte Oszillator . . . . .	11
1.3. Abgeleitete Gesetze der Mechanik eines Massepunkts . . . . .	11
1.3.1. Arbeit und kinetische Energie . . . . .	11
1.3.2. Potentiale . . . . .	14
1.3.3. Beispiele für konservative Kräfte . . . . .	16
1.3.4. Der Energiesatz für einen Massepunkt . . . . .	17
1.3.5. Impulssatz für ein Teilchen . . . . .	18
1.3.6. Drehimpuls . . . . .	18
1.3.7. Bewegungsgesetze für ein System von Massepunkten . . . . .	18
1.4. Bewegung im Zentralfeld und das Keplerproblem . . . . .	21
1.5. Bewegung in beschleunigten Bezugssystemen . . . . .	25
1.5.1. Beziehungen zu einem Inertialsystem . . . . .	25
1.5.2. Bedeutung von $\vec{\omega}$ . . . . .	27
1.5.3. Das Newtonsche Gesetz in beliebigen Bezugssystemen . . . . .	27
1.5.4. Typen von Scheinkräften . . . . .	28
<b>2. Der Lagrange-Formalismus</b>	<b>30</b>
2.1. Zwangsbedingungen für verallgemeinerte Koordinaten . . . . .	30
2.1.1. Arten von Zwangsbedingungen . . . . .	30
2.1.2. Holonome Zwangsbedingungen . . . . .	30
2.2. Das D'Alembertsche Prinzip und Lagrange-Gleichungen . . . . .	31
2.2.1. Virtuelle Verrückungen und das D'Alembertsche Prinzip . . . . .	31
2.2.2. Lagrange-Funktion und -Gleichung . . . . .	33
2.3. Eigenschaften der Lagrange-Gleichung bzw. -Funktion . . . . .	35
2.3.1. Kovarianz unter Punkttransformation . . . . .	35
2.3.2. Eichinvarianz der Lagrange-Funktion . . . . .	36
2.4. Anwendungsbeispiel: Sphärisches Pendel . . . . .	37
2.5. Das Hamiltonsche Prinzip der kleinsten Wirkung . . . . .	38
2.5.1. Variationsrechnung in einer Funktion . . . . .	39
2.5.2. Variationsrechnung für mehrere Funktionen . . . . .	40

2.5.3.	Das Prinzip der kleinsten Wirkung . . . . .	41
<b>3.</b>	<b>Symmetrien und Erhaltungssätze</b>	<b>42</b>
3.1.	Allgemeines über Symmetrietransformationen . . . . .	42
3.2.	Das Noether-Theorem . . . . .	43
3.3.	Die zehn fundamentalen Erhaltungsgrößen . . . . .	44
3.3.1.	Räumliche Translations-Invarianz: Impuls . . . . .	45
3.3.2.	Räumliche Rotations-Invarianz: Drehimpuls . . . . .	46
3.3.3.	Spezielle Galilei-Invarianz: Schwerpunktsbewegung . . . . .	46
3.3.4.	Zeitliche Translationen: Energie . . . . .	47
3.3.5.	Übersicht . . . . .	48
<b>4.</b>	<b>Der Hamilton-Formalismus</b>	<b>49</b>
4.1.	Legendre-Transformationen . . . . .	49
4.2.	Die Hamiltonschen Gleichungen und Bewegungen im Phasenraum . . . . .	51
4.3.	Poisson-Klammern . . . . .	53
4.4.	Kanonische Transformationen . . . . .	54
4.4.1.	Das Problem der Forminvarianz konjugiert kanonischer Impulse . . . . .	54
4.4.2.	Kriterium für Kanonizität einer Transformation . . . . .	56
4.4.3.	Anwendungsbeispiel . . . . .	58
<b>II.</b>	<b>Spezielle Relativitätstheorie</b>	<b>61</b>
<b>5.</b>	<b>Raum und Zeit in der klassischen Physik</b>	<b>62</b>
5.1.	Raum- und Zeitmessungen, Bezugssysteme, Inertialsysteme . . . . .	62
5.2.	Koordinatenwechsel zwischen Inertialsystemen . . . . .	64
5.2.1.	Eindimensionale Herleitung des Transformationsgesetzes . . . . .	64
5.2.2.	Verallgemeinerung auf beliebige Richtungen . . . . .	66
5.2.3.	Spezielle Galilei-Transformationen und die Galilei-Gruppe . . . . .	66
5.2.4.	Absolute Größen unter Galilei-Transformationen . . . . .	67
5.2.5.	Das Relativitätsprinzip der Mechanik . . . . .	68
5.3.	Das allgemeine Relativitätsprinzip der Physik . . . . .	69
5.4.	Lorentz-Transformationen . . . . .	69
5.4.1.	Reine Geschwindigkeits-Transformationen in $x$ -Richtung . . . . .	70
5.4.2.	Notation mittels Vierervektoren, Tensorschreibweise . . . . .	72
5.4.3.	Geschwindigkeits-Transformationen mit beliebiger Relativgeschwindigkeit . . . . .	72
<b>6.</b>	<b>Geometrische Darstellung der Lorentz-Transformation</b>	<b>75</b>
6.1.	Eigenschaften der Lorentz-Transformation . . . . .	75
6.1.1.	Der metrische Tensor . . . . .	75
6.1.2.	Boost-Transformationen in $x$ -Richtung . . . . .	76
6.2.	Geometrische Veranschaulichung der Koordinatenbeziehungen . . . . .	78
6.3.	Physikalische Konsequenzen der Lorentz-Transformation . . . . .	79
6.3.1.	Relativität der Gleichzeitigkeit . . . . .	79
6.3.2.	Kausalstruktur der Raumzeit . . . . .	80
6.3.3.	Längenkontraktion . . . . .	80
6.3.4.	Zeitdilatation . . . . .	81

6.3.5. Eigenzeit . . . . .	81
6.3.6. Geschwindigkeits-Additionstheorem . . . . .	82
<b>7. Lorentz-Vektoren und -Tensoren</b>	<b>84</b>
7.1. Der Minkowski-Raum . . . . .	84
7.1.1. Lorentz-Skalarprodukt und Arten von Vektoren . . . . .	84
7.1.2. Ko- und kontravariante Vierervektoren . . . . .	85
7.1.3. Ableitungen von Funktionen der Vierergrößen . . . . .	86
7.2. Lorentz-Tensoren . . . . .	86
<b>8. Relativistische Punktmechanik</b>	<b>88</b>
8.1. Lorentz-invariante Bewegungsgleichungen . . . . .	88
8.1.1. Verletzung der Forminvarianz in der Newtonschen Theorie . . . . .	88
8.1.2. Vierergeschwindigkeit und Viererimpuls . . . . .	89
8.1.3. Viererbeschleunigung, Minkowski- und Einstein-Kraft . . . . .	90
8.1.4. Relativistisches Transformationsverhalten von Kräfte . . . . .	91
8.2. Mehrteilchensysteme, Stoßprozesse und Viererimpulserhaltung . . . . .	93
 <b>III. Theorie des elektromagnetischen Felds</b>	 <b>95</b>
<b>9. Die Maxwell'schen Gleichungen</b>	<b>96</b>
9.1. Das Coulombsche Gesetz und elektrische Feld . . . . .	96
9.1.1. Ladungen und Coulomb-Gesetz . . . . .	96
9.1.2. Das elektrische Feld . . . . .	97
9.1.3. Beispiele für elektrostatische Felder . . . . .	100
9.1.4. Physikalische Bedeutung des Potentials $\Phi$ . . . . .	101
9.2. Ströme und das Ohmsche Gesetz . . . . .	101
9.2.1. Ströme, Stromdichte und Stromstärke . . . . .	101
9.2.2. Stationäre Ströme . . . . .	102
9.3. Ampère-Gesetz und das magnetische Feld, Lorentz-Kraft . . . . .	103
9.3.1. Detailliertere Messung der Kräfte zwischen stationären Stromkreisen . . . . .	104
9.3.2. Das magnetische Feld und Biot-Savart-Gesetz . . . . .	105
9.3.3. Lorentz-Kraft . . . . .	106
9.3.4. Eigenvektoren des magnetischen Felds . . . . .	106
9.3.5. Anwendungsbeispiele . . . . .	107
9.4. Faradaysches Induktionsgesetz und die Maxwell-Gleichungen . . . . .	110
9.4.1. Das Induktionsgesetz . . . . .	110
9.4.2. Die vollständigen Maxwell'schen Gleichungen der Elektrodynamik . . . . .	111
9.5. Energie und Impuls des elektromagnetischen Feldes . . . . .	113
9.5.1. Der Energiegehalt des elektrischen Feldes . . . . .	113
9.5.2. Die elektromagnetische Energiedichte . . . . .	114
9.5.3. Poynting-Vektor des Energieflusses . . . . .	116
9.5.4. Elektromagnetischer Impuls und Maxwell'scher Spannungstensor . . . . .	116
9.6. Interpretation des elektromagnetischen Felds . . . . .	117
 <b>10. Lösungen der Maxwell-Gleichungen</b>	 <b>118</b>
10.1. Entkopplung der Maxwell-Gleichungen mittels Potentialen . . . . .	118

10.1.1. Potentialformulierung . . . . .	118
10.1.2. Entkopplung . . . . .	119
10.2. Die freie Wellengleichung und ebene Wellen als Lösungen . . . . .	120
10.2.1. Allgemeine Lösung von Wellengleichungen . . . . .	120
10.2.2. Ebene harmonische Wellen . . . . .	122
10.2.3. Freie Wellengleichungen der Felder, elektromagnetische Wellen . . . . .	123
10.2.4. Polarisierung . . . . .	124
10.3. Lösung der inhomogenen Wellengleichung . . . . .	125
10.3.1. Allgemeine inhomogene Wellengleichung und Lösungsverfahren . . . . .	125
10.3.2. Anwendung auf die elektromagnetischen Potentiale . . . . .	127
10.4. Bewegte Punktladungen und Liénard-Wiechert-Potentiale . . . . .	128
10.4.1. Strahlungsfelder . . . . .	128
10.4.2. Abstrahlungsenergie . . . . .	129
10.4.3. Nichtrelativistischer Fall . . . . .	130
10.4.4. Der extremrelativistische Fall . . . . .	131
10.4.5. Gleichförmig geradlinig bewegtes Teilchen . . . . .	131
10.5. Wellenabstahlung einer Dipolnäherung . . . . .	132
<b>11. Elektromagnetische Felder und das Relativitätsprinzip</b>	<b>134</b>
11.1. Lorentz-Kraft und Feld-Transformationsverhalten . . . . .	134
11.2. Die kovarianten Maxwell-Gleichungen . . . . .	136
11.2.1. Transformationsverhalten von Ladungsverteilungen und Stromdichten . . . . .	136
11.2.2. Herleitung der Maxwell-Gleichungen aus dem Relativitätsprinzip . . . . .	137
11.2.3. Entkopplung der Maxwell-Gleichungen durch Potentiale . . . . .	139
11.2.4. Lösung der kovarianten Maxwell-Gleichungen . . . . .	140
<b>IV. Quantenmechanik</b>	<b>143</b>
<b>12. Empirische Notwendigkeit der Strukturen der Quantenmechanik</b>	<b>144</b>
12.1. Einleitung . . . . .	144
12.2. Korpuskularnatur des Lichts . . . . .	145
12.2.1. Der photoelektrische Effekt . . . . .	145
12.2.2. Der Comptoneffekt . . . . .	146
12.3. Strukturen der Quantenmechanik am Beispiel der Polarisierung . . . . .	147
12.3.1. Erster Versuch: $x_\varphi$ -polarisiertes Licht durch $x$ -Polarisator . . . . .	149
12.3.2. Zweiter Versuch: $x_\varphi$ -polarisiertes Licht durch $y$ -Polarisator . . . . .	150
12.3.3. Dritter Versuch: $x_\varphi$ -linear polarisiertes Licht durch $R$ -Polarisator . . . . .	151
12.3.4. Vierter Versuch: $R$ -zirkular polarisiertes Licht durch $x$ -Polarisator . . . . .	151
12.3.5. Allgemeines Konzept zur Polarisationsbeschreibung . . . . .	152
12.3.6. Drehimpuls als klassische Erklärung der Polarisierung . . . . .	155
12.3.7. Operator-Formalismus für den Drehimpuls . . . . .	156
12.3.8. Rechenregeln für Wahrscheinlichkeitsamplituden . . . . .	157
12.4. Welleneigenschaften massiver Teilchen . . . . .	159
12.4.1. Das Doppelspalt-Experiment mit Elektronen . . . . .	159
12.4.2. Welle-Teilchen-Dualismus . . . . .	161
12.5. Die Schrödinger-Gleichung . . . . .	162
12.5.1. Freie Schrödinger-Gleichung . . . . .	162

12.5.2. Einteilchen-Schrödinger-Gleichung . . . . .	163
12.5.3. Berechnung von messbaren physikalischen Größen . . . . .	164
12.5.4. Wellenpaket-Lösungen der Schrödinger-Gleichung . . . . .	169
12.6. Observablen-Operatoren und ihre Eigenwertgleichungen . . . . .	170
12.6.1. Summe und Produkt von Operatoren . . . . .	170
12.6.2. Eigenschaften von Observablen-Operatoren . . . . .	171
12.6.3. Eigenwerte und Eigenfunktionen von Observablen-Operatoren . . . . .	171
12.6.4. Orts- und Impulsoperator und zugehörige Eigenfunktionen . . . . .	173
12.6.5. Technische Alternativen für nicht normierbare Eigenfunktionen . . . . .	174
12.6.6. Zusammenhang von Ort und Impuls durch die Fourier-Transformation . . . . .	176
<b>13. Der Formalismus der Quantenmechanik</b>	<b>178</b>
13.1. Die Axiome der Quantenmechanik . . . . .	178
13.1.1. Erstes Axiom: Zustände . . . . .	178
13.1.2. Zweites Axiom: Observablen und Operatoren . . . . .	179
13.1.3. Drittes Axiom: Messungen . . . . .	182
13.1.4. Viertes Axiom: Dynamik . . . . .	185
13.2. Darstellungen und Bilder der Zeitentwicklung . . . . .	188
13.2.1. Verschiedene Darstellungen . . . . .	188
13.2.2. Bilder der Zeitentwicklung . . . . .	191
13.2.3. Beispiele für Darstellungen und Bilder . . . . .	193
13.3. Quantisierung und die Unbestimmtheitsrelation . . . . .	195
13.3.1. Quantisierung von Systemen . . . . .	195
13.3.2. Heisenbergsche Unschärferelation . . . . .	196
13.4. Verallgemeinerung auf gemischte Zustände . . . . .	198
<b>14. Quantenmechanische Eigenarten am Beispiel eindimensionaler Probleme</b>	<b>201</b>
14.1. Die Schrödinger-Gleichung der Wellenmechanik . . . . .	201
14.2. Stückweise konstante eindimensionale Potentiale . . . . .	202
14.2.1. Stufenpotentiale . . . . .	202
14.2.2. Rechteckige Potentialbarrieren . . . . .	205
14.2.3. Rechteckiger Potentialtopf endlicher Tiefe . . . . .	207
14.2.4. Unendlich tiefer Potentialtopf . . . . .	209
14.2.5. Beliebige Stufenpotential . . . . .	210
14.2.6. Allgemeines Potential . . . . .	211
14.3. Der eindimensionale harmonische Oszillator . . . . .	211
14.3.1. Quantisierung des Systems . . . . .	211
14.3.2. Oszillator-Eigenzustände . . . . .	212
14.3.3. Konkrete Darstellungen . . . . .	213
<b>15. Symmetrien in der Quantenmechanik und der Drehimpuls</b>	<b>215</b>
15.1. Allgemeines über Symmetrietransformationen . . . . .	215
15.1.1. Darstellung von Symmetrietransformationen im Zustandsraum . . . . .	215
15.1.2. Eigenschaften linear-unitärer Symmetrietransformationen . . . . .	216
15.1.3. Symmetriegruppen und das quantenmechanische Noether-Theorem . . . . .	216
15.2. Anwendungsbeispiel: Translationen und Rotationen . . . . .	218
15.2.1. Räumliche Translationen . . . . .	218
15.2.2. Räumliche Drehungen, Drehimpuls und Spin . . . . .	219

15.3. Eigenwerte und Eigenvektoren des Drehimpulses . . . . .	221
15.3.1. Inkompatibilität der Komponenten, Leiteroperatoren . . . . .	221
15.3.2. Normierung der gemeinsamen Eigenvektoren . . . . .	222
15.3.3. Allgemeine Form der gemeinsamen Eigenvektoren . . . . .	223
15.4. Der Bahndrehimpuls . . . . .	224
15.4.1. Drehimpuls-Operator in Kugelkoordinaten . . . . .	224
15.4.2. Lösung des Eigenwert/-vektor-Problems . . . . .	225
15.4.3. Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen . . . . .	226
15.5. Der Spin . . . . .	227
15.5.1. Eigenschaften der Spin-Operatoren . . . . .	227
15.5.2. Spin $1/2$ und Darstellungsarten . . . . .	228
15.6. Addition von Drehimpulsen . . . . .	231
<b>16. Potentialprobleme im Dreidimensionalen</b>	<b>235</b>
16.1. Teilchen in sphärisch-symmetrischen Potentialen . . . . .	235
16.1.1. Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten . . . . .	235
16.1.2. Bahndrehimpuls-Eigenzustände . . . . .	237
16.2. Freie Teilchen . . . . .	238
16.3. Das Coulomb-Potential . . . . .	239
16.4. Das Wasserstoffatom und einelektronige Ionen . . . . .	244
16.4.1. Kompatible Operatoren und Annahmen . . . . .	244
16.4.2. Umformulierung in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten . . . . .	244
16.4.3. Lösung der zugehörigen Schrödinger-Gleichung . . . . .	245
<b>17. Identische Teilchen</b>	<b>248</b>
17.1. Vertauschbarkeit von identischen Teilchen . . . . .	248
17.2. Total symmetrische/antisymmetrische Wellenfunktionen . . . . .	251
17.2.1. Paulisches Ausschlussprinzip . . . . .	251
17.2.2. Wellenfunktion als Produkt von Ein-Teilchen-Funktionen . . . . .	251
<b>18. Stationäre Störungstheorie</b>	<b>253</b>
18.1. Störungstheorie nicht entarteter Zustände . . . . .	253
18.2. Skizzierung: Störungstheorie für entartete Zustände . . . . .	255
18.3. Anwendungsbeispiel: Stark-Effekt . . . . .	257
18.3.1. Wasserstoff im Grundzustand . . . . .	257
18.3.2. Wasserstoff im ersten angeregten Zustand . . . . .	257
<b>V. Mathematischer Anhang</b>	<b>259</b>
<b>A. Vektoranalysis verallgemeinerter Koordinaten</b>	<b>260</b>
A.1. Allgemeine orthogonale Koordinaten . . . . .	260
A.2. Vektorfelder . . . . .	261
A.3. Gradient . . . . .	261
A.4. Divergenz . . . . .	262
A.5. Rotation . . . . .	263
<b>B. Orts- und Impuls-Operator</b>	<b>265</b>
B.1. Der Hilbertraum der quadratintegriblen Funktionen . . . . .	265

B.2. Der Ortsoperator . . . . .	266
B.3. Der Impulsoperator . . . . .	267
<b>C. Spezielle Polynome und Tabellen</b>	<b>269</b>
C.1. Die Hermite-Polynome . . . . .	269
C.2. Legendre-Polynome . . . . .	269
C.3. Laguerre-Polynome . . . . .	270
C.4. Clebsch-Gordan-Koeffizienten . . . . .	271
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>273</b>
<b>Index</b>	<b>274</b>



Teil I.  
Klassische Mechanik

# 1. Klassische Newtonsche Mechanik

Das physikalisch-mathematische Werk *Philosophiae naturalis principia mathematica*, veröffentlicht 1687 von Sir Isaac Newton, markiert einen der entscheidenden Wendepunkte der Wissenschafts-Historie. Newton gelingt es, basierend nur auf drei fundamentalen Postulaten, die gesamte bekannte Mechanik des 17. Jahrhunderts in einer mathematisch sauber hergeleiteten Weise zu formulieren und abzuleiten. Insbesondere begründet er damit die theoretische Physik, d.h. die mathematische Formulierung von Gesetzen der Natur.

## 1.1. Die Newtonschen Axiome

Seit über dreihundert Jahren stellen die **Newtonschen Axiome** die Basis der gleichnamigen Mechanik und Physik dar, daher werden wir mit ihnen beginnen.

1. *Inertialsysteme*: Jeder Körper verharrt im Zustand der Ruhe oder im Zustand der geradlinigen Bewegung, solange ihn keine Kraft zwingt seinen Bewegungszustand zu ändern.
2. *Kraftgesetz*: Die Änderung der Bewegungsgröße ist direkt proportional der einwirkenden (bewegenden) Kraft und geschieht in deren Richtung.
3. „*actio reactio*“: Einer Kraft-Wirkung (eines Körpers auf einen anderen) ist immer entgegengesetzt gleich die zugehörige Gegenwirkung.

Newton selbst definierte den im zweiten Axiom verwendeten Begriff der **Bewegungsgröße** als ein Maß für Bewegung, bestehend aus (träger) Masse<sup>1</sup> und Geschwindigkeit. Wir werden nun die obigen drei Gesetze in mathematischer Form für einen **Massepunkt** oder ein **System aus Massepunkten** zu formulieren, wobei ein Massepunkt dabei durch die Angabe seiner Masse  $m$  und dem Ort  $\vec{r}$  charakterisiert ist.

**Definition 1:** Unter der **Bewegung** eines Massepunkts versteht man eine (differenzierbare) Abbildung  $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$  mit  $t \mapsto \vec{r}(t)$ . Weiter bezeichnen die zeitlichen Ableitungen

$$t \mapsto \frac{d}{dt} \vec{r}(t) = \dot{\vec{r}} = \vec{v}(t) \quad \text{die (instantane) Geschwindigkeit und}$$
$$t \mapsto \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}(t) = \ddot{\vec{r}} = \vec{a}(t) \quad \text{die (instantane) Beschleunigung}$$

des Massepunkts. Die Bildmenge  $\text{im}(\vec{r}) \subset \mathbb{R}^3$  nennt man auch **Bahnkurve**. Des weiteren heißt der Graph der Abbildung (das zugehörige Raumzeit-Diagramm), also die Menge aller 4-Tupel  $(t, \vec{r}(t))$ , die **Weltlinie** der Bewegung.

Wendet man diese Definitionen auf die im zweiten Axiom verwandte Formulierung der Bewegungsgröße an, so erhalten wir jetzt

$$\text{Bewegungsgröße} = \vec{p} = m\vec{v} \quad (\text{Impuls})$$

---

<sup>1</sup>Man beachte den wichtigen Unterschied zwischen träger und schwerer Masse, auf den wir später noch genauer eingehen werden.

Unter der Voraussetzung, dass die Masse  $m$  des betrachteten Massepunkts zeitlich unverändert bleibt, findet sich nun nach dem zweiten Axiom

$$\frac{d}{dt}\vec{p} = \vec{F} \quad \implies \quad \frac{d}{dt}(m\vec{v}) = m\frac{d\vec{v}}{dt} = m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \vec{F},$$

und insbesondere folgt für kräftefreie Situationen dann die Bewegungsgleichung  $0 = \vec{F} = m\dot{\vec{v}}$ , also ist die Bewegungsgeschwindigkeit  $\vec{v} = \vec{v}_0$  konstant, wie im ersten Axiom gefordert.

Allgemeiner betrachten wir nun ein System aus  $N$  Massepunkten mit den einzelnen Massen  $m_1, \dots, m_N$ , deren Ortskoordinaten durch die einzelnen Funktionen  $\vec{r}_1(t), \dots, \vec{r}_N(t)$  gegeben sind. Analog zur vorigen Definition für einen Massenpunkt heißt dann die Abbildung  $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{3N}$  mit  $t \mapsto (\vec{r}_1(t), \dots, \vec{r}_N(t))$  Bewegung, wobei nach dem zweiten Axiom für alle  $i$  gilt

$$\frac{d}{dt}(m_i\vec{v}_i) = \vec{F}_i.$$

**Bemerkung:** • Eine Kraft  $\vec{F}$  bewirkt selbst keine Bewegung, sondern eine Änderung der Bewegung. Umgekehrt schließt man durch die Änderung des Bewegungszustands eines Objekts auf die Anwesenheit einer einwirkenden Kraft.

- Die **träge Masse** ist ein Maß für die Trägheit des bewegten Körpers, d.h. des ihm innewohnenden Widerstands vor Veränderungen seines Bewegungszustands durch eine beliebige einwirkende Kraft.
- Oftmals hängt die Kraft  $\vec{F}$ , die zum Zeitpunkt  $t$  auf einen Körper am Ort  $\vec{r}(t)$  und der Geschwindigkeit  $\vec{v}(t)$  einwirkt, von eben diesen Größen (Zeit, Ort, Geschwindigkeit) ab, sodass sich das **Kraftgesetz** als

$$m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \vec{F}(\vec{r}(t), \dot{\vec{r}}(t))$$

formulieren lässt - dies ist eine Differentialgleichung zweiter Ordnung in der Ortsfunktion  $\vec{r}(t)$ . Bei (expliziter) Kenntnis des Kraftgesetzes liefert diese Gleichung den Funktionenraum aller möglichen Bewegungen. Die im allgemeinen große Vielzahl von Möglichkeiten (eine derartige Differentialgleichung hat zumeist unendlich viele Lösungen) manifestiert sich dabei in den verschiedenen Anfangsbedingungen. Dabei können im Kraftgesetz (d.h. der Funktion  $\vec{F}(\vec{r}, \vec{v})$  selbst) verschiedene Eigenschaften des Körpers auftauchen (beispielsweise Ladung).

- Aus den vorgegebenen Anfangsbedingungen folgt dann zusammen mit dem Kraftgesetz eine eindeutige<sup>2</sup> Bewegung  $\vec{r}(t)$ , sodass in der klassischen Newtonschen Mechanik eine **strenger Determinismus** herrscht.
- Obiges lässt sich ebenfalls wieder auf die Situation mit  $N$  Massepunkten verallgemeinern, hier lautet das Kraftgesetz dann analog

$$m_i\frac{d^2\vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i(\vec{r}_1(t), \dots, \vec{r}_N(t), \dot{\vec{r}}_1(t), \dot{\vec{r}}_N(t)).$$

In vielen Fällen, insbesondere bei der Vernachlässigung von Reibungskräften, ist die Kraft  $\vec{F}$  jedoch von der Geschwindigkeit der Massepunkte unabhängig.

<sup>2</sup>Aus mathematischer Betrachtungsweise wird diese Aussage durch zwei fundamentale Sätze aus der Theorie der Differentialgleichungen gestützt, den Existenzsatz von Peano und den Eindeutigkeitssatz von Picard-Lindelöf.

- *Ort- und Zeitangaben haben nur nach Festlegung eines Bezugssystems eine sinnvolle Bedeutung, wobei wir insbesondere später in der speziellen Relativitätstheorie hierauf zurückkommen werden.*

Jene Bezugssysteme, in denen das erste Newtonsche Axiom gilt, heißen Inertialsysteme. Eine wichtige Voraussetzung der Newtonschen Mechanik ist also, dass es überhaupt ein Inertialsystem gibt.

**Definition 2:** Ein **Inertialsystem** ist ein Bezugssystem, in dem sich mindestens drei von einem Punkt in verschiedene Raumrichtungen fortgeschleuderte und dann sich selbst überlassene Körper, geradlinig gleichförmig (d.h. mit konstanter Geschwindigkeit  $\vec{v} = \vec{v}_0$ ) bewegen.

**Beispiel:** Man beachte, dass man bisher in der Natur kein echtes Inertialsystem gefunden hat, da im bekannten Universum alle Objekte mehr oder weniger umeinander kreisen, sich gegenseitig anziehen, o.ä. Trotzdem ist beispielsweise das Sonnensystem eine sehr gute Näherung für ein Inertialsystem.

Kommen wir nun zur mathematischen Formulierung des Konzepts der Inertialsysteme. Nach der obigen Formulierung liegt ein Inertialsystem dann vor, wenn die Bewegung eines jeden **freien Körpers**, d.h. sich selbst überlassenen Körpers (kräftefrei), relativ zu diesem System durch

$$\frac{d^2}{dt^2} \vec{r}(t) = 0 \quad \implies \quad \vec{r}(t) = \vec{v}_0 t + \vec{r}_0 \quad \text{für } \vec{v}_0 \text{ und } \vec{r}_0 \text{ konstant}$$

gegeben ist. Empirisch weiß man, dass jedes Bezugssystem, welches sich zu einem Inertialsystem mit konstanter Geschwindigkeit bewegt, ebenfalls ein Inertialsystem ist.<sup>3</sup>

## 1.2. Einige einfache Kraftgesetze

### 1.2.1. Bewegung im Gravitationsfeld der Erde

Newtons zweites großes Vermächtnis bestand in der Entdeckung des nach ihm benannten Gravitationsgesetzes, welches sowohl die zuvor von Kepler spezifizierten elliptischen Planetenbewegungen zu erklären vermag, aus dem aber auch die Galileischen Fallgesetze folgen.

**Satz 3 (Allgemeines Newtonsches Gravitationsgesetz):** Die Kraft, die ein Körper 2 mit der **schweren Masse**  $m_2^S$  auf einen Körper 1 der schweren Masse  $m_1^S$  ausübt, ist durch

$$\vec{F}_{\text{grav},12} = -G \frac{m_1^S m_2^S}{r_{12}^2} \hat{r}_{12}$$

gegeben, wobei  $G = 6.67 \cdot 10^{-11} \frac{\text{m}^3}{\text{kg} \cdot \text{s}^2}$  die Newtonsche Gravitationskonstante ist,  $\hat{r}_{12}$  der Einheitsrichtungsvektor von Körper 2 nach Körper 1 und  $r_{12}$  der Abstand beider Körper.

Die schwere Masse  $m^S$  ist dabei ein Maß für die Stärke der Gravitationskraft, was von der trägen Masse als Widerstand gegenüber Bewegungsänderungen zu unterscheiden ist.

---

<sup>3</sup>Man beachte dass die zugrundeliegende Definition eines Inertialsystems noch nicht das Kraftgesetz voraussetzt. Umgekehrt zeigt sich aber, dass Newtons Ansatz zur Beschreibung der Mechanik von Körpern nicht „allzu falsch“ gewesen sein kann, da aus dem Kraftgesetz wiederum gerade die geradlinige gleichförmige Bewegung von kräftefreien Körpern folgt.

**Beispiel:** Man betrachte einen Massepunkt 1 im Gravitationsfeld der Erde  $\ominus$ , wobei man ein Koordinatensystem wähle, welches im Mittelpunkt der Erde seinen Ursprung hat. Nahe der Erdoberfläche gilt dann in guter Näherung

$$\vec{F}_{1\ominus} \approx -G \frac{M_{\ominus} m_1^S}{R_{\ominus}^2} \hat{r} = 9.81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2} \cdot m_1^S \cdot \hat{r} = g m_1^S \cdot \hat{r}$$

gilt, wobei  $M_{\ominus} = 5.977 \cdot 10^{24} \text{ kg}$  die Erdmasse und  $R_{\ominus} = 6.36 \cdot 10^6 \text{ m}$  der Erdradius ist. Nach dem zweiten Newtonschen Axiom gilt dann das Kraftgesetz

$$m \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}(t) = -g m^S \hat{z},$$

wobei  $\hat{z}$  der Einheitsrichtungsvektor in die normal zur Erdoberfläche stehende  $z$ -Richtung sein soll.

Obwohl aus theoretischer Sicht träge und schwere Masse überhaupt nicht miteinander in Beziehung stehen, gilt empirisch jedoch  $m = m^S$  und man erhält direkt, dass die Beschleunigung, die ein Körper im Feld erfährt unabhängig von seiner Beschaffenheit ist. Dieses Prinzip ist auch unter dem Begriff der Universalität der Bewegung im Gravitationsfeld bekannt.

### 1.2.2. Bewegung im Gravitationsfeld der Erde mit Luftreibung

Wird auch die Luftreibung bei der Bewegung mit in Betracht gezogen, so setzt sich die einwirkende Kraft aus der Gravitationskraft  $\vec{F}_{\text{grav}}$  und der Reibungskraft  $\vec{F}_{\text{R}}$  zusammen, d.h. es gilt

$$\vec{F} = \vec{F}_{\text{grav}} + \vec{F}_{\text{R}}.$$

Es gibt mehrere unterschiedliche Arten von Reibungsgesetzen zur Beschreibung des Luftwiderstands, etwa

$$\vec{F}_{\text{R}} = \begin{cases} -A\vec{v} & : \text{für kleine Geschwindigkeiten (Stokes-Reibung)} \\ -\beta\vec{v}^2 \cdot \hat{v} & : \text{für große Geschwindigkeiten} \end{cases}.$$

Zur Herleitung betrachte man den Grenzfall von nicht miteinander wechselwirkenden Molekülen<sup>4</sup> (wir betrachten also nur eine sehr stark vereinfachte Version). Nach dem dritten Newtonschen Gesetz entspricht die Reibungskraft eines Körpers dem Umgekehrten der Impulse, die den Luftmolekülen durch Stöße vermittelt wird. Mit dem Kraftgesetz folgt dann

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} \approx \frac{\Delta\vec{p}}{\Delta t} \quad \Longrightarrow \quad \vec{F}_{\text{R}} = -\frac{\Delta\vec{p}}{\Delta t}$$

Fällt ein Körper mit der Geschwindigkeit  $\vec{v}$ , so erhalten alle Luftmoleküle innerhalb eines bestimmten Volumens  $V$  den Impuls  $m_{\text{LM}}\vec{v}$ , d.h. die gesamte Impulsänderung ist durch

$$\Delta p = m_{\text{LM}} v \cdot N_{\text{LM}} = m_{\text{LM}} v \cdot V \frac{\rho_{\text{Luft}}}{m_{\text{LM}}} = A v^2 \rho_{\text{Luft}} \Delta t$$

<sup>4</sup>Der hauptsächliche Unterschied zwischen kleinen und großen Geschwindigkeiten ist in diesem Fall, ob die Moleküle den hinter dem Objekt freiwerdenden Raum schnell genug wieder ausfüllen können - bei hohen Geschwindigkeiten entsteht also ein „Luftloch“, welches näherungsweise durch wechselwirkungsfreie Moleküle beschrieben werden kann.

## 1. Klassische Newtonsche Mechanik

---

gegeben, sodass  $F_R = -A\rho_{\text{Luft}}v^2$  die Reibungskraft ist. Um nun noch die aerodynamischen Eigenschaften der Form der Fläche  $A$  zumindest rudimentär zu berücksichtigen, führt man den Faktor  $c_w$  ein, sodass dann

$$F_R = -c_w A \rho_{\text{Luft}} v^2 = -\beta v^2$$

mit  $c_w \leq 1$  folgt. Als gesamte auf den Körper einwirkende Kraft erhalten wir dann zusammen mit der Gravitationskraft

$$\vec{F} = \vec{F}_G + \vec{F}_R = -mg\hat{z} - \beta\vec{v}^2 \cdot \vec{v}_0 .$$

Man betrachte nun den freien Fall in  $z$ -Richtung, wobei die Anfangsbedingungen so gewählt seien, dass  $\vec{v}(t) = v(t)\hat{z}$  für alle Zeitpunkte  $t$  gilt. Es folgt also

$$m\vec{a} = \vec{F} \iff \vec{a} = \frac{\vec{F}}{m} = -g \left( 1 - \frac{\beta}{mg} v^2 \right) \hat{z}$$

für die Beschleunigung des Massepunkts, wobei aus den Anfangsbedingungen

$$\ddot{x} = 0 \implies \dot{x} = \dot{x}(0) = 0 \quad \text{und} \quad \ddot{y} = 0 \implies \dot{y} = \dot{y}(0) = 0$$

folgt. Um den zeitlichen Verlauf der Geschwindigkeit zu bestimmen, setze man nun

$$\frac{\beta}{mg} = \frac{1}{u^2} \implies a = \frac{dv}{dt} = -\frac{g}{u^2} (u^2 - v^2(t)) ,$$

d.h. wir erhalten eine Differentialgleichung vom Typ  $\frac{dv}{dt} = f(v)$ . Zur Lösung verwendet man einen Trick (man betrachtet die Differentiale  $dv$  und  $dt$  als eigenständige Objekte, mit denen wir mit gewöhnlichen Variablen zu verfahren ist), dessen mathematische Rechtfertigung später noch zu zeigen ist:

$$\frac{dv}{dt} = f(v) \iff \frac{dv}{f(v)} = dt \implies \int^v \frac{dv'}{f(v')} = \int^t dt' + C .$$

Konkret führt dies im hier betrachteten Fall zu

$$\int^v \frac{dv'}{f(v')} = -\frac{u^2}{g} \int^v \frac{dv'}{u^2 - v'^2} ,$$

wobei dieses Integral mit Hilfe der Partialbruchzerlegung zu lösen ist, es gilt

$$\int \frac{dv}{u^2 - v^2} = \int \frac{dv}{(u+v)(u-v)} = \int \left( \frac{A_1}{u+v} + \frac{A_2}{u-v} \right) dv .$$

Mit  $A_1 = A_2 = \frac{1}{2u}$  nimmt das zu bestimmende Integral dann die Form

$$\frac{1}{2u} \left[ \int \frac{dv}{u+v} + \int \frac{dv}{u-v} \right] = \frac{1}{2u} (\ln|u+v| - \ln|u-v|) = \frac{1}{2u} \ln \left| \frac{u+v}{u-v} \right|$$

an, also erhalten wir

$$\int^v \frac{dv'}{f(v')} = -\frac{u^2}{g} \int^v \frac{dv'}{u^2 - v'^2} = -\frac{u^2}{g} \cdot \frac{1}{2u} \ln \left| \frac{u+v}{u-v} \right| = -\frac{u}{2g} \ln \frac{u+v}{u-v} ,$$

wobei die Beträge wegfallen, da  $u > 0$  und  $|v| < u$  sei. Die Lösung der Differentialgleichung zur Bestimmung der Geschwindigkeit ergibt sich dann durch eine algebraische Umformung aus

$$-\frac{u}{2g} \ln \frac{u+v}{u-v} = t + c \iff \frac{u+v}{u-v} = e^{-\frac{2g}{u}t} \underbrace{e^{-\frac{2g}{u}C}}_{\frac{1}{k}}$$

$$\iff k(u+v) = (u-v)e^{-\frac{2g}{u}t} = e^{-I}(u-v) \iff v = -u \frac{k - e^{-I}}{k + e^{-I}},$$

wobei die Konstante  $k$  über  $C$  mit dem Anfangswert verknüpft ist. Zum Startzeitpunkt  $t = 0$  sei die Anfangsgeschwindigkeit  $v(t=0) = v_0$ , so findet man

$$v_0 = -u \frac{k-1}{k+1} \iff k = \frac{u-v_0}{u+v_0}.$$

Speziell für den Fall  $v_0 = 0$  (einfaches Fallenlassen) folgt  $k = 1$ , also erhält man dann

$$v(t) = -u \frac{1 - e^{-I}}{1 + e^{-I}} = -u \tanh\left(\frac{g}{u}t\right).$$

Für kleine Argumente<sup>5</sup> lässt sich der Tangens hyperbolicus durch  $\tanh t = t - \frac{1}{3}t^3 + \dots$  approximieren, für große  $t$  gilt  $\tanh t = 1$ , also erhalten wir schließlich

$$v(t) = \begin{cases} -gt + \frac{1}{3}\frac{g^3}{u^2}t^3 + \dots & : \text{für kleine } t \\ -u =: v_\infty & : \text{für große } t \end{cases}.$$

**Beispiel:** Berechnen wir die Endgeschwindigkeit  $v_\infty$  für einige Objekte explizit, wobei sich diese betragsmäßig durch

$$v_\infty = u = \sqrt{\frac{mg}{\beta}} = \sqrt{\frac{mg}{\rho_{\text{Luft}} A c_w}}$$

ergibt. Für einen Menschen mit  $m = 80$  kg Gewicht, der Widerstandsfläche  $A = 0.5$  m<sup>2</sup> und  $c_w = 1$  gilt folglich  $v_\infty \approx 140 \frac{\text{km}}{\text{h}}$  - bereits in diesem einfachen Modell zeigt sich also, dass ein Sturz aus großer Höhe definitiv tödlich ist. Bei einem Fallschirmspringer gleichen Gewichts, aber erhöhter Oberfläche von  $A = 30$  m<sup>2</sup>, erhält man nur eine Endgeschwindigkeit von  $v_\infty \approx 18 \frac{\text{km}}{\text{h}}$ .

Neben der zeitlichen Abhängigkeit der Geschwindigkeit ist auch die Bahnbewegung  $\vec{r}(t)$  von Interesse. Aus

$$v(t) = -u \tanh\left(\frac{g}{u}t\right)$$

erhalten wir durch Integration dann

$$z(t) = -u \int^t \tanh\left(\frac{g}{u}t'\right) dt' + z_0 = -\frac{u^2}{g} \int^{\frac{g}{u}t} \tanh(t') dt' + z_0 = -\frac{u^2}{g} \ln \cosh\left(\frac{g}{u}t\right) + z_0.$$

<sup>5</sup>Die häufig in der Physik verwendete Formulierung „für kleine Argumente“ stellt prinzipiell eine Abkürzung für diejenigen Argumente dar, für welche die Taylor-Approximationen noch genau genug ist.

### Mathematischer Einschub: Differentialgleichungen der Form $\frac{dy}{dx} = -\frac{R(x)}{S(y)}$

An dieser Stelle soll der zuvor verwandte Trick zum Lösen der Differentialgleichung mathematisch hergeleitet werden. Betrachte zunächst

$$R(x) dx + S(y) dy = 0$$

als totales Differential einer Funktion  $f(x, y)$  in zwei Veränderlichen, wobei hierfür ganz allgemein  $df = \frac{\partial f}{\partial x}(x, y) dx + \frac{\partial f}{\partial y}(x, y) dy$  gilt. Also gilt die Identifikation

$$R(x) = \frac{\partial f}{\partial x} \quad \text{und} \quad S(y) = \frac{\partial f}{\partial y}$$

und die ursprüngliche Differentialgleichung lässt sich als  $df = 0$  schreiben, sodass  $f(x, y) = C$  die triviale Lösung ist. Andererseits lässt sich aufgrund der eingeschränkten Abhängigkeit ( $R$  und  $S$  hängen nur von jeweils einer Variable ab) aber auch

$$f(x, y) = \int^x R(x') dx' + g_1(y) \quad \text{und} \quad f(x, y) = \int^y S(y') dy' + g_2(x)$$

formulieren. Durch Gleichsetzen und Umstellen erhält man daraus dann

$$\int R(x) dx - g_2(x) = \int S(y) dy - g_1(y) ,$$

wobei die linke Seite lediglich von  $x$  abhängig ist, die rechte nur von  $y$  - sie können also nur dann identisch sein, wenn beide gleich einer Konstante  $C$  sind, es ist also

$$f(x, y) = \int R(x) dx + \int S(y) dy - C' ,$$

d.h. die Lösung der ursprünglichen Differentialgleichung ist implizit durch

$$\int R(x) dx + \int S(y) dy = C + C'$$

gegeben. All dies folgt ausschließlich aus der ursprünglichen Differentialgleichung  $S(y) dy = -R(x) dx$  und einer unbestimmten Integration, sodass

$$-\int R(x) dx + C = \int S(y) dy$$

gilt. Im oben betrachteten Fall war  $R(x) = -1$  und  $S(y) = (F(y))^{-1}$ .

### 1.2.3. Der harmonische Oszillator ohne Reibung

Eines der wichtigsten physikalischen Systeme ist der harmonische Oszillator, den wir später auch noch in seiner quantenmechanischen Variante betrachten werden. Der klassische harmonische Oszillator ohne Reibungseinflüsse ist in einer Dimension durch die Gleichung

$$m\ddot{x} = -kx \iff \ddot{x} + \frac{k}{m}x = 0$$

gegeben. Es handelt sich dabei um eine gewöhnliche lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung, die zudem noch homogen mit konstanten Koeffizienten ist. Dabei verstehen wir allgemein unter einer homogenen linearen Differentialgleichung  $n$ -ter Ordnung eine Gleichung der Form

$$a_n(x) \frac{d^n y}{dx^n} + \dots + a_1(x) \frac{dy}{dx} + a_0(x)y = 0 .$$

Lösungen homogener Differentialgleichungen genügen insbesondere dem physikalischen Superpositionsprinzip, d.h. aus mathematischer Sicht ist also auch jede Linearkombination  $\alpha_1 y_1(x) + \alpha_2 y_2(x)$  von Lösungen  $y_1(x)$  und  $y_2(x)$  ebenfalls eine Lösung. Für eine homogene lineare Differentialgleichung mit konstanten Koeffizienten

$$a_n \frac{d^n y}{dx^n} + \dots + a_1 \frac{dy}{dx} + a_0 y = 0$$

wählt man den Lösungsansatz  $y = e^{\lambda x}$ , einsetzen in die Gleichung liefert dann

$$(a_n \lambda^n + a_{n-1} \lambda^{n-1} + \dots + a_1 \lambda + a_0) e^{\lambda x} = 0 .$$

Da  $e^x \neq 0$  für alle  $x \in \mathbb{C}$  ist, erhält man somit eine einfache algebraische Gleichung

$$a_n \lambda^n + a_{n-1} \lambda^{n-1} + \dots + a_1 \lambda + a_0 = 0 ,$$

welche bis zu  $n$  komplexwertige Lösungen  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  hat (nach dem Fundamentalsatz der Algebra mindestens eine). Da (wie schon erwähnt) die allgemeine Lösung eine Linearkombination dieser Lösungen ist, hat sie die Form

$$y(x) = c_1 e^{\lambda_1 x} + \dots + c_n e^{\lambda_n x}$$

mit freien Linearfaktoren  $c_1, \dots, c_n \in \mathbb{C}$ .

Es stellt sich allerdings noch die Frage, wie sich aus dieser im Allgemeinen komplexwertigen Lösung eine reelle physikalische Information erhalten lässt. Wir bezeichnen eine derartige Differentialgleichung als physikalisch, wenn die Koeffizienten  $a_0, \dots, a_n$  reell sind, dann ist auch mit jeder im Allgemeinen komplexwertigen Lösung  $y(x)$  das komplex konjugierte  $\bar{y}(x)$  eine Lösung, und aufgrund der Linearität sind dann auch

$$\Re y(x) = \frac{1}{2} (y(x) + \bar{y}(x)) \quad \text{und} \quad \Im y(x) = \frac{1}{2i} (y(x) - \bar{y}(x))$$

Lösungen der Differentialgleichung.

**Bemerkung:** Sind die Anfangsbedingungen einer physikalischen Differentialgleichung ebenfalls reell, so sind auch die zugehörigen Lösungen reell.

Wir betrachten nun erneut die Bewegungsgleichung  $m\ddot{x} = -kx$  der reibungsfreien harmonischen Oszillators, wobei der Ansatz  $x(t) = e^{\lambda t}$  durch Einsetzen

$$\left( \lambda^2 + \frac{k}{m} \right) e^{\lambda t} = 0 \iff \lambda_{1,2} = \pm \sqrt{-\frac{k}{m}} = \pm i\omega_0 \quad \text{mit} \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

liefert. Die allgemeinste Bewegungsfunktion ist daher durch

$$x(t) = c_1 e^{i\omega_0 t} + c_2 e^{-i\omega_0 t}$$

## 1. Klassische Newtonsche Mechanik

---

mit  $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$  gegeben. Durch  $x(0) = x_0$  und  $v(0) = v_0$  seien nun Anfangsbedingungen spezifiziert, diese führen dann zu den beiden Gleichungen

$$x_0 = c_1 + c_2 \quad \text{und} \quad v_0 = i\omega_0(c_1 - c_2),$$

zur Bestimmung der Linearfaktoren  $c_1$  und  $c_2$ , welche sich damit zu

$$c_1 = \frac{1}{2} \left( x_0 - i \frac{v_0}{\omega_0} \right) \quad \text{und} \quad c_2 = \frac{1}{2} \left( x_0 + i \frac{v_0}{\omega_0} \right)$$

ergeben. Die Bewegungsgleichung zu gegebenen Anfangsbedingungen  $x_0$  und  $v_0$  lautet damit

$$\begin{aligned} x(t) &= \frac{1}{2} \left( x_0 - i \frac{v_0}{\omega_0} \right) (\cos(\omega_0 t) + i \sin(\omega_0 t)) + \frac{1}{2} \left( x_0 + i \frac{v_0}{\omega_0} \right) (\cos(\omega_0 t) - i \sin(\omega_0 t)) \\ &= A \cos(\omega_0 t + \varphi), \end{aligned}$$

wobei sich unter Verwendung der Additionstheoreme die Beziehungen

$$A \cos \varphi = x_0 \quad A \sin \varphi = -\frac{v_0}{\omega_0} \quad \Longrightarrow \quad A = \sqrt{x_0^2 + \left( \frac{v_0}{\omega_0} \right)^2} \quad \tan \varphi = -\frac{v_0}{x_0 \omega_0}$$

ergeben. Für die Periodendauer gilt dabei  $T = \frac{2\pi}{\omega_0}$ , wobei  $\omega_0 = 2\pi\nu$  die **Kreisfrequenz** ist.

### 1.2.4. Der harmonische Oszillator mit Stokes-Reibung

Nun sollen die Auswirkungen eines Reibungseinflusses auf den klassischen harmonischen Oszillator betrachtet werden. In diesem Fall lautet die Bewegungsgleichung

$$m\ddot{x} = -b\dot{x} - kx \iff \ddot{x} + \frac{b}{m}\dot{x} + \frac{k}{m}x = 0$$

Mit demselben Ansatz wie zuvor führt man die Lösung der Differentialgleichung mit dem Exponentialansatz  $x(t) = e^{\lambda t}$  auf ein Polynom

$$\lambda^2 + \frac{b}{m}\lambda + \frac{k}{m} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \lambda_{1,2} = -\frac{b}{2m} \pm i\bar{\omega} \quad \text{mit} \quad \bar{\omega} = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{b^2}{4m^2}}$$

zurück, wobei die Voraussetzung  $\omega_0^2 > \left(\frac{b}{2m}\right)^2$  gelten soll. Als allgemeine Lösung erhält man hier somit

$$x(t) = c_1 e^{-\frac{b}{2m}t + i\bar{\omega}t} + c_2 e^{-\frac{b}{2m}t - i\bar{\omega}t} = e^{-\frac{b}{2m}t} (c_1 e^{i\bar{\omega}t} + c_2 e^{-i\bar{\omega}t}).$$

Betrachten wir das Problem nun wieder unter gegebenen Anfangsbedingungen  $x(0) = x_0$  und  $v(0) = v_0$ , so folgt

$$x(t) = e^{-\frac{b}{2m}t} \left[ x_0 \cos(\bar{\omega}t) + \frac{v_0 + \frac{b}{2m}x_0}{\bar{\omega}} \sin(\bar{\omega}t) \right] = \bar{A} e^{-\frac{b}{2m}t} \cos(\bar{\omega}t + \varphi)$$

$$\text{mit} \quad \bar{A} = \sqrt{x_0^2 + \left( \frac{v_0 + \frac{b}{2m}x_0}{\bar{\omega}} \right)^2} \quad \text{und} \quad \tan \varphi = -\frac{v_0 + \frac{b}{2m}x_0}{\bar{\omega}x_0}$$

### 1.2.5. Der periodisch angeregte Oszillator

Zuletzt betrachten wir noch, welche Auswirkungen eine periodische Anregung des reibungsfreien harmonischen Oszillators zur Folge hat. Die Bewegungsgleichung lautet

$$m\ddot{x} = -kx + f \cos(\omega't) \iff m\ddot{x} + kx = f \cos(\omega't) .$$

Hier treffen wir das erste Mal auf eine inhomogene Differentialgleichung, deren Lösungen im Allgemeinen von der Form  $x(t) = x_{\text{hom}}(t) + x_{\text{ih}}(t)$  sind. Die Lösung  $x_{\text{hom}}(t)$  der homogenen Differentialgleichung kennen wir bereits, sie lautet

$$x_{\text{hom}}(t) = c_1 e^{i\omega_0 t} + c_2 e^{-i\omega_0 t} \quad \text{mit} \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} .$$

Um eine spezielle Lösung des inhomogenen Anteils zu finden, betrachte man die folgende (komplex ergänzte) Differentialgleichung, deren Realteil grade mit der zu untersuchenden Differentialgleichung übereinstimmt:

$$\left. \begin{aligned} m\ddot{x}_{\text{ih}} + kx_{\text{ih}} &= f e^{i\omega't} \\ m\bar{\ddot{x}}_{\text{ih}} + k\bar{x}_{\text{ih}} &= f e^{-i\omega't} \end{aligned} \right\} \implies m \Re \ddot{x}_{\text{ih}} + k \Re x_{\text{ih}} = \frac{1}{2} f (e^{i\omega't} + e^{-i\omega't}) = f \cos(\omega't)$$

Es liegt nun nahe den Ansatz  $x_{\text{ih}}(t) = A_{\text{ih}} e^{i\omega't}$  mit noch zu bestimmendem  $A_{\text{ih}}$  zu wählen. Es findet sich schließlich

$$A_{\text{ih}} = \frac{f}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega'^2} \implies x_{\text{ih}}(t) = \frac{f}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega'^2} e^{i\omega't}$$

und damit folgt für den Realteil dieser komplexwertigen Lösung

$$\Re x_{\text{ih}}(t) = \frac{f}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega'^2} \cos(\omega't) ,$$

womit eine spezielle Lösung der inhomogenen Differentialgleichung gefunden wäre. Als allgemeine Bewegungsfunktion des periodisch angeregten harmonischen Oszillators erhält man damit

$$x(t) = \underbrace{c_1 e^{i\omega_0 t} + c_2 e^{-i\omega_0 t}}_{\text{homogener Teil}} + \underbrace{\frac{f}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega'^2} \cos(\omega't)}_{\text{inhomogener Anteil}} .$$

Anfangsbedingungen seien nun wie üblich durch  $x(0) = x_0$  und  $v(0) = v_0$  gegeben, dies führt dann zu

$$x(t) = \frac{f}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega'^2} \cos(\omega't) + \left( x_0 - \frac{f}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega'^2} \right) \cos(\omega_0 t) + \frac{v_0}{\omega_0} \sin(\omega_0 t) .$$

Damit ist eine Lösung der Differentialgleichung unter den gegebenen Anfangsbedingungen gefunden.

## 1.3. Abgeleitete Gesetze der Mechanik eines Massepunkts

### 1.3.1. Arbeit und kinetische Energie

Zur Vereinfachung betrachten wir zunächst nur eine eindimensionale Bewegung eines Teilchens in  $x$ -Richtung, auf welches eine konstante Kraft ebenfalls in  $x$ -Richtung einwirkt, also  $\vec{F}_0 =$

$(F_0, 0, 0)$ . Durch diese Kraft werde das Teilchen durch die Änderung seines Bewegungszustands innerhalb der Zeit  $t$  von  $x_0$  nach  $x(t)$  bewegt. Wir nennen dann  $F_0 \cdot (x(t) - x_0)$  die **Arbeit**, die von der Kraft am Teilchen verrichtet wurde, aus der Bewegungsgleichung folgt

$$m\ddot{x} = F_0 \iff \frac{d}{dt}\dot{x} = \frac{F_0}{m} \implies \dot{x}(t) = \frac{F_0}{m}t + v_0 \implies x(t) = \frac{F_0}{m} \frac{t^2}{2} + v_0 t + x_0 .$$

Verwendet man nun nach entsprechender Umformung  $t = \frac{m}{F_0}(\dot{x}(t) - v_0)$ , so folgt

$$\begin{aligned} x(t) &= \frac{1}{2} \frac{F_0}{m} \frac{m^2}{F_0^2} (\dot{x}(t) - v_0)^2 + v_0 \frac{m}{F_0} (\dot{x}(t) - v_0) + x_0 = \frac{1}{2} \frac{m}{F_0} (\dot{x}^2 - v_0^2) + x_0 \\ &\implies A = F_0 \cdot (x(t) - x_0) = \frac{m}{2} (\dot{x}(t)^2 - v_0^2) \end{aligned}$$

**Definition 4:** Wir bezeichnen mit  $T(t) := \frac{m}{2}\dot{x}(t)^2$  die **kinetische Energie**. Dabei gilt, dass die von einer Kraft geleistete Arbeit gleich der Änderung der kinetischen Energie ist.

Man betrachte nun weiter den Fall, dass sich das Teilchen nur in  $x$ -Richtung bewegen kann (beispielsweise durch eine Führungsschiene), allerdings sei die konstante Kraft nun anders gerichtet, es gilt  $\vec{F}_0 = F_x \hat{x} + F_y \hat{y}$ . Der Kraftanteil  $K_y \hat{y}$  wird dabei durch die Reaktionskraft mit der Schiene kompensiert, es folgt also

$$\dot{x}(t) = \frac{F_0 \cos \varphi}{m} t + v_0 .$$

Durch analoges Umformen wie oben erhalten wir dann letztlich den Term

$$F_0 \cdot (x(t) - x_0) \cos \varphi = \frac{m}{2} (\dot{x}(t)^2 - v_0^2) = T(t) - T(0) .$$

Setzt man nun weiter  $F_0 \cdot (x(t) - x_0) \cos \varphi = \vec{F}_0 \cdot (\vec{r}(t) - \vec{r}_0) = \vec{F}_0 \cdot \Delta \vec{s} = A$ , so ist eine allgemeinere Definition für die Arbeit in diesem Fall gefunden.

Abschließend wenden wir uns dem allgemeinsten Fall einer krummlinigen Bewegung durch ein allgemeines Kraftfeld zu. Zur Bestimmung der Arbeit unterteilt man hier die Weglinie in kleinere Wegsegmente, die so klein sind, dass die Kraft über jedes einzelne Wegsegment als konstant angenommen werden kann - sodass man sich wieder im vorigen Fall befindet, und folglich die Arbeit jedes einzelnen Wegsegments kennt. Anschließend summiere man über alle Segmente. Bezeichnet  $C$  die Bahnkurve, so erhält man für die Arbeit  $A_C$  entlang  $C$  dann

$$A = \sum_i \vec{F}_i \cdot \Delta \vec{s}_i \rightarrow \int_C \vec{F} d\vec{s} = A_C ,$$

wobei man die Anzahl der Unterteilungen gegen unendlich laufen lässt, sodass die Summe in ein Kurvenintegral übergeht.

### Mathematischer Einschub: Berechnung von Weg- und Kurvenintegralen

Obwohl das Auftauschen des Kurvenintegrals in voriger Betrachtung völlig natürlich geschieht, muss noch geklärt werden, wie ein solches Kurvenintegral explizit zu berechnen ist. Gegeben sei eine Kurve  $C$  im  $\mathbb{R}^3$ , die durch  $\tau \mapsto \vec{r}(\tau) = (x(\tau), y(\tau), z(\tau))$  mit  $\tau \in \mathbb{R}$  parametrisiert sei, sowie weiter zwei Funktionen  $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  und  $\vec{g} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ . Es ergeben sich nun die folgenden Definitionen für Kurvenintegrale:

- Wegintegral über eine Bogenlänge:

$$\int_C f ds = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_i f(\vec{r}_i) \Delta s_i = \int_a^b f(\vec{r}(\tau)) |\vec{r}'(\tau)| d\tau$$

- Wegintegral über Projektion:

$$\int_C f dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_i f(\vec{r}_i) \Delta x_i = \int_a^b f(\vec{r}(\tau)) x'(\tau) d\tau$$

- Allgemeines Wegintegral (mit Vektorfunktion als Integranden):

$$\int_C \vec{f} d\vec{s} = \int_C f_x dx + \int_C f_y dy + \int_C f_z dz = \int_a^b f(\vec{r}(\tau)) \cdot \vec{r}'(\tau) d\tau$$

Wird die Bahnkurve mittels der Zeit  $t$  parametrisiert, so gilt also im zuvor behandelten Fall für die Arbeit entlang  $C$

$$A_C = \int_C \vec{F} d\vec{s} = \int_{t_A}^{t_B} \vec{F}(\vec{r}(t)) \cdot \dot{\vec{r}}(t) dt .$$

Um die Bedeutung der Arbeit zu verstehen, d.h. also den Begriff sinnvoll zu interpretieren, betrachte die Bewegungsgleichung  $m\ddot{\vec{r}} = \vec{F}(\vec{r})$ , es folgt

$$\begin{aligned} m\ddot{\vec{r}} = \vec{F}(\vec{r}) &\iff m\ddot{\vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}} = \vec{F}(\vec{r}) \cdot \dot{\vec{r}} \iff \frac{d}{dt} \left( \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 \right) = \vec{F}(\vec{r}) \cdot \dot{\vec{r}} \\ \implies \int_{t_A}^{t_B} \frac{d}{dt} \left( \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 \right) dt &= \int_{t_A}^{t_B} \vec{F}(\vec{r}(t)) \cdot \dot{\vec{r}}(t) dt = A_C = \int_C \vec{F} d\vec{s} , \end{aligned}$$

d.h. es gilt  $A_C = T(t_B) - T(t_A)$  und mit der kinetischen Energie  $T(t) = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2(t)$  folgt also

$$A_C = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2(t_B) - \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2(t_A) .$$

Damit haben wir die bereits in der Definition der kinetischen Energie getätigte Aussage, dass die Arbeit der Differenz der kinetischen Energie entspricht, gezeigt.

Alternativ kann man die Situation auch differentiell interpretieren: Innerhalb der (infinitesimalen) Zeitspanne  $dt$  ist die (ebenfalls infinitesimale) Änderung der kinetischen Energie  $dT$  gegeben durch

$$\frac{dT}{dt} = \vec{F} \cdot \dot{\vec{r}} = \vec{F} \cdot \vec{v} = \frac{dA}{dt} ,$$

d.h. die pro Zeiteinheit geleistete Arbeit entspricht der instantanen Leistungsaufnahme  $P$ . Die Arbeit  $A_C$  hängt dabei vom ganzen Weg  $C$  ab, während  $T(t_B) - T(t_A)$  nur vom Anfangs- und Endpunkt abhängt. Interessant ist daher der Fall, dass auch die Arbeit nur vom Anfangs- und Endpunkt des Weges abhängt, nicht aber von ganz  $C$ .

### 1.3.2. Potentiale

**Definition 5:** Ein Kraftfeld  $\vec{F}(\vec{r})$  heißt **konservativ**, wenn das Arbeits-Wegintegral über jede Kurve  $C$  nur vom Anfangs- und Endpunkt abhängt.

Konservative Kraftfelder haben wichtige Eigenschaften, so gilt stets

$$\oint_C \vec{F} d\vec{s} = 0$$

über jede geschlossene Kurve  $C$ . Entlang eines geschlossenen Weges wird also in einem konservativen Kraftfeld auch keine Arbeit verrichtet. Des Weiteren existiert eine Funktion  $U$ , sodass

$$\int_C \vec{F} d\vec{s} = U(\vec{r}_A, \vec{r}_B)$$

gilt, wobei  $\vec{r}_A$  bzw.  $\vec{r}_B$  der Anfangs- und Endpunkt von  $C$  sind. Wie sieht nun diese Funktion  $U$  konkret aus? Dazu betrachten wir drei Punkte  $\vec{A}$ ,  $\vec{B}$  und  $\vec{C}$  im Raum, sowie Wege  $C_0$  von  $\vec{A}$  nach  $\vec{C}$ ,  $C_1$  von  $\vec{A}$  nach  $\vec{B}$  und  $C_2$  von  $\vec{B}$  nach  $\vec{C}$ . Da die Arbeit nach Voraussetzung unabhängig vom konkreten Weg ist, gilt dann folglich

$$\int_{C_0} \vec{F} d\vec{s} = \int_{C_1} \vec{F} d\vec{s} + \int_{C_2} \vec{F} d\vec{s} \iff U(\vec{A}, \vec{C}) = U(\vec{A}, \vec{B}) + U(\vec{B}, \vec{C}).$$

Die linke Seite ist dabei offensichtlich unabhängig vom Punkt  $\vec{B}$ , während auf der rechten Seite  $\vec{B}$  explizit auftaucht, es kann demnach nur eine Gleichheit gelten, sofern es eine Funktion  $V(\vec{r})$  mit  $U(\vec{A}, \vec{B}) = V(\vec{A}) - V(\vec{B})$  gibt. Eine solche Funktion  $V(\vec{r})$  heißt **Potential** des konservativen Kraftfelds  $\vec{F}(\vec{r})$ , es gilt dann folglich

$$\int_C \vec{F} d\vec{s} = V(\vec{r}_A) - V(\vec{r}_B).$$

Zur expliziten Berechnung von  $V(\vec{r})$  aus  $\vec{F}$  wähle man einen beliebigen Weg  $C$  von  $\vec{r}_A$  nach  $\vec{r}$ , dann gilt

$$V(\vec{r}) = - \int_C \vec{F} d\vec{s} + V(\vec{r}_A).$$

Sei nun weiter  $C = dC$  ein infinitesimaler Weg von  $\vec{r}_A$  nach  $\vec{r} = \vec{r}_A + \Delta\vec{s}$ , dann folgt mit der Taylor-Näherung erster Ordnung im dritten Schritt

$$\begin{aligned} \int_{dC} \vec{F} d\vec{s} &= \vec{F} \cdot \Delta\vec{s} = V(\vec{r}_A) - V(\vec{r}_A + \Delta\vec{s}) \\ &= V(\vec{r}_A) - (V(\vec{r}_A) + \Delta\vec{s} \cdot \vec{\nabla} V(\vec{r}_A)) = -\vec{\nabla} V(\vec{r}_A) \cdot \Delta\vec{s}, \end{aligned}$$

also gilt  $\vec{F}(\vec{r}) = -\vec{\nabla} V(\vec{r})$ . Insgesamt haben wir nun damit den folgenden Satz hergeleitet:

**Satz 6:** Das Kraftfeld  $\vec{F}(\vec{r})$  ist genau dann konservativ, wenn es ein Potential  $V(\vec{r})$  mit der Eigenschaft  $\vec{F}(\vec{r}) = -\vec{\nabla} V(\vec{r})$  gibt.

*Beweis.* • „ $\Rightarrow$ “: Dies haben wir gerade gezeigt und aus  $\oint_C \vec{F} d\vec{s} = 0$  gefolgt.

• „ $\Leftarrow$ “: Folgt aus dem Satz von Stokes, auf den wir gleich eingehen. □

### Mathematischer Einschub: Gradient, Divergenz und Rotation

An dieser Stelle soll die Bedeutung dreier wichtiger mathematischer Differentialoperatoren geklärt werden. Man betrachte eine beliebige Funktion  $\varphi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  mit  $\vec{r} \mapsto \varphi(\vec{r})$ , dann wird der **Gradient** von  $\varphi$  in kartesischen Koordinaten durch

$$\text{grad } \varphi := \vec{\nabla} \varphi = \left( \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \frac{\partial \varphi}{\partial y}, \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)$$

definiert. Zur Interpretation habe die Funktion an einem beliebigen Punkt  $\vec{r}_0$  den Wert  $\varphi(\vec{r}_0) = \varphi_0$ . Man zeichne dann die Hyperfläche  $\varphi(\vec{r}) = \varphi_0$  im  $\mathbb{R}^3$ , auf der dieser Funktionswert konstant gleich bleibt. Der Gradient ist dann proportional der Normalen auf der Fläche.

Nun betrachten wir eine vektorwertige Funktion  $\vec{A} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$  mit  $\vec{r} \mapsto \vec{A}(\vec{r})$ , eine solche Vektorfunktion wird häufig mit Hilfe von Feldlinien veranschaulicht. Man ordnet nun diesem Vektorfeld ein Skalarfeld, die sogenannte **Divergenz** von  $\vec{A}$  zu, welche in kartesischen Koordinaten durch

$$\text{div } \vec{A}(\vec{r}) := \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z}$$

erklärt ist. Anschaulich beschreibt die Divergenz die Quellstärke, ist also ein Maß für die Erzeugung bzw. das Verschwinden von Feldlinien. Ist  $\Delta V$  ein Volumenelement bei  $\vec{r}$ , so gilt

$$\lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta V} \oint_{S(\Delta V)} \vec{A} d\vec{S} = \text{div } \vec{A}(\vec{r}) .$$

Zuletzt sei die **Rotation** eines Vektorfeld genannt, sie ist durch das Kreuzprodukt mit den Nabla-Differentialoperator  $\vec{\nabla}$  erklärt. Anschaulich beschrieben gibt die Rotation die Wirbelstärke eines Vektorfelds an, sie ist also ein Maß für die Geschlossenheit der Feldlinien. Explizit lässt sie sich in kartesischen Koordinaten durch

$$\text{rot } \vec{A} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \left( \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}, \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}, \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right)$$

angeben. Sei  $\Delta S$  ein Flächenelement bei  $\vec{r}$  und  $\hat{n}$  der zugehörige Normalenvektor auf dieser Fläche, dann gilt

$$\lim_{\Delta S \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta S} \oint_{C(\Delta S)} \vec{A} d\vec{s} = \text{rot } \vec{A}(\vec{r}) \cdot \hat{n} .$$

Aus der Theorie der Integration auf Mannigfaltigkeiten sind aus der Mathematik zwei wichtige Spezialfälle an Integralsätzen zu nennen:

$$\text{Satz von Gauß: } \oint_{S(V)} \vec{A} d\vec{S} = \iiint_V \text{div } \vec{A} d\vec{r} = \iiint_V (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) d\vec{r}$$

$$\text{Satz von Stokes: } \oint_{C(S)} \vec{A} d\vec{s} = \iint_S \text{rot } \vec{A} d\vec{S} = \iint_S (\vec{\nabla} \times \vec{A}) d\vec{S}$$

Eine wichtige Beziehung herrscht nun zwischen den zuvor besprochenen konservativen Kraftfeldern und den Wirbeleigenschaften eines Kraftfelds.

**Satz 7:** Ein nicht singuläres Kraftfeld  $\vec{F}(\vec{r})$  ist genau dann konservativ, wenn  $\text{rot } \vec{F} = \vec{0}$  überall gilt, d.h. das Kraftfeld  $\vec{F}$  rotationsfrei ist.

## 1. Klassische Newtonsche Mechanik

---

*Beweis.* • „ $\Rightarrow$ “: Ist  $\vec{F}$  konservativ, so gibt es eine Darstellung in Form von  $\vec{F} = -\vec{\nabla}V$  durch ein Potential. Explizites Nachrechnen liefert dann, dass  $\text{rot } \vec{F} = \vec{\nabla} \times \vec{F} = \vec{\nabla} \times \vec{\nabla}V = 0$  ist.<sup>6</sup>

• „ $\Leftarrow$ “: Sei umgekehrt  $\text{rot } \vec{F} = \vec{0}$ , dann betrachte einen beliebigen geschlossenen Weg  $C$ . Nach dem Integralsatz von Stokes gilt dann

$$\oint_C \vec{F} d\vec{s} = \iint_S \text{rot } \vec{F} d\vec{S} = \vec{0}.$$

Damit erhalten wir bereits die Aussage des Satzes. □

**Bemerkung:** Man beachte stets, dass das Potential  $V(\vec{r})$  eines Kraftfelds  $\vec{F}(\vec{r})$  nur bis auf eine additive Konstante bestimmt ist.

### 1.3.3. Beispiele für konservative Kräfte

Jede **Zentralkraft**, wobei das Zentrum im Ursprung  $\vec{0}$  liegt, ist konservativ. Kraft und Potential sind in diesem Fall durch

$$\vec{F}(\vec{r}) = f(r)\hat{r} \quad \text{und} \quad V(\vec{r}) = V(r) = -\int^r f(r) dr$$

gegeben. Um dies zu zeigen, rechnet man leicht nach, dass

$$\frac{\partial V}{\partial x} = \frac{\partial V}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} = V'(r) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = V'(r) \cdot \frac{1}{2} \frac{2x}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = V'(r) \cdot \frac{x}{r}$$

mit  $V'(r) = -f(r)$  gilt. Also folgt  $-\vec{\nabla}V = -V'(r)\frac{\vec{r}}{r} = -V'(r)\hat{r} = f(r)\hat{r} = \vec{F}$ , also erhalten wir eine gültige Potentialdarstellung unserer Zentralkraft, und damit ist diese konservativ.

Speziell für die **Gravitationskraft** mit einer Masse  $m_2$  im Ursprung  $\vec{0}$  findet sich so

$$\vec{F}_{\text{grav}} = -G \frac{m_2 m_1}{r^2} \hat{r} = f(r)\hat{r}$$

für das Kraftfeld, was nach obiger Gleichung auf das zugehörige Gravitationspotential führt:

$$V(r) = -\int^r f(s) ds = Gm_1 m_2 \int^r \frac{ds}{s^2} = -G \frac{m_1 m_2}{r}.$$

Ein weitere Beispiel ist im Zusammenhang mit dem zuvor besprochenen **harmonischen Oszillator** gegeben. Im eindimensionalen Fall ist das Kraftfeld durch  $\vec{F} = (F_x, 0, 0)$  bestimmt, wobei  $F_x = -kx$  ist, also lautet das Potential  $V(r) = \frac{k}{2}x^2$ . In mehreren Dimensionen verallgemeinert sich dieses dann einfach zu

$$V(\vec{r}) = \frac{k}{2}(\vec{r} - \vec{r}_0)^2.$$

---

<sup>6</sup>Man kann das Verschwinden der Rotation in diesem Fall auch eleganter aus der de Rham-Kohomologie folgern, für nähere Informationen siehe beispielsweise Jänich: „Vektoranalysis“.

### 1.3.4. Der Energiesatz für einen Massepunkt

Wir betrachten ein Teilchen unter der Wirkung einer zeitunabhängigen, konservativen Kraft  $\vec{F}$ , es folgt

$$\begin{aligned} m\ddot{\vec{r}}(t) &= \vec{F}(\vec{r}(t)) = -\vec{\nabla}V(\vec{r}(t)) \\ \iff \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}^2 \right) &= m\ddot{\vec{r}} \cdot \dot{\vec{r}} = -\vec{\nabla}V(\vec{r}(t)) \cdot \dot{\vec{r}}(t) = -\frac{d}{dt} V(\vec{r}(t)) \\ \iff \frac{d}{dt} \underbrace{\left( \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 + V(\vec{r}(t)) \right)}_{\text{Energie } E} &= 0, \end{aligned}$$

d.h. die Energie ist zeitlich konstant längs der Bewegung  $\vec{r}(t)$ . Wir haben somit gezeigt:

**Satz 8:** Die Gesamtenergie  $E = T + V$  ist eine Erhaltungsgröße.

Man beachte, dass sich mit Hilfe des Energiesatzes schon einige qualitative Schlüsse über die Bewegung ziehen lassen, denn für eine kinetische Energie  $T = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 \geq 0$  folgt, dass  $V(\vec{r}) \leq E$  für vorgegebenes  $E$  sein muss. Mit anderen Worten kann sich die Bewegung nur in jenen Raumbereichen abspielen, in denen die potentielle Energie  $V(\vec{r}) \leq E$  ist. Während der Bewegung findet ständig eine Umwandlung von kinetischer Energie in potentielle Energie statt und umgekehrt. Im Falle einer eindimensionalen Bewegung ist die Bewegung sogar vollständig durch das Potential  $V(x)$  bei vorgegebener Gesamtenergie  $E$  bestimmt:

$$\begin{aligned} E = T + V = \frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) &\iff \dot{x} = \frac{dx}{dt} = \sqrt{\frac{2}{m}(E - V(x))} \\ \implies x(t) &= \int^x \frac{dx'}{\sqrt{\frac{2}{m}(E - V(x'))}} + C. \end{aligned}$$

**Bemerkung:** • Sei  $\vec{F} = \vec{F}(\vec{r}, t)$  ein konservatives Kraftfeld, aber explizit zeitabhängig. Dann gilt für das zugehörige Potential  $V = V(\vec{r}, t)$

$$\frac{d}{dt} V(\vec{r}(t), t) = \frac{\partial V}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \dots + \frac{\partial V}{\partial t} = \vec{\nabla}V \cdot \dot{\vec{r}} + \frac{\partial V}{\partial t}.$$

Aus der Newtonschen Bewegungsgleichung erhält man dann durch Multiplikation mit  $\dot{\vec{r}}$

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 \right) = -\vec{\nabla}V \cdot \dot{\vec{r}} = -\frac{d}{dt} V(\vec{r}(t), t) + \frac{\partial V}{\partial t} \iff \frac{d}{dt} \underbrace{\left( \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 + V(\vec{r}(t), t) \right)}_{\text{Energie } E = E(t)} = \frac{\partial V}{\partial t}$$

- Betrachte nun ein Kraftfeld der Form  $\vec{F} = \vec{F}_{\text{kons}} + \vec{F}_{\text{R}} = -\vec{\nabla}V + \vec{F}_{\text{R}}$ , wobei der zusätzliche Term  $\vec{F}_{\text{R}}$  beispielsweise eine Reibungskraft  $\vec{K}_{\text{R}} = -b\dot{\vec{r}}$  sein kann. Hier folgt dann

$$m\ddot{\vec{r}} = -\vec{\nabla}V - b\dot{\vec{r}} \iff \frac{d}{dt} \left( \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 + V \right) = -b\dot{\vec{r}}^2,$$

hier nimmt also  $T + V$  ständig ab, d.h. es kommt zu einem Energieverlust durch Reibung. Es sei angemerkt, dass die Energie natürlich nicht verloren geht, sondern auf die reibungsverursachenden Teilchen übergeht - lediglich aus Sicht des eigentlich interessierenden Massepunkts geht Energie verloren.

### 1.3.5. Impulssatz für ein Teilchen

Nach dem zweiten Newtonschen Axiom für den Zusammenhang der Bewegungsgröße und einer Kraft erhalten wir direkt

$$\frac{d}{dt}\vec{p} = \vec{F} ,$$

ist also die einwirkende Kraft  $\vec{F} = 0$ , so ist  $\vec{p}$  konstant - demnach gilt also **Impulserhaltung**.

### 1.3.6. Drehimpuls

Wir definieren allgemein zu einem beliebigen Vektor  $\vec{a}$  sein Moment bezüglich des Ursprungs  $\vec{0}$  als Kreuzprodukt  $\vec{r} \times \vec{a}$ . Speziell das Moment des Impulsvektors  $\vec{p}$  heißt **Drehimpuls**  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ , während das Moment des Kraftvektors als **Drehmoment**  $\vec{M} = \vec{r} \times \vec{F}$  bezeichnet wird.

Es gilt dabei, dass  $|\vec{L}| = |\vec{r}| \cdot |\vec{p}| \cdot \sin \varphi = |\vec{r}| \cdot |\vec{p}_\perp|$  ist, wobei  $\varphi$  der Winkel zwischen den Vektoren  $\vec{r}$  und  $\vec{p}$  ist, sowie  $\vec{p}_\perp$  der orthogonal bezüglich  $\vec{r}$  stehende Anteil vom Impuls  $\vec{p}$ . Mit anderen Worten ist der Drehimpuls also proportional jener Impulskomponente, die eine Drehung um den Ursprung beschreibt. Analog ist das auch das Drehmoment proportional jeder Kraftkomponente, deren Änderung der Bewegungsgröße analog eine Drehung um  $\vec{0}$  bewirkt. Es gilt dabei außerdem der Zusammenhang

$$\frac{d}{dt}\vec{L} = \frac{d}{dt}(\vec{r} \times \vec{p}) = \underbrace{\dot{\vec{r}} \times \vec{p}}_{\dot{\vec{r}} \times m\dot{\vec{r}}=0} + \vec{r} \times \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{r} \times \vec{F} = \vec{M} .$$

**Satz 9:** Der Drehimpuls eines Teilchens ändert sich nach Maßgabe des Drehmoments, bei verschwindendem Drehmoment ist der Drehimpuls eine Erhaltungsgröße.

**Beispiel:** Für  $\vec{F} = 0$  verschwindet auch das Drehmoment  $\vec{M}$ . Ist  $\vec{F}$  dagegen eine Zentralkraft, also  $\vec{F} = f(r)\hat{r}$ , so folgt  $\vec{M} = \vec{r} \times \vec{F} = \vec{r} \times \vec{r}^1 f(r) = 0$ , d.h. in einer Zentralkraft bleibt der Drehimpuls  $\vec{L}$  entlang einer Bewegung konstant. Ist die Richtung des Vektors  $\vec{L}$  konstant, so bewegt sich der betrachtete Massepunkt in einer Ebene, die orthogonal zu  $\vec{L}$  steht. Im Falle von  $|\vec{L}|$  konstant verifiziert man dann leicht

$$|\vec{L}| dt = m|\vec{r} \times \dot{\vec{r}}| dt = mr|\dot{\vec{r}}| dt \sin \varphi \implies dA = \frac{|\vec{L}|}{2m} dt \implies \frac{dA}{dt} = \frac{|\vec{L}|}{2m} = \text{konst} ,$$

d.h. der Radiusvektor überstreicht pro Zeiteinheit gleiche Flächen, falls eine Zentralkraft vorliegt. Der Vektor  $\vec{r}$  wird dabei vom Zentrum der Kraft aus definiert (vgl. zweites Keplersches Gesetz, auf das wir später genauer eingehen).

### 1.3.7. Bewegungsgesetze für ein System von Massepunkten

Nun betrachten wir ein System von  $N$  Massepunkten, wobei  $\vec{r}_i$  die Koordinaten,  $\dot{\vec{r}}_i$  die Geschwindigkeiten und  $m_i$  die Massen der Teilchen für  $i = 1, \dots, N$  seien. Die Kraft, welche dann auf ein einzelnes Teilchen  $i$  einwirkt, ist beschrieben durch

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i(t) = \vec{F}_i = \vec{F}_i^{(a)}(\vec{r}_i, t) + \sum_{i \neq j} \vec{F}_{ij}(\vec{r}_i, \vec{r}_j, t)$$

Einige der vorigen Gesetze können wir nun auf ein Massepunkt-System erweitern:

- *Impulssatz:* Es ist  $\vec{p} = \sum_i \vec{p}_i = \sum_i m_i \dot{\vec{r}}_i$  der Gesamtimpuls, für den gilt

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \sum_i m_i \ddot{\vec{r}}_i = \sum_i \vec{F}_i^{(a)}(\vec{r}_i, t) + \sum_{i \neq j} \vec{F}_{ij}(\vec{r}_i, \vec{r}_j, t) = \sum_i \vec{F}_i^{(a)}(\vec{r}_i, t),$$

da sich die Zwei-Teilchen-Wechselwirkungen paarweise aufheben. Im Falle, dass die Summe aller äußeren Kräfte verschwindet, ist der Gesamtimpuls somit konstant.

- *Schwerpunktsatz:* Der Schwerpunkt eines Systems und die zugehörige Bewegungsgleichung lauten

$$\vec{R} = \frac{\sum_i m_i \vec{r}_i}{\sum_i m_i} = \frac{\sum_i m_i \vec{r}_i}{m_{\text{ges}}} \quad \Longrightarrow \quad m_{\text{ges}} \ddot{\vec{R}} = \sum_i m_i \ddot{\vec{r}}_i = \sum_i \vec{F}_i^{(a)}(\vec{r}_i, t),$$

d.h. im Falle eines abgeschlossenen Systems - also keine resultierende äußere Kraft - bewegt sich der Schwerpunkt kräftefrei, sprich gleichförmig geradlinig.

- *Gesamtdrehimpuls bezüglich des Koordinatenursprungs:* Es ist  $\vec{L} = \sum_i \vec{L}_i = \sum_i \vec{r}_i \times \vec{p}_i = \sum_i m_i \vec{r}_i \times \dot{\vec{r}}_i$  der Gesamtdrehimpuls eines Systems von Massepunkten. Für die zeitliche Änderung gilt dabei

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{L}}{dt} &= \sum_i m_i \left( \overbrace{\dot{\vec{r}}_i \times \dot{\vec{r}}_i}^0 + \vec{r}_i \times \ddot{\vec{r}}_i \right) = \sum_i \vec{r}_i \times m_i \ddot{\vec{r}}_i \\ &= \sum_i \vec{r}_i \times \vec{F}_i^{(a)} + \sum_{i \neq j} \vec{r}_i \times \vec{F}_{ij}(\vec{r}_i, \vec{r}_j, t), \end{aligned}$$

wobei der zweite Summand wegen

$$\sum_{i \neq j} \vec{r}_i \times \vec{F}_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (\vec{r}_i \times \vec{F}_{ij} + \vec{r}_j \times \vec{F}_{ji}) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \times \vec{F}_{ij} = 0$$

verschwindet, also folgt  $\frac{d\vec{L}}{dt} = \sum_i \vec{r}_i \times \vec{F}_i^{(a)} = \sum_i \vec{M}_i = \vec{M}$ . Der Gesamtdrehimpuls ist also erhalten, wenn das Gesamtdrehmoment verschwindet, in völliger Analogie zur Beziehung von Impuls und Kraft.

- *Energiesatz:* Wir betrachten die verrichtete Arbeit für die Verschiebung von  $P_0$  nach  $P_1$  hin, hier gilt

$$\begin{aligned} A_{P_0 \rightarrow P_1} &= \sum_i \int_{P_0}^{P_1} d\vec{r}_i \vec{F}_i^{(a)} + \sum_{i \neq j} \int_{P_0}^{P_1} d\vec{r}_i \vec{F}_{ij} = \sum_i \int_{P_0}^{P_1} d\vec{r}_i m_i \ddot{\vec{r}}_i \\ &= \sum_i \int_{t_0}^{t_1} dt \frac{d\vec{r}_i}{dt} m_i \ddot{\vec{r}}_i = \sum_i \int_{t_0}^{t_1} dt \dot{\vec{r}}_i \cdot \ddot{\vec{r}}_i m_i = \sum_i \int_{t_0}^{t_1} dt \frac{m_i}{2} \frac{d}{dt} \dot{\vec{r}}_i^2 \\ &= \sum_i \int_{t_0}^{t_1} dt \dot{T}_i = \sum_i (T_i(t_1) - T_i(t_0)) = T(t_1) - T(t_0) \end{aligned}$$

Um von hier aus weiterzukommen, macht man zwei Annahmen: Zum einen sei die äußere Kraft konservativ und zeitunabhängig, es gilt also  $\vec{F}_i^{(a)} = -\vec{\nabla}_i V_i(\vec{r}_i)$ , zum anderen gelte

für die inneren Kräfte  $\vec{F}_{ij} = -\vec{\nabla}_i V_{ij}(|\vec{r}_{ij}|)$  mit  $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ , d.h. sie sind nur vom Abstand abhängig, nicht aber von der Richtung. In diesem Spezialfall gilt dann

$$\begin{aligned} A_{P_0 \rightarrow P_1}^{(a)} &= - \sum_i \int_{P_0}^{P_1} d\vec{r}_i \vec{\nabla}_i V_i^{(a)}(\vec{r}_i) = - \sum_i \int_{t_0}^{t_1} dt \dot{\vec{r}}_i \vec{\nabla}_i V_i^{(a)}(\vec{r}_i) \\ &= - \sum_i \int_{t_0}^{t_1} dt \frac{dV_i^{(a)}(\vec{r}_i)}{dt} = - \sum_i \left( V_i^{(a)}(\vec{r}_i(t_1)) - V_i^{(a)}(\vec{r}_i(t_0)) \right) \end{aligned}$$

für den Anteil der äußeren Kräfte, während für die Zwei-Teilchen-Wechselwirkungen

$$\begin{aligned} A_{P_0 \rightarrow P_1} &= - \sum_{i \neq j} \int_{P_0}^{P_1} d\vec{r}_i \vec{F}_{ij} = - \sum_{i \neq j} \int_{t_0}^{t_1} dt \dot{\vec{r}}_i \vec{\nabla}_{ij} V_{ij}(\vec{r}_{ij}) \\ &= - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int_{t_0}^{t_1} dt (\dot{\vec{r}}_i - \dot{\vec{r}}_j) \vec{\nabla}_{ij} V_{ij}(\vec{r}_{ij}) = - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \left( V_{ij}(\vec{r}_{ij}(t_1)) - V_{ij}(\vec{r}_{ij}(t_0)) \right) \end{aligned}$$

wegen  $\vec{\nabla}_i V_{ij}(\vec{r}_{ij}) = \vec{\nabla}_i V_{ij}(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = \vec{\nabla}_{ij} V_{ij}(\vec{r}_{ij})$ . Für die kinetische Energie folgt damit dann

$$T(t_1) - T(t_0) = - \sum_i V_i^{(a)}(\vec{r}_i) \Big|_{t_0}^{t_1} - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}(\vec{r}_{ij}) \Big|_{t_0}^{t_1},$$

sodass sich für die Gesamtenergie schließlich

$$E(t_1) = T(t_1) + \sum_i V_i^{(a)}(\vec{r}_i(t_1)) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}(\vec{r}_{ij}(t_1)) = E(t_0)$$

ergibt. Führen wir  $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sum_i V_i^{(a)}(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$  als Abkürzung ein, so können wir kurz  $T + V = E$  konstant formulieren - die Gesamtenergie ist also unter den obigen Annahmen eine weitere Erhaltungsgröße.

Betrachten wir nun zwei Körper, die lediglich untereinander wechselwirken, aber keiner äußeren Kraft ausgesetzt sind. Hier haben wir als Bewegungsgleichungen

$$m_1 \ddot{\vec{r}}_1 = \vec{F}_1 = \vec{F}_{12} \quad \text{und} \quad m_2 \ddot{\vec{r}}_2 = \vec{F}_2 = \vec{F}_{21} = -\vec{F}_{12}$$

für die einzelnen Körper. Als Zwei-Körper-Problem bietet es sich an, die Schwerpunktskoordinaten zu verwenden. Für den Massenmittelpunkt  $\vec{R}$  des Systems gilt bekanntlich

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{M} \quad \implies \quad \vec{r}_1 = \vec{R} + \frac{m_2}{M} \vec{r} \quad \text{und} \quad \vec{r}_2 = \vec{R} - \frac{m_1}{M} \vec{r}$$

für  $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 = \vec{r}_{12}$ , und wegen  $m_1 \ddot{\vec{r}}_1 + m_2 \ddot{\vec{r}}_2 = 0$  folgt  $M \ddot{\vec{R}} = 0$ , also  $\ddot{\vec{R}} = \vec{V}$  konstant und  $\vec{R}(t) = \vec{V}t + \vec{R}_0$ , d.h. der Schwerpunkt des Zwei-Körper-Systems vollführt eine gleichförmig geradlinige Bewegung, demnach ist auch der Gesamtimpuls  $\vec{P}$  konstant. Weiter gilt

$$m_1 \left( \ddot{\vec{R}} + \frac{m_2}{M} \ddot{\vec{r}} \right) - m_2 \left( \ddot{\vec{R}} - \frac{m_1}{M} \ddot{\vec{r}} \right) = 2\vec{F}_{12} \quad \implies \quad \vec{F}_{12} = \frac{m_1 m_2}{M} \ddot{\vec{r}} = \mu \ddot{\vec{r}},$$

wobei  $\mu$  die reduzierte Masse des System bezeichnet. Somit erhält man durch die Schwerpunktskoordinaten ein effektives Einkörperproblem mit der Bewegungsgleichung

$$\mu \ddot{\vec{r}} = \vec{F}_{12} ,$$

auf welches sich die zuvor behandelten Erhaltungssätze anwenden lassen. Die Wechselwirkungskraft  $\vec{F}_{12}$  sei aus dem Potential  $V_{12}(\vec{r}_{12}) = V_{12}(\vec{r})$  abgeleitet, also  $\vec{F}_{12} = -\vec{\nabla}_1 V_{12}$ .

Der Impulssatz liefert dann  $\vec{P} = M\dot{\vec{R}}$  konstant und der Schwerpunktsatz  $\ddot{\vec{R}}(t) = \vec{V}t + \ddot{\vec{R}}_0$ , da keine äußere Kraft am Schwerpunkt anliegt. Der Drehimpulssatz ergibt

$$\vec{L} = M\vec{R} \times \dot{\vec{R}} + 2\mu\vec{r} \times \dot{\vec{r}} = \text{konst}$$

wobei allgemein (siehe Einschub) für  $\vec{L} = M\vec{R} \times \dot{\vec{R}} + \sum_i m_i \vec{\xi}_i \times \dot{\vec{\xi}}_i$  gilt  $\frac{d}{dt} \vec{L} = \vec{M}^{(a)} = 0$ , dabei sind die  $\xi_i$  die Koordinaten relativ zum Schwerpunkt. Für den Energiesatz gilt schließlich noch

$$E = T + V = \sum_i \frac{m_i}{2} \dot{\vec{r}}_i^2 + \sum_i V_i^{(a)} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} = \text{konst} ,$$

wobei der mittlere der drei Terme hier verschwindet. In Schwerpunktkoordinaten ergibt sich dann

$$E = \frac{\mu}{2} \dot{\vec{R}}^2 + \frac{\mu}{2} \dot{\vec{r}}^2 + V(\vec{r}) = \text{konst} \quad \implies \quad \frac{\mu}{2} \dot{\vec{r}}^2 + V(\vec{r}) = \text{konst}$$

für die Energieerhaltung.

### Einschub: Zerlegung des Gesamtdrehimpulses

Bevor wir die Bewegung in einem Zentralfeld behandeln, soll für ein Mehr-Teilchen-System die Zerlegung des Gesamtdrehimpulses in den Schwerpunkt- und Relativdrehimpuls genauer untersucht werden, die bereits oben verwendet wurde. Ausgehend vom Schwerpunkt  $\vec{R}$  ist die absolute Koordinate eines Teilchens durch  $\vec{r}_i = \vec{R} + \vec{\xi}_i$  gegeben, für den Gesamtdrehimpuls gilt

$$\begin{aligned} \vec{L} &= \sum_i m_i \vec{r}_i \times \dot{\vec{r}}_i = \sum_i m_i (\vec{R} + \vec{\xi}_i) \times (\dot{\vec{R}} + \dot{\vec{\xi}}_i) \\ &= \sum_i m_i (\vec{R} \times \dot{\vec{R}}) + \sum_i (\vec{R} \times m_i \dot{\vec{\xi}}_i) + \sum_i (m_i \vec{\xi}_i \times \dot{\vec{R}}) + \sum_i m_i (\vec{\xi}_i \times \dot{\vec{\xi}}_i) . \end{aligned}$$

Wegen  $\sum_i m_i \vec{\xi}_i = 0$  folgt auch  $\sum_i m_i \dot{\vec{\xi}}_i = 0$  und dies liefert dann insgesamt die Zerlegung

$$\vec{L} = \overbrace{M(\vec{R} \times \dot{\vec{R}})}^{\text{Schwerpunkt}} + \overbrace{\sum_i m_i (\vec{\xi}_i \times \dot{\vec{\xi}}_i)}^{\text{Relativkoordinaten}} .$$

## 1.4. Bewegung im Zentralfeld und das Keplerproblem

Im folgenden Abschnitt soll nun die Bewegung von Körpern in einem Zentralfeld genauer untersucht werden, wobei wir insbesondere die elliptische Form der Planetenbewegung gemäß den Keplerschen Gesetzen ableiten werden. Im Wesentlichen betrachten wir somit zwei Körper unter

## 1. Klassische Newtonsche Mechanik

---

dem Einfluss einer isotropen Zentral-Wechselwirkung  $V_{12}(\vec{r}) = V_{12}(|\vec{r}|) = V_{12}(r)$  oder äquivalent einen Körper im Zentralfeld eines statischen Potentials, was auf die Bewegungsgleichung

$$\mu \ddot{\vec{r}} = -\vec{\nabla} V(r)$$

führt. Ein besonderer Spezialfall eines Zentralfelds sind Potentiale der Form  $V(r) = c_n r^n$ . Wir betrachten speziell  $c_n = -\alpha$  und  $n = -1$ , also  $V(r) = -\frac{\alpha}{r}$ . Die Lösung der Bewegungsgleichung lässt sich durch den Energie- und Drehimpulssatz

$$E = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}^2 + V(r) = \text{konst} \quad \text{und} \quad \vec{L} = m \vec{r} \times \dot{\vec{r}} = \text{konst}$$

herleiten, wobei  $\vec{L}$  bezüglich des Ursprungs  $\vec{0}$  zu verstehen ist. Bleibt der Drehimpuls  $\vec{L}$  erhalten, so wissen wir bereits, dass die Bewegung in einer Ebene orthogonal zu  $\vec{L}$  stattfindet. Daher wählen wir nun zweidimensionale ebene Polarkoordinaten  $r, \vartheta$  relativ zu  $\vec{0}$  als Koordinatensystem mit den zugehörigen Einheitsvektoren  $\hat{r}$  und  $\hat{\vartheta}$ . Für die Umrechnung von kartesischen Koordinaten  $(x, y)$  in Polarkoordinaten  $(r, \vartheta)$  gilt dann

$$\vec{r} = r \hat{r} \quad x = r \cos \vartheta \quad y = r \sin \vartheta ,$$

also folgt für die zeitliche Ableitung des Ortsvektors  $\vec{r}$  in Polarkoordinaten

$$\dot{\vec{r}} = \frac{d}{dt} r(t) \hat{r} = \frac{dr}{dt} \hat{r} + r \frac{d\hat{r}}{dt} = \dot{r} \hat{r} + r \dot{\hat{r}} ,$$

wobei noch  $\dot{\hat{r}}$  zu bestimmen ist. Es gilt  $\hat{r}^2 = 1$ , also folgt  $2\hat{r}\dot{\hat{r}} = \frac{d}{dt}(\hat{r}^2) = 0$ , mit anderen Worten stehen also  $\dot{\hat{r}} \perp \hat{r}$  aufeinander, sodass folglich  $\dot{\hat{r}} = \beta \hat{\vartheta}$  gelten muss. Weiterhin gilt für das Quadrat des Differentials

$$(d\vec{r})^2 = (\hat{r} dr)^2 + (r \hat{\vartheta} d\vartheta)^2 = dr^2 + r^2 d\vartheta^2$$

was direkt auf die beiden Identitäten

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\vec{r}}{dt}\right)^2 &= \left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + r^2 \left(\frac{d\vartheta}{dt}\right)^2 = \dot{r}^2 + r^2 \dot{\vartheta}^2 \quad \text{und} \\ \left(\frac{d\vec{r}}{dt}\right)^2 &= (\dot{r} \hat{r} + r \beta \hat{\vartheta})^2 = \dot{r}^2 + r^2 \beta^2 + \dot{r} r \beta \hat{r} \cdot \hat{\vartheta} = \dot{r}^2 + r^2 \beta^2 \end{aligned}$$

führt. Der Vergleich beider Identitäten liefert dann  $\beta = \dot{\vartheta}$  und somit erhalten wir schließlich  $\dot{\vec{r}} = \dot{r} \hat{r} + r \dot{\vartheta} \hat{\vartheta}$  als Ableitung des Ortsvektors. Einsetzen in den Drehimpuls-Vektor liefert

$$\vec{L} = m r \hat{r} \times (\dot{r} \hat{r} + r \dot{\vartheta} \hat{\vartheta}) = m r^2 \dot{\vartheta} (\hat{r} \times \hat{\vartheta}) ,$$

woraus insbesondere  $L = |\vec{L}| = m r^2 \dot{\vartheta} \iff \dot{\vartheta} = \frac{L}{m r^2}$  folgt. Die Gesamtenergie können wir damit als

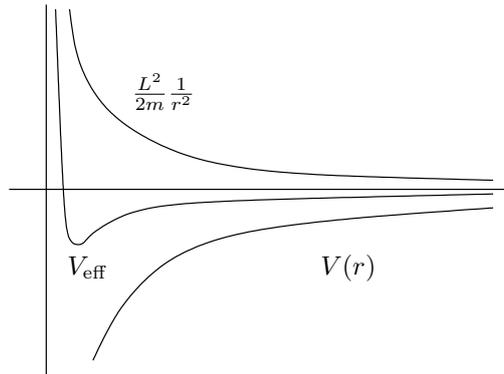
$$E = \frac{m}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\vartheta}^2) + V(r) = \frac{m}{2} \dot{r}^2 + \underbrace{\frac{L^2}{2m r^2}}_{V_{\text{eff}}(r)} + V(r) = \frac{m}{2} \dot{r}^2 + V_{\text{eff}}(r)$$

darstellen, und durch entsprechendes Umformen erhalten wir daraus die Differentialgleichung

$$\frac{dr}{dt} = \sqrt{\frac{2}{m}(E - V_{\text{eff}}(r))} \iff dt = \frac{dr}{\sqrt{\frac{2}{m}(E - V_{\text{eff}}(r))}}$$

$$\implies t = \int^r \frac{dr'}{\sqrt{\frac{2}{m}(E - V_{\text{eff}}(r))}} + C.$$

Man erhält also eine Abhängigkeit  $t = t(r)$  und somit (zumindest lokal) auch umgekehrt  $r = r(t)$ , womit sich wiederum  $\vartheta = \vartheta(t)$  berechnen lässt. Bevor wir aber diese beiden Funktionen  $r = r(t)$  und  $\vartheta = \vartheta(t)$  bestimmen, analysieren wir die Gleichung für  $\dot{r}$  genauer.



Falls also  $E < 0 = V_{\infty}$  ist, dann ist die Bewegung auf den Raumbereich  $r_1 < r < r_2$  beschränkt, analog findet die Bewegung für  $E > 0$  nur in  $r_0 < r < \infty$  statt.

Nun führen wir eine konkrete Berechnung für den Fall  $V(r) = -\frac{\alpha}{r}$  durch, wobei hier nur die Bahnkurve berechnet werden soll. Sei  $r = r(\vartheta)$ , dann haben wir

$$\frac{dr}{dt} = \dot{\vartheta} \frac{dr}{d\vartheta} = \frac{L}{mr^2} \frac{dr}{d\vartheta} = \sqrt{\frac{2}{m}(E - V_{\text{eff}}(r))} \iff \frac{dr}{d\vartheta} = \frac{mr^2}{L} \sqrt{\frac{2}{m}(E - V_{\text{eff}}(r))} = T(r)$$

und diese Differentialgleichung lässt sich durch

$$d\vartheta = \frac{dr}{T(r)} \implies \vartheta = \int^r \frac{dr'}{T(r')} + C = \int^r \frac{dr'}{r'^2 \sqrt{\frac{2m}{L^2}(E - \frac{L^2}{2mr'^2} + \frac{\alpha}{r'})}} + C$$

lösen. Man setze nun  $u = \frac{1}{r'}$  mit  $du = -r'^{-2} dr'$ , also gilt

$$\vartheta = - \int^{\frac{1}{r}} \frac{du}{\sqrt{\frac{2m}{L^2}(E - \frac{L^2}{2m}u^2 + \alpha u)}} + C = - \int^{\frac{1}{r}} \frac{du}{\sqrt{\frac{2m}{L^2}E + \frac{2m\alpha}{L^2}u - u^2}} + C.$$

Durch Definition von  $a = \frac{2m}{L^2}E$ ,  $b = \frac{m\alpha}{L^2}$  und  $c = a + b^2$  nimmt das Integral dann die Form

$$\int^{\frac{1}{r}} \frac{du}{\sqrt{a + 2bu - u^2}} = \int^{\frac{1}{r}} \frac{du}{\sqrt{a + b^2} \sqrt{1 - \frac{(u-b)^2}{a+b^2}}} = \frac{1}{\sqrt{c}} \int^{\frac{1}{r}} \frac{du}{\sqrt{1 - \left(\frac{u-b}{c}\right)^2}},$$

wobei die Wurzel aus  $c$  wegen

$$c = a + b^2 = \frac{2m}{L^2}E + \frac{m^2\alpha^2}{L^4} = \frac{2m}{L^2} \left( E + \frac{m^2\alpha^2}{2L^2} \right) = \frac{2m}{L^2}(E - V_{\text{max}}) > 0$$

## 1. Klassische Newtonsche Mechanik

---

wohldefiniert ist. Substituieren wir noch  $v = \frac{u-b}{\sqrt{c}}$  mit  $dv = \frac{1}{\sqrt{c}} du$ , so folgt

$$\int^{\frac{1-b}{\sqrt{c}}} \frac{dv}{\sqrt{1-v^2}} = \arcsin \left( \frac{1}{\sqrt{c}} \left[ \frac{1}{r} - b \right] \right)$$

für das Integral, und damit ergibt sich schließlich für die Funktion

$$\begin{aligned} \vartheta(r) &= -\arcsin \left( \frac{1}{\sqrt{c}} \left[ \frac{1}{r} - b \right] \right) + C = \frac{\pi}{2} - \arcsin \left( \frac{1}{\sqrt{c}} \left[ \frac{1}{r} - b \right] \right) \underbrace{-\frac{\pi}{2} + C}_{C'} \\ &= \arccos \left( \frac{1}{\sqrt{c}} \left[ \frac{1}{r} - b \right] \right) + C'. \end{aligned}$$

Man wähle die Anfangsbedingungen  $(r_0, \vartheta_0)$  nun so, dass die additive Konstante  $C'$  verschwindet, dann hat man

$$\begin{aligned} \vartheta(r) = \arccos \left( \frac{1}{\sqrt{c}} \left[ \frac{1}{r} - b \right] \right) &\iff \cos \vartheta = \frac{1}{\sqrt{c}} \left[ \frac{1}{r} - b \right] \iff \frac{1}{r} = \sqrt{c} \cos \vartheta + b \\ \iff r(\vartheta) = \frac{1}{b + \sqrt{c} \cos \vartheta} &= \frac{\frac{1}{b}}{1 + \frac{\sqrt{c}}{b} \cos \vartheta} = \frac{p}{1 + \varepsilon \cos \vartheta}, \end{aligned}$$

wobei die neue Größen  $p$  und  $\varepsilon$  durch

$$p = \frac{1}{b} = \frac{L^2}{m\alpha^2} \quad \text{und} \quad \varepsilon = \frac{\sqrt{c}}{b} = \frac{L^2}{m\alpha} \sqrt{\frac{2m}{L^2} \left( E + \frac{m\alpha^2}{2L^2} \right)} = \sqrt{1 + \frac{2L^2}{m\alpha^2} E}$$

gegeben sind. Die Bahngleichung ist gegeben durch die Parameterform  $r(\vartheta) = \frac{p}{1 + \varepsilon \cos \vartheta}$ , die einen Kegelschnitt darstellt. Für die Form gilt dabei

$$\varepsilon = \begin{cases} \varepsilon < 1 & \text{(Ellipse)} : E < 0 \\ \varepsilon > 1 & \text{(Hyperbel)} : E > 0 \end{cases}$$

*Beweis.* In Polarkoordinaten ist  $x = r \cos \vartheta$  und  $y = r \sin \vartheta$ , durch einfach algebraische Umformungen gilt dann

$$\begin{aligned} r + r\varepsilon \cos \vartheta = p &\iff \sqrt{x^2 + y^2} + \varepsilon x = p \iff (1 - \varepsilon^2)x^2 + 2p\varepsilon x + y^2 = p^2 \\ \iff (1 - \varepsilon^2) \left( x^2 + \frac{2p\varepsilon}{1 - \varepsilon^2} x \right) + y^2 &= p^2 \\ \iff (1 - \varepsilon^2) \left( x + \frac{p\varepsilon}{1 - \varepsilon^2} \right)^2 - \frac{p^2\varepsilon^2}{1 - \varepsilon^2} + y^2 &= p^2 \\ \iff (1 - \varepsilon^2)x'^2 + y^2 = \frac{p^2\varepsilon^2}{1 - \varepsilon^2} + p^2 &\quad \text{mit} \quad x' = x + \frac{p\varepsilon}{1 - \varepsilon^2} \\ \iff (1 - \varepsilon^2)x'^2 + y^2 = \frac{p^2}{1 - \varepsilon^2} &\iff \frac{x'^2}{\frac{p^2}{(1 - \varepsilon^2)^2}} + \frac{y^2}{\frac{p^2}{1 - \varepsilon^2}} = 1. \end{aligned}$$

Nun definieren wir weiter  $a^2 = \frac{p^2}{(1 - \varepsilon^2)^2}$  und  $b^2 = \frac{p^2}{1 - \varepsilon^2}$  für  $\varepsilon < 1$  sowie  $b^2 = -\frac{p^2}{1 - \varepsilon^2}$  für  $\varepsilon > 1$ . Falls nun  $\varepsilon < 1$  ist, d.h. die Gesamtenergie  $E < 0$ , dann erhält man als Bahngleichung

$$\frac{x'^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1,$$

welche eine Ellipse um den Mittelpunkt der  $x'$ - $y$ -Ebene beschreibt. □

Mit den obigen Definitionen für  $a^2$  und  $b^2$  erhält man nun direkt noch die Eigenschaften

$$\vec{F}_{\text{RL}} = \frac{1}{\alpha}(\dot{\vec{r}} \times \vec{L}) - \frac{\vec{r}'}{|\vec{r}'|} \quad V(r) = -\frac{\alpha}{r} \quad \frac{d}{dt}\vec{F}_{\text{RL}} = 0$$

für den Vektor  $\vec{F}_{\text{RL}}$ , dieser liegt in der Bahnebene und zwar in der großen Halbachse. Weitere Korrekturen dieser Approximation, besonders durch die spezielle und allgemeine Relativitätstheorie, führen zu einer Perihelverschiebung und zu einer Rosettenbahn.

## 1.5. Bewegung in beschleunigten Bezugssystemen

Als letzten Aspekt der klassischen Newtonschen Mechanik werden wir beschleunigte Bezugssysteme behandeln. Diese haben insofern eine Sonderstellung, da das erste und zweite Newtonsche Axiom nur in Inertialsystemen gültig ist - man erwartet also modifizierte Gesetze bzw. zusätzliche Effekte im Zusammenhang mit Beschleunigung. Es sei vorweggenommen, dass auch in der Relativitätstheorie beschleunigte Bezugssysteme eine Sonderstellung haben. Wie die Newtonsche Theorie ist auch die spezielle Relativitätstheorie nur für Inertialsysteme formuliert, erst die allgemeine Relativitätstheorie erweitert die entsprechenden Konzepte auf beliebige Bezugssysteme.

### 1.5.1. Beziehungen zu einem Inertialsystem

Wir betrachten nun ein Inertialsystem IS mit den Koordinatenachsen KS, die durch  $\hat{n}^{(i)}$  für  $i = 1, 2, 3$  gekennzeichnet sein. Sei weiter  $\Sigma'$  ein beliebig dazu bewegtes (im Allgemeinen also beschleunigtes) Bezugssystem mit Koordinatenachsen KS', benannt gemäß  $\hat{e}^{i'}$  für  $i' = 1, 2, 3$ . Sei dann  $P$  ein Massenpunkt, der sich irgendwie bewegt. Dann betrachten wir die Bewegung dieses Punktes relativ zu den beiden Koordinatensystemen. Grundsätzlich gilt dabei

$$\vec{r}_{\text{IS}}(t) = \vec{a}(t) + \vec{r}'(t) ,$$

wobei  $\vec{a}(t)$  der Verbindungsvektor der Ursprünge der Koordinatensysteme in Richtung  $\Sigma'$  sei, d.h. die Raumkoordinaten von  $P$  relativ zu KS sind

$$r_{\text{IS},i} = a_i + r_i \quad \text{bzw.} \quad \vec{r}_{\text{IS}} = r_{\text{IS},i} \hat{n}^{(i)} .$$

Die Raumkoordinaten von  $P$  relativ zu KS' sind dagegen durch  $r_{i'}$  gegeben. Nach dem zweiten Newtonschen Axiom gilt die Bewegungsgleichung  $m\ddot{r}_{\text{IS},i} = F_i$ , da  $\Sigma$  bzw. KS ein Inertialsystem ist. Wir sind jetzt an  $m\ddot{r}_{i'}$  interessiert, d.h. an der Bewegungsgleichung in beliebig bewegten Bezugssystemen.

Zu jedem Zeitpunkt  $t$  ist die Lage von KS' relativ zu KS durch eine Translation des Nullpunkts  $\vec{0}$  und eine Drehung von KS' bestimmt. Da sowohl  $\{\hat{n}^{(i)} : i = 1, 2, 3\}$  als auch  $\{\hat{e}^{(i')} : i' = 1, 2, 3\}$  eine Basis bilden, gilt

$$\hat{e}^{(i')} = \hat{n}^{(j)} R_{ji'} ,$$

wobei wir die Einsteinsche Summenkonvention verwenden, nach der über einen gleichen oben und unten stehenden Index summiert wird (in diesem Fall also  $\sum_{j=1}^3$ ). Die neun Zahlen  $R_{ji'}$  mit  $i', j = 1, 2, 3$  definieren eine  $3 \times 3$ -Matrix  $R$ , deren Einträge sich explizit durch

$$\hat{n}^{(j)} \cdot \hat{e}^{(i')} = \hat{n}^{(j)} \cdot \hat{n}^{(k)} R_{ki'} = \delta_{jk} R_{ki'} = R_{ji'}$$

## 1. Klassische Newtonsche Mechanik

---

berechnen lassen. Dabei ist  $R$  eine orthogonale Matrix (also  $R^t R = \mathbb{1}$ ), denn es gilt

$$\hat{e}^{(i')} \cdot \hat{e}^{(j')} = (\hat{n}^{(k)} R_{ki'}) (\hat{n}^{(l)} R_{lj'}) = \hat{n}^{(k)} \cdot \hat{n}^{(l)} R_{ki'} R_{lj'} = (R^t)_{i'k} R_{kj'} = (R^t R)_{i'j'} = \delta_{i'j'} .$$

Dann folgt auch automatisch  $\hat{n}^{(i)} = R_{ij} \hat{e}^{(j')}$ . Für einen beliebigen Vektor  $\vec{v}$  gilt die Darstellung  $\vec{v} = v_i \hat{n}^{(i)} = v_{i'} \hat{e}^{(i')}$ , und durch Multiplikation mit  $\hat{n}^{(j)}$  ergibt sich

$$v_i \underbrace{\hat{n}^{(j)} \cdot \hat{n}^{(i)}}_{\delta_{ij}} = v_{i'} \underbrace{\hat{n}^{(j)} \cdot \hat{e}^{(i')}}_{R_{ji'}} \implies v_j = R_{ji'} v_{i'}$$

Daher gilt speziell für den Ortsvektor  $r_{\text{IS},i}(t) = \vec{a}_i(t) + r_i(t)$ , wobei  $\vec{a}$  und  $\vec{R}$  zeitunabhängig sind,

$$r_{\text{IS},i}(t) = a_i(t) + R_{ij'} r_{j'}(t) \implies \dot{r}_{\text{IS},i}(t) = \dot{a}_i(t) + \dot{R}_{ij'} r_{j'} + R_{ij'} \dot{r}_{j'} .$$

Wegen  $R^t R = \mathbb{1}_3$  erhält man nun weiter die Eigenschaft

$$\frac{d}{dt}(R^t R) = \dot{R}^t R + R^t \dot{R} = 0 \iff R^t \dot{R} = -\dot{R}^t R = -(R^t \dot{R})^t ,$$

d.h. die Matrix  $\Omega := R^t \dot{R}$  ist antisymmetrisch, also gilt für die allgemeine Form von  $\Omega$ :

$$\Omega = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_3 & \omega_2 \\ \omega_3 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{pmatrix} = R^t \dot{R} = R^{-1} \dot{R} ,$$

wir interpretieren diese  $\omega_i$  als die Komponenten eines Vektors relativ zu  $\text{KS}'$ , also  $\vec{\omega} = \omega_1 \hat{e}^{(1)} + \omega_2 \hat{e}^{(2)} + \omega_3 \hat{e}^{(3)} = \omega_{i'} \hat{e}^{(i')}$ . Weiter lässt sich dann  $\Omega$  als  $\Omega_{i'j'} = -\epsilon_{i'j'k'} \omega_{k'}$  mit dem total antisymmetrischen Levi-Civita-Symbol

$$\epsilon_{i'j'k'} = \begin{cases} 1 & : (i', j', k') = (1, 2, 3) \text{ oder gerade Permutation} \\ -1 & : \text{ungerade Permutation} \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases}$$

schreiben. Man betrachte dann wieder den Ausdruck  $\dot{r}_{\text{IS},i} = \dot{a}_i + \dot{R}_{ij'} r_{j'} + R_{ij'} \dot{r}_{j'}$ . Mit der Ableitung  $\dot{R}_{ij'} = (R R^{-1} \dot{R})_{ij'} = R_{ik'} (R^t \dot{R})_{k'j'} = R_{ik'} \Omega_{k'j'}$  erhält man dann

$$\begin{aligned} \dot{r}_{\text{IS},i} &= \dot{a}_i + R_{ik'} (-\epsilon_{k'j's'} \omega_{s'}) r_{j'} + R_{ij'} \dot{r}_{j'} = \dot{a}_i + R_{ij'} \dot{r}_{j'} + R_{ik'} \epsilon_{k's'j'} \omega_{s'} r_{j'} \\ &= \dot{a}_i + R_{ij'} \dot{r}_{j'} + R_{ij'} \epsilon_{j's't'} \omega_{s'} r_{t'} , \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt lediglich die Indizes umbenannt wurden. Schreibt man nun statt  $\epsilon_{j's't'} \omega_{s'} r_{t'}$  kurz das Kreuzprodukt  $(\vec{\omega} \times \vec{r})_{j'}$ , so erhält man schließlich

$$\dot{r}_{\text{IS},i} = \dot{a}_i + R_{ij'} (\dot{r}_{j'} + (\vec{\omega} \times \vec{r})_{j'}) .$$

Dabei ist  $\dot{r}_{I,i}$  die Geschwindigkeit des Massepunkts relativ zu  $\Sigma$  bzw.  $\text{KS}$  und  $\dot{r}_{i'}$  die Geschwindigkeit relativ zu  $\Sigma'$  bzw.  $\text{KS}'$ .

**Bemerkung:** Nebenbei haben wir in der etwas indexlastigen Rechnung eine nützliche allgemeine Aussage hergeleitet: Die Wirkung einer antisymmetrischen Matrix auf einen Vektor (also eine Matrix-Vektor-Multiplikation) lässt sich auch als Kreuzprodukt darstellen.

### 1.5.2. Bedeutung von $\vec{\omega}$

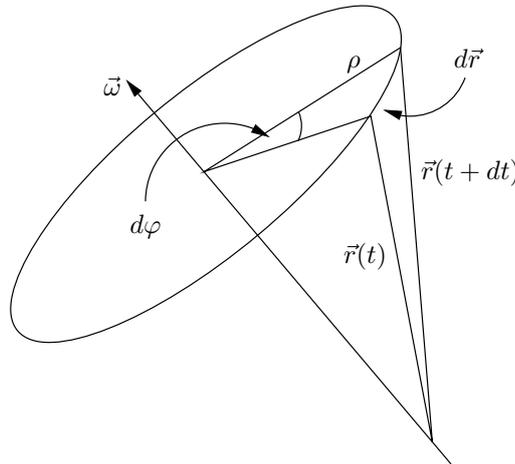
Als nächstes soll der Vektor  $\vec{\omega}$  der antisymmetrischen Matrixkomponenten interpretiert werden. Man betrachte den Fall  $\vec{a} = 0$ , in dem dann auch  $\dot{\vec{a}} = 0$  gilt. Sei dann  $\vec{r}$  ein starr mit KS' verbundener Vektor, sodass  $\dot{r}_{j'} = 0$  ist und  $\dot{r}_{1S,i} = R_{ij'}(\vec{\omega} \times \vec{r})_{j'}$ . Es stellt sich die Frage, welche Punkte  $P$  so liegen, dass  $\dot{r}_{1S,i} = 0$  ist, also ihre Geschwindigkeit auch relativ zu KS verschwindet. Dies sind genau jene  $r_j$ , mit  $\vec{\omega} \times \vec{r} = 0$ , also jede Punkte mit  $\vec{r} \parallel \vec{\omega}$  auf der momentanen Drehachse. Weiter gilt, dass  $\omega = |\vec{\omega}|$  gleich der momentanen Winkelgeschwindigkeit ist.

*Beweis.* Für einen solchen starr mit KS' verbundenen Punkt gilt die Eigenschaft

$$\dot{r}_{1S,i} = R_{ik'}(\vec{\omega} \times \vec{r})_{k'} \quad \Longrightarrow \quad R_{ij'}\dot{r}_{1S,i} = R_{ij'}R_{ik'}(\vec{\omega} \times \vec{r})_{k'}$$

und mit  $R_{ij'}\dot{r}_{1S,i} = (R^t)_{j'i}\dot{r}_{1S,i} = \dot{r}_{1S,j'}$  und  $R_{ij'}R_{ik'} = (R^t)_{j'i}R_{ik'} = (R^t R)_{j'k'} = \delta_{j'k'}$  folgt dann  $\dot{r}_{1S,j'} = (\vec{\omega} \times \vec{r})_{j'}$ , also auch  $\hat{e}^{(j')}\dot{r}_{1S,j'} = \hat{e}^{(j')}(\vec{\omega} \times \vec{r})_{j'}$ , und damit

$$\frac{d\vec{r}_{1S}}{dt} = \vec{\omega} \times \vec{r} \iff d\vec{r}_{1S} = (\vec{\omega} \times \vec{r}) dt \quad \Longrightarrow \quad |d\vec{r}_{1S}| = |\vec{\omega} \times \vec{r}| dt .$$



Die geometrische Veränderung von  $\vec{r}_I$  entspricht einer Drehung um  $\vec{\omega}$ , wobei

$$|d\vec{r}_{1S}| = \rho d\varphi = |\vec{r}_{1S}| \sin(\vec{r}_{1S}, \vec{\omega}) d\varphi = \frac{1}{|\vec{\omega}|} |\vec{\omega} \times \vec{r}| d\varphi$$

gilt. Vergleicht man die gefundenen Identitäten für  $|d\vec{r}_{1S}|$  miteinander, so ergibt sich sofort die Identifikation

$$dt = \frac{1}{|\vec{\omega}|} d\varphi \iff \frac{d\varphi}{dt} = |\vec{\omega}| ,$$

womit gezeigt wäre, dass  $\omega = |\vec{\omega}|$  gleich der momentanen Winkelgeschwindigkeit ist.  $\square$

### 1.5.3. Das Newtonsche Gesetz in beliebigen Bezugssystemen

Man betrachte nun die Beschleunigung, also eine weitere Ableitung, die nach dem zuvor detailliert behandelten Schema hergeleitet wird, es gilt

$$\ddot{r}_{1S,i} = \ddot{a}_i + \dot{R}_{ik'}(\dot{r}_{k'} + (\vec{\omega} \times \vec{r})_{k'}) + R_{ik'} \left( \ddot{r}_{k'} + \frac{d}{dt}(\epsilon_{k's'j'}\omega_{s'}r_{j'}) \right) .$$

Mit  $\dot{R}_{ik'} = R_{it'}\Omega_{t'k'} = R_{it'}\epsilon_{t'u'k'}\omega_{u'}$  und  $\frac{d}{dt}(\epsilon_{k's'j'}\omega_{s'}r_{j'}) = \epsilon_{k's'j'}(\dot{\omega}_{s'}r_{j'} + \omega_{s'}\dot{r}_{j'})$  folgt

$$\begin{aligned} \ddot{r}_{\text{IS},i} &= \ddot{a}_i + R_{it'} \underbrace{\epsilon_{t'u'k'}\omega_{u'}\dot{r}_{k'}}_{(\vec{\omega} \times \dot{\vec{r}})_{t'}} + R_{it'} \underbrace{\epsilon_{t'u'k'}\omega_{u'}(\vec{\omega} \times \vec{r})_{k'}}_{(\vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}))_{t'}} \\ &\quad + R_{ik'}\ddot{r}_{k'} + R_{ik'} \underbrace{\epsilon_{k's'j'}\dot{\omega}_{s'}r_{j'}}_{(\dot{\vec{\omega}} \times \vec{r})_{k'}} + R_{ik'} \underbrace{\epsilon_{k's'j'}\omega_{s'}\dot{r}_{j'}}_{(\vec{\omega} \times \dot{\vec{r}})_{k'}} \\ &= \ddot{a}_i + R_{ik'} \left[ \ddot{r}_{k'} + (\vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}))_{k'} + 2(\vec{\omega} \times \dot{\vec{r}})_{k'} + (\dot{\vec{\omega}} \times \vec{r})_{k'} \right]. \end{aligned}$$

Nun gilt im Inertialsystem  $\Sigma$  bzw. KS das zweite Newtonsche Axiom  $m\ddot{r}_{\text{IS},i} = F_i$ , also

$$\begin{aligned} m\ddot{a}_i + mR_{ik'} \left[ \ddot{r}_{k'} + (\vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}))_{k'} + 2(\vec{\omega} \times \dot{\vec{r}})_{k'} + (\dot{\vec{\omega}} \times \vec{r})_{k'} \right] &= F_i \\ \iff m \underbrace{(R_{j'i}^t \ddot{a}_i)}_{\ddot{a}_{j'}} + m \underbrace{R_{j'i}^t R_{ik'}}_{\delta_{j'k'}} \left[ \ddot{r}_{k'} + (\vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}))_{k'} + 2(\vec{\omega} \times \dot{\vec{r}})_{k'} + (\dot{\vec{\omega}} \times \vec{r})_{k'} \right] &= F_{j'} \\ \iff m\ddot{a}_{j'} + m\ddot{r}_{j'} + (m\vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}) + 2m(\vec{\omega} \times \dot{\vec{r}}) + m(\dot{\vec{\omega}} \times \vec{r}))_{j'} &= F_{j'} \\ \iff m\ddot{r}_{j'} = F_{j'} - m\ddot{a}_{j'} - m\vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r})_{j'} - 2m(\vec{\omega} \times \dot{\vec{r}})_{j'} - m(\dot{\vec{\omega}} \times \vec{r})_{j'} & \\ \iff m\ddot{\vec{r}} = \vec{F} - m\ddot{\vec{a}} - m\vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}) - 2m(\vec{\omega} \times \dot{\vec{r}}) - m(\dot{\vec{\omega}} \times \vec{r}) . & \end{aligned}$$

Damit haben wir das Analogon des zweiten Newtonschen Axioms für beliebige Bezugssysteme hergeleitet.

#### 1.5.4. Typen von Scheinkräften

Es verbleibt noch, die zusätzlichen Terme des verallgemeinerten Newtonschen Axioms zu interpretieren - sie entpuppen sich als die Scheinkräfte.

- *Translationsbeschleunigungen:* Sei  $\vec{\omega} = 0$ , d.h. man wähle  $R = \mathbb{1}$  und es gilt  $\dot{R} = 0$ , dann erhalten wir einfach nur

$$m\ddot{\vec{r}} = \vec{F} - m\ddot{\vec{a}}$$

als Newtonsches Axiom. Sei speziell  $\ddot{\vec{a}} = \ddot{\vec{a}}_0$  konstant, dann betrachten wir eine konstante Beschleunigung des Bezugssystems  $\text{KS}'$  relativ zu  $\text{KS}$ . Für ein System von Teilchen in einem homogenen Gravitationsfeld gilt in  $\Sigma$

$$m_a \ddot{r}_{a;I,i} = F_{a;i} + m_a g \hat{g}_i$$

für  $a = 1, \dots, n$ . In  $\Sigma'$  bzw. bezüglich  $\text{KS}'$  ist dann

$$m_a \ddot{r}_{a;i'} = F_{a;i'} + m_a g \hat{g}_{i'} - m_a \ddot{a}_{0i'} .$$

Weiter wähle man  $\text{KS}$  und  $\text{KS}'$  achsenparallel, so hat man mit der Matrix  $R = \mathbb{1}$  weiter

$$m_a \ddot{r}_{a;i} = F_{a;i} + m_a (g \hat{g}_i - \ddot{a}_{0i}) .$$

Wenn nun also  $\ddot{\vec{a}}_0 = g \hat{g}$  ist, so gilt in  $\Sigma'$ , dass  $m_a \ddot{\vec{r}}_a = \vec{F}_a$  gilt, d.h. in diesem beschleunigten Bezugssystem ist das Gravitationsfeld nicht spürbar.

- *Zentrifugal- und Corioliskraft:* Sei  $\ddot{\vec{a}} = 0$  und  $\vec{\omega}$  konstant. Einsetzen liefert dann das Gesetz

$$m\ddot{\vec{r}} = \vec{F} - \underbrace{m\vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r})}_{\text{Zentrifugalkraft}} - \underbrace{2m(\vec{\omega} \times \dot{\vec{r}})}_{\text{Corioliskraft}} .$$

Ein Effekt der Corioliskraft ist beispielsweise, dass auf der Nordhalbkugel alle Bewegungen nach rechts abgelenkt werden - auf der Südhalbkugel analog alle Bewegungen nach links.

## 2. Der Lagrange-Formalismus

Im letzten Abschnitt über beschleunigte Bezugssysteme haben wir erkannt, dass im Rahmen der Newtonschen Mechanik bzw. des Newtonschen Formalismus der Wechsel von Bezugs- und Koordinatensystemen oftmals sehr mühsam ist, und die eigentlich interessierende Physik hinter deutlich komplizierteren Gleichungen verschwindet. Daher wird nun der Lagrange-Formalismus eingeführt, der die Mechanik von einem anderen Gesichtspunkt her aufzäumt, dafür aber wesentlich universeller anzuwenden ist.

### 2.1. Zwangsbedingungen für verallgemeinerte Koordinaten

Die mögliche Bewegung eines Körpers bzw. Teilchens ist oftmals durch Zwangsbedingungen eingeschränkt. So haben wir beispielsweise feste Unterlagen im Gravitationsfeld (schiefe Ebene, Erdoberfläche, ...), Gasmoleküle in einem Volumen, Schienen oder Führungen, Moleküle eines starren Körpers, Perlen auf einer Schnur, etc. Prinzipiell gilt, dass alle Zwangsbedingungen - von welcher Natur auch immer sie sein mögen - die Wirkung von Zwangskräften darstellen. Praktisch sind aber diese Zwangskräfte in ihrer Größe nicht direkt bekannt.

#### 2.1.1. Arten von Zwangsbedingungen

Unser weiteres Vorgehen hängt von der Art der Zwangsbedingungen (engl. „constraints“) ab. Man unterscheidet einerseits **holonome** und **nicht holonome** Zwangsbedingungen sowie andererseits **skleronome** und **rheonome**. Holonome Zwangsbedingungen sind analytisch ausdrückbar durch Gleichungen in den Ortskoordinaten, eventuell auch in der Zeit, etwa durch

$$f_{\text{ZB},s}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = 0 \quad \text{für} \quad s = 1, \dots, k .$$

*Beispiel:* In einem starren Körper kann etwa  $(\vec{r}_i - \vec{r}_j)^2 - c_{ij} = 0$  für alle  $i \neq j$  die Abstände der Moleküle fixieren.

Nicht-holonome Zwangsbedingungen dagegen führen auf Ungleichungen in den Koordinaten  $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$  (evtl. auch in  $t$ ), beispielsweise für Moleküle in einem Volumen ( $\vec{r}_i^2 - R^2 \leq 0$ ) oder sind durch nicht totale Differentiale (sogenannte Differentialformen) bestimmt. Weiter versteht man unter skleronom zeitunabhängige, unter rheonom zeitabhängige Zwangsbedingungen.

#### 2.1.2. Holonome Zwangsbedingungen

Wir werden unsere Betrachtung auf holonome Zwangsbedingungen einschränken. Für  $k$  Zwangsbedingungen (also einzelne Gleichungen) liegen nur  $3N - k = f$  unabhängige Freiheitsgrade für den betrachteten Körper vor, d.h. nicht alle der  $3N$  Koordinaten  $r_{i,\alpha}$  mit  $i = 1, \dots, N$  und  $\alpha = 1, 2, 3$  sind unabhängig voneinander.

Es liegt daher nahe,  $f$  neue Koordinaten  $q_\alpha$  für  $\alpha = 1, \dots, f$  so zu wählen, dass diese dann unabhängig voneinander sind. Im trivialen Spezialfall, wo überhaupt keine Zwangsbedingungen

vorliegen, gilt dann beispielsweise<sup>1</sup> wieder  $q_1 = r_{1,1}$ ,  $q_2 = r_{1,2}$  bis zu  $q_f = r_{N,3}$ . Meistens ist aber eine andere Wahl geeigneter.

Seien nun verallgemeinerte Koordinaten  $q_\alpha = q_\alpha(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$  für  $\alpha = 1, \dots, f$  gewählt. Bestimmt man dann die Umkehrung  $\vec{r}_i = \vec{r}_i(q_1, \dots, q_f, t)$ , so sind automatisch die  $k$  Zwangsbedingungen des Systems berücksichtigt.

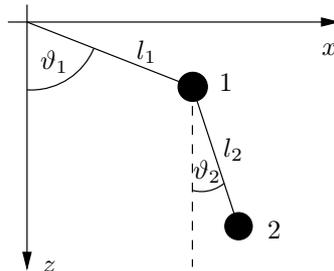
**Beispiel:** • Ein Massepunkt befinde sich auf einer masselosen starren Stange, die um den Ursprung  $\vec{0}$  beliebig drehbar ist. Es ist also  $N = 1$ , da wir nur einen Massepunkt haben, und daher haben wir  $3N = 3$  Koordinaten. Weiter ist  $k = 1$ , da wir durch die starre Stange die Abstandsbedingung  $\vec{r}^2 = R^2 \iff \vec{r}^2 - R^2 = 0$  erhalten. Damit bleiben  $f = 3N - k = 3 - 1 = 2$  unabhängige Freiheitsgrade für das betrachtete System übrig.

Eine günstige Wahl für die zwei unabhängigen verallgemeinerten Koordinaten sind dann die Raumwinkel  $\vartheta$  und  $\varphi$ , d.h. die Verwendung von sphärischen Koordinaten. Es ist demnach  $q_1 = \vartheta$  und  $q_2 = \varphi$ , wobei die beiden verallgemeinerten Koordinaten mit den drei kartesischen Koordinaten durch

$$r_1 = R \sin \vartheta \cos \varphi \quad r_2 = R \sin \vartheta \sin \varphi \quad r_3 = R \cos \vartheta$$

in Beziehung stehen, die  $r_i$  sind dabei also von der Form  $r_i = r_i(\vartheta, \varphi)$ .

- Als zweites Beispiel betrachten wir ein Doppelpendel in der  $x$ - $z$ -Ebene mit folgender Konfiguration: In diesem Fall ist  $N = 2$  und  $k = 4$ , also haben wir  $f = 3N - k = 2$  unabhängige



Freiheitsgrade, wobei die vier Zwangsbedingungen im Detail durch

$$y_1 = 0 \quad y_2 = 0 \quad |\vec{r}_1| = l_1 \quad |\vec{r}_2 - \vec{r}_1| = l_2$$

gegeben sind. Eine praktische Wahl der verallgemeinerten Koordinaten geschieht durch die Winkel, also  $q_1 = \vartheta_1$  und  $q_2 = \vartheta_2$ , es gilt dann beispielsweise umgekehrt für die kartesischen Koordinaten des ersten Körpers  $\vec{r}_1 = \vec{r}_1(\vartheta_1, \vartheta_2) = (l_1 \sin \vartheta_1, 0, -l_1 \cos \vartheta_1)$ .

## 2.2. Das D'Alembertsche Prinzip und Lagrange-Gleichungen

### 2.2.1. Virtuelle Verrückungen und das D'Alembertsche Prinzip

Gegeben sei nun ein System von  $N$  Teilchen unter Zwangsbedingungen, welche die effektiven Wirkungen der zugehörigen Zwangskräfte  $F_i^{(z)}$  sind. Man betrachte dann zur selben Zeit  $t$  zwei

<sup>1</sup>Man beachte, dass die verallgemeinerten Koordinaten  $q_\alpha$  auch andere Koordinatensysteme darstellen können. Sind die  $\vec{r}_i$  kartesische Koordinaten, so können die  $q_\alpha$  auch Polarkoordinaten o.ä. darstellen.

## 2. Der Lagrange-Formalismus

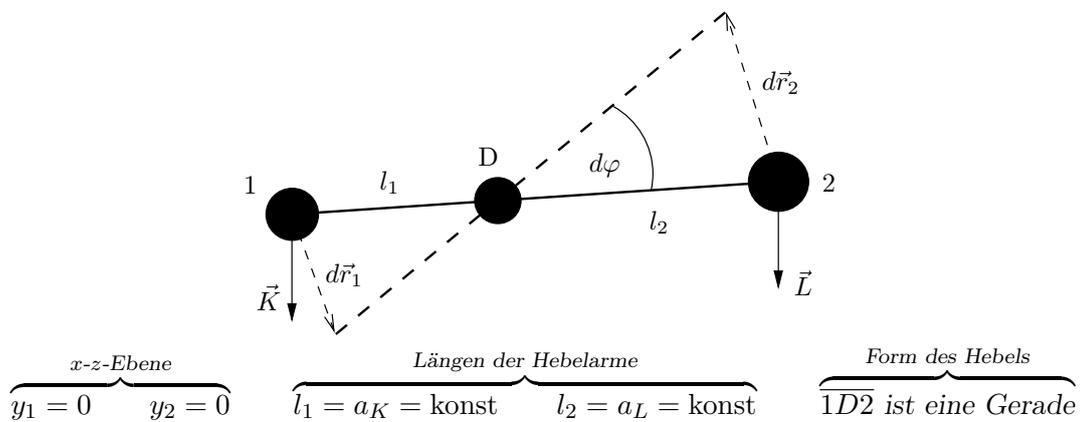
infinitesimal benachbarte räumliche Konfigurationen des Systems, die beide mit den Zwangsbedingungen verträglich sind. Die zugehörigen Koordinatendifferenzen bezeichnet man als **virtuelle Verrückungen**.

Das System sei nun in einem Zustand statischen Gleichgewichts, d.h. es gilt  $\vec{F}_i = 0$  für alle  $i = 1, \dots, N$ . Nun ist  $\vec{F}_i = \vec{F}_i^{(e)} + \vec{F}_i^{(z)}$ , dann gilt nach dem zuvor behandelten Prinzip „Arbeit ist Kraft mal Weg“ für die Arbeit der infinitesimalen Verrückung

$$\sum_i \vec{F}_i d\vec{r}_i = \sum_i \vec{F}_i^{(e)} d\vec{r}_i + \sum_i \vec{F}_i^{(z)} d\vec{r}_i = 0 \quad \Longrightarrow \quad \sum_i \vec{F}_i^{(e)} d\vec{r}_i = 0 .$$

0, da keine virtuelle Arbeit der Zwangskräfte

**Beispiel:** Wir betrachten einen Hebel in der  $x$ - $z$ -Ebene, also zwei Massenpunkte 1 und 2, unter den folgenden Zwangsbedingungen:



Als einzige verallgemeinerte Koordinate wählen wir für den einzigen verbleibenden Freiheitsgrad den Winkel  $q_1 = \varphi$ . Nach dem Prinzip der virtuellen Verrückungen gilt nun

$$\vec{F}_1^{(e)} d\vec{r}_1 + \vec{F}_2^{(e)} d\vec{r}_2 = 0 \quad \Longrightarrow \quad \vec{K} d\vec{r}_1 + \vec{L} d\vec{r}_2 = 0 .$$

Ausgedrückt mittels der verallgemeinerten Koordinate  $q_1 = \varphi$  und den Größen  $|d\vec{r}_1| = a_K d\varphi$  und  $|d\vec{r}_2| = a_L d\varphi$  gilt dann

$$\begin{aligned} |\vec{F}| \cdot |d\vec{r}_1| \cos \varphi + |\vec{L}| \cdot |d\vec{r}_2| \cos(\pi - \varphi) = 0 &\iff (K a_K d\varphi - L a_L d\varphi) \cos \varphi = 0 \\ \iff K a_K = L a_L &\iff K = \frac{a_L}{a_K} L , \end{aligned}$$

das Kräfteverhältnis für ein statisches Gleichgewicht ist also erwartungsgemäß durch das Längenverhältnis der beiden Hebelarme bestimmt.

Fassen wir noch einmal zusammen: Allgemein führt man also Zwangskräfte ein, die verhindern, dass die Zwangsbedingungen verletzt werden. In Newtonsche Formulierung gilt also

$$\dot{\vec{p}}_i = \vec{F}_i^{(e)} + \vec{F}_i^{(z)} \iff \dot{\vec{p}}_i - \vec{F}_i^{(e)} - \vec{F}_i^{(z)} = 0 .$$

Ist dann  $d\vec{r}_i$  eine infinitesimale, im Rahmen der Zwangsbedingungen erlaubte Änderung der Koordinaten  $\vec{r}_i$ , so gilt stets, dass die Zwangskräfte  $\vec{F}_i^{(z)}$  orthogonal zu  $d\vec{r}_i$  stehen, also

$$d\vec{r}_i \cdot \vec{F}_i^{(z)} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \sum_{i=1}^N (\dot{\vec{p}}_i - \vec{F}_i^{(e)}) \cdot d\vec{r}_i = 0 ,$$

dies ist das **D'Alembertsche Prinzip**. Demnach ist die virtuelle Arbeit, die von den Zwangskräften verrichtet wird, gleich Null.

### 2.2.2. Lagrange-Funktion und -Gleichung

Das Prinzip von D'Alembert und das Konzept der virtuellen Verrückungen verwenden wir nun weiter. Dazu betrachten wir ein System bestehend aus  $N$  Teilchen unter  $k$  holonomen Zwangsbedingungen, sodass wir folglich noch  $f = 3N - k$  unabhängige System-Freiheitsgrade haben, für die die verallgemeinerten Koordinaten  $q_1, \dots, q_f$  eingeführt werden. Im Zusammenhang mit den verallgemeinerten Koordinaten  $q_\alpha$  gilt dann

$$d\vec{r}_i = \sum_{\alpha=1}^f \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} dq_\alpha \quad \Longrightarrow \quad \sum_{i=1}^N (\dot{\vec{p}}_i - \vec{F}_i^{(e)}) \sum_{\alpha=1}^f \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} dq_\alpha = 0$$

für das D'Alembertsche Prinzip. Da die verallgemeinerten Koordinaten  $q_\alpha$  nach Wahl stets unabhängig voneinander sind, gilt also

$$\sum_{i=1}^N (\dot{\vec{p}}_i - \vec{F}_i^{(e)}) \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} = 0$$

für alle  $\alpha$ . Differenzieren von  $\vec{r}$  nach der Zeit  $t$  liefert dann

$$\dot{\vec{r}}_i = \sum_{\alpha=1}^f \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha + \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial t} \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial \dot{\vec{r}}_i}{\partial \dot{q}_\alpha} = \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha},$$

wobei die zweite Gleichung durch Differenzieren nach den  $\dot{q}_\alpha$  folgt. Weiter hat man dann

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} = \sum_{\beta=1}^f \frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial q_\alpha \partial q_\beta} \dot{q}_\beta + \frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial q_\alpha \partial t} = \frac{\partial \dot{\vec{r}}_i}{\partial q_\alpha}$$

und es folgt somit unter Verwendung von  $\dot{\vec{p}}_i = m_i \frac{d}{dt} \dot{\vec{r}}_i$  aus dem D'Alembert-Prinzip

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{i=1}^N \left[ m_i \frac{d}{dt} \left( \dot{\vec{r}}_i \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} \right) - m_i \dot{\vec{r}}_i \frac{d}{dt} \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} - \vec{F}_i^{(e)} \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} \right] \\ &= \sum_{i=1}^N \left[ \frac{d}{dt} \left( \frac{m_i}{2} \frac{\partial (\dot{\vec{r}}_i^2)}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) - m_i \dot{\vec{r}}_i \frac{\partial \dot{\vec{r}}_i}{\partial q_\alpha} - \vec{F}_i^{(e)} \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} \right] \quad \text{mit} \quad m_i \dot{\vec{r}}_i \frac{\partial \dot{\vec{r}}_i}{\partial q_\alpha} = \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \left( \frac{m_i}{2} \dot{\vec{r}}_i^2 \right). \end{aligned}$$

Wir definieren die gesamte kinetische Energie nun als  $T = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{2} \dot{\vec{r}}_i^2$ , sowie durch

$$Q_\alpha = \sum_{i=1}^N \vec{F}_i^{(e)} \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha}$$

verallgemeinerte Kräfte, dann erhalten wir aus der obigen Umformung des D'Alembert-Prinzips folglich die deutlich kürzere Beziehung

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} = Q_\alpha.$$

Betrachten wir nun als speziellen Fall Potentialkräfte für die externen Kräfte  $\vec{F}_i^{(e)}$ , also von der Form  $\vec{F}_i^{(e)} = -\vec{\nabla}_i V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$ , dann erhalten wir als verallgemeinerte Kräfte folglich

$$Q_\alpha = \sum_{i=1}^N (-\vec{\nabla}_i V) \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} = -\frac{\partial V}{\partial q_\alpha} \quad \Longrightarrow \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} = -\frac{\partial V}{\partial q_\alpha}.$$

## 2. Der Lagrange-Formalismus

---

Verwendet man nun insbesondere noch  $\frac{\partial V}{\partial \dot{q}_\alpha} = 0$ , so erhalten wir daraus dann

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial(T-V)}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial(T-V)}{\partial q_\alpha} = 0 \quad \implies \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0$$

durch Definition von  $L = T - V$ . Auf die wichtige Bedeutung der  $L$ -Funktion kommen wir gleich zurück.

Jetzt untersuchen wir noch geschwindigkeitsabhängige Kräfte, die ein verallgemeinertes Potential  $U = U(q_1, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f)$  besitzen. Hier gilt dann für den Zusammenhang zu den verallgemeinerten Kräften

$$Q_\alpha = \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial U}{\partial q_\alpha} \quad \implies \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} = Q_\alpha = \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial U}{\partial q_\alpha},$$

was wir ähnlich wie zuvor durch Definition von  $L = T - U$  in die Form

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial(T-U)}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial(T-U)}{\partial q_\alpha} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0$$

bringen können. Wir erhalten also auch für geschwindigkeitsabhängige Kräfte wieder dieselbe Gleichung, diese nennt man **Lagrange-Gleichung zweiter Art**, wobei die Funktion  $L$  die **Lagrange-Funktion** ist. Kurz gesagt liefert uns also die Lagrange-Gleichung die Bewegungsgleichungen eines Systems für die verallgemeinerten Koordinaten, wobei die Systemeigenschaften in der Lagrange-Funktion stecken.

**Beispiel:** Wir betrachten ein geladenes Teilchen in einem äußeren elektromagnetischen Feld  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  und  $\vec{B}(\vec{r}, t)$ , welches sonst keinen weiteren Zwangsbedingungen unterworfen ist, es gilt also  $q_1 = x$ ,  $q_2 = y$  und  $q_3 = z$  für die verallgemeinerten Koordinaten. Die Coulomb- und Lorentz-Kraft, die dann auf das Teilchen der Ladung  $q$  wirkt, ist durch

$$\vec{F} = \vec{F}_{\text{em}} = q \left( \vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B} \right)$$

gegeben, wobei in diesem Fall die oben angegebene Coulomb- und Lorentz-Kraft in kartesischen Koordinaten gleich der in den verallgemeinerten Koordinaten ist. Zu dieser Kraft gibt es nun ein verallgemeinertes Potential

$$U(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) = q \left( \Phi - \frac{1}{c} \vec{A} \cdot \dot{\vec{r}} \right),$$

wobei  $\Phi(\vec{r}, t)$  und  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  die Potentiale von  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  gemäß

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad \text{und} \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

sind. Die Potentialeigenschaft ist durch eine etwas längliche Rechnung nachzuprüfen, wie es für die  $x$ -Komponente demonstriert werden soll. Einsetzen liefert

$$\begin{aligned} F_{\text{em},x} &= q \left( -\frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{1}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{1}{c} (\vec{v} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}))_x \right) \\ &= q \left[ -\frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{1}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{1}{c} \left( v_y \left[ \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right] - v_z \left[ \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right] \right) \right] \\ &= q \left[ -\frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{1}{c} \frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{1}{c} \left( -\frac{\partial A_x}{\partial x} v_x - \frac{\partial A_x}{\partial y} v_y - \frac{\partial A_x}{\partial z} v_z + \frac{\partial(\vec{A} \cdot \vec{v})}{\partial x} \right) \right] \end{aligned}$$

wobei angenommen wurde, dass die  $v_x$ ,  $v_y$  und  $v_z$  unabhängig von  $x$  sind. Es gilt dann

$$\frac{d}{dt}A_x = \frac{\partial A_x}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial A_x}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial A_x}{\partial z} \frac{dz}{dt} + \frac{\partial A_x}{\partial t} = \frac{\partial A_x}{\partial x} v_x + \frac{\partial A_x}{\partial y} v_y + \frac{\partial A_x}{\partial z} v_z + \frac{\partial A_x}{\partial t},$$

sodass sich die obige Gleichung noch einmal drastisch zu

$$F_{\text{em},x} = q \left( -\frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{1}{c} \frac{d}{dt} A_x + \frac{1}{c} \frac{\partial(\vec{A}\vec{v})}{\partial x} \right)$$

verkürzt. Berechnet man schließlich auch die  $y$ - und  $z$ -Komponente nach demselben Prinzip, so erhält man schließlich für die Kraft die direkte Potentialabhängigkeit

$$\vec{F}_{\text{em}} = q \left( -\vec{\nabla} \Phi - \frac{1}{c} \frac{d}{dt} \vec{A} + \frac{1}{c} \vec{\nabla}(\vec{A}\vec{v}) \right) = q \left( -\vec{\nabla} [\Phi - \vec{A}\vec{v}] - \frac{1}{c} \frac{d}{dt} \vec{A} \right).$$

Durch eine explizite Rechnung zeigt sich dann, dass mit obigem Potential  $U = q(\Phi - \frac{1}{c} \vec{A}\vec{v})$  ebenso (wieder nur beispielhaft für eine Komponente berechnet)

$$\begin{aligned} -\frac{\partial U}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial U}{\partial \dot{x}} &= q \left( -\frac{\partial \Phi}{\partial x} + \frac{1}{c} \frac{\partial(\vec{A}\vec{v})}{\partial x} \right) + q \frac{d}{dt} \left( -\frac{1}{c} A_x \right) \\ &= q \left( -\frac{\partial \Phi}{\partial x} - \frac{1}{c} \frac{d}{dt} A_x + \frac{1}{c} \frac{\partial(\vec{A}\vec{v})}{\partial x} \right) = F_{\text{em},x} \end{aligned}$$

folgt. Also erhalten wir als Lagrange-Funktion eines geladenen Teilchens im elektromagnetischen Feld schließlich

$$L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) = T - U = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 - q \left( \Phi(\vec{r}, t) - \frac{1}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \cdot \dot{\vec{r}} \right)$$

erhält. Die zugehörigen Lagrange-Gleichung führt dann wieder auf die gewöhnliche Newtonsche Bewegungsgleichung  $m\ddot{\vec{r}} = \vec{F}_{\text{em}}$ .

## 2.3. Eigenschaften der Lagrange-Gleichung bzw. -Funktion

### 2.3.1. Kovarianz unter Punkttransformation

Bereits mehrfach wurde auf die überaus nützliche Beliebigkeit der Wahl der verallgemeinerten Koordinaten hingewiesen - nun soll sie auch tatsächlich gezeigt werden. Die Frage ist also, wie sich die Lagrange-Gleichung bei einem Wechsel  $q_\alpha \rightarrow \tilde{q}_\alpha$  ändert.

Da die  $q_\alpha$  als geeignete verallgemeinerte Koordinaten vorausgesetzt werden, gilt zunächst einmal die Lagrange-Gleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0$$

für  $\alpha = 1, \dots, f$  mit geeignetem  $L = L(q, \dot{q}, t)$ . Betrachte dann die Transformation  $q_\alpha \rightarrow \tilde{q}_\alpha = \tilde{q}_\alpha(q_1, \dots, q_f, t)$ , wie etwa beim Koordinatenwechsel  $(x, y, z) \rightarrow (r, \vartheta, \varphi)$ . Aus mathematischer Sicht sei diese Transformation durch einen Diffeomorphismus<sup>2</sup> gegeben, d.h. es gilt umgekehrt

<sup>2</sup>Ein Diffeomorphismus ist eine bijektive und beliebig oft differenzierbare Abbildung, bei der auch die Umkehrfunktion beliebig oft differenzierbar ist.

## 2. Der Lagrange-Formalismus

---

auch  $q_\alpha = q_\alpha(\tilde{q}_1, \dots, \tilde{q}_f, t)$ . Eine derartige Transformation heißt **Punkt-Transformation**, es gilt dann für die Ableitungen der neuen Koordinaten insbesondere

$$\dot{q}_\alpha = \frac{d}{dt} \tilde{q}_\alpha(q, t) = \frac{\partial \tilde{q}_\alpha}{\partial q_\beta} \frac{dq_\beta}{dt} + \frac{\partial \tilde{q}_\alpha}{\partial t} = \sum_\beta \frac{\partial \tilde{q}_\alpha}{\partial q_\beta} \dot{q}_\beta + \frac{\partial \tilde{q}_\alpha}{\partial t},$$

d.h. es gilt die Abhängigkeit  $\dot{q}_\alpha = \dot{q}_\alpha(q, \dot{q}, t)$ , die insbesondere linear in  $\dot{q}$  ist. Umgekehrt gilt analog auch

$$\dot{q}_\alpha = \dot{q}_\alpha(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t) = \sum_\beta \frac{\partial q_\alpha}{\partial \tilde{q}_\beta} \dot{\tilde{q}}_\beta + \frac{\partial q_\alpha}{\partial t}$$

Insbesondere folgen mit diesen beiden zeitlichen Ableitungen der Koordinaten die Gleichheiten

$$\begin{aligned} \frac{\partial \dot{q}_\alpha}{\partial \dot{q}_\gamma} &= \sum_\beta \frac{\partial \tilde{q}_\alpha}{\partial q_\beta} \frac{\partial \dot{q}_\beta}{\partial \dot{q}_\gamma} = \frac{\partial \tilde{q}_\alpha}{\partial q_\gamma} & \text{und analog} & \quad \frac{\partial \dot{q}_\alpha}{\partial \dot{\tilde{q}}_\gamma} = \frac{\partial q_\alpha}{\partial \tilde{q}_\gamma} & \text{sowie} \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial \tilde{q}_\alpha}{\partial q_\gamma} &= \frac{\partial}{\partial q_\gamma} \frac{d \tilde{q}_\alpha}{dt} = \frac{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha}{\partial q_\gamma} & \text{und analog} & \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial q_\alpha}{\partial \tilde{q}_\gamma} = \frac{\partial \dot{q}_\alpha}{\partial \tilde{q}_\gamma}. \end{aligned}$$

Man betrachte nun die transformierte Lagrange-Funktion  $\tilde{L}(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t) = L(q(\tilde{q}, t), \dot{q}(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t), t)$ , dann folgt für diese durch eine einfache Rechnung

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} \tilde{L}(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t) &= \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} L(q(\tilde{q}, t), \dot{q}(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t), t) = \frac{d}{dt} \sum_\beta \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\beta} \frac{\partial \dot{q}_\beta}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} \\ &= \sum_\beta \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\beta} \right) \frac{\partial \dot{q}_\beta}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} + \sum_\beta \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\beta} \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial \dot{q}_\beta}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} \right) = \sum_\beta \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\beta} \frac{\partial \dot{q}_\beta}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\beta} \frac{\partial \dot{q}_\beta}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} L(q(\tilde{q}, t), \dot{q}(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t), t) = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} \iff \frac{d}{dt} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} - \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \tilde{q}_\alpha} = 0, \end{aligned}$$

die Lagrange-Gleichung bleibt also unter beliebigen Punkttransformationen **form-invariant** bzw. **kovariant**, wobei sich die neue Lagrange-Funktion  $\tilde{L}(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t)$  aus  $L(q, \dot{q}, t)$  durch einfaches Einsetzen der neuen Koordinaten ergibt.

**Bemerkung:** Man beachte dabei noch einmal, dass die Newtonschen Bewegungsgleichungen nicht forminvariant sind. Sei beispielsweise  $m\ddot{\vec{r}} = -\vec{\nabla}V$  eine Bewegungsgleichung in kartesischen Koordinaten, dann gilt beim Wechsel  $\vec{r} = (x, y, z) \rightarrow (r, \vartheta, \varphi)$  zu räumlichen Kugelkoordinaten sicherlich  $m\ddot{\vec{r}} \neq \frac{\partial}{\partial \vec{r}}V$  und  $m\ddot{\vartheta} \neq \frac{\partial}{\partial \vartheta}V$ , also keine Forminvarianz.

### 2.3.2. Eichinvarianz der Lagrange-Funktion

Es bleibt zu klären, ob bei einer gegebenen Konfiguration von Teilchen und Kräften die Lagrange-Funktion  $L(q, \dot{q}, t)$  eindeutig bestimmt ist. Dies ist nicht der Fall, da durch die auftretenden Differentiationen mit  $L$  auch  $L+c$  oder  $\alpha L$  für  $\alpha, c \in \mathbb{C}$  gleichwertige Lösungen sind. Außerdem führt mit  $L(q, \dot{q}, t)$  auch

$$L(q, \dot{q}, t) + \frac{d}{dt} M(q, t)$$

zu derselben Lagrange-Gleichung, wobei  $M$  eine beliebige Funktion der verallgemeinerten Koordinaten (nicht aber deren Ableitungen!) und der Zeit darstellt. Eine derartige Transformation heißt **Eich-Transformation**.

Um die Gültigkeit der eichtransformierten Lagrange-Funktion  $\tilde{L} = L + \frac{d}{dt}M$  zu zeigen, müssen wir eigentlich wieder nur

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial \tilde{L}}{\partial q_\alpha} = \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\alpha} \left( L + \frac{d}{dt} M \right) - \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \left( L + \frac{d}{dt} M \right)$$

ausrechnen, was unter Verwendung von

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\alpha} \frac{d}{dt} M(q, t) &= \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\alpha} \left( \sum_{\beta} \frac{\partial M}{\partial q_\beta} \dot{q}_\beta + \frac{\partial M}{\partial t} \right) = \sum_{\beta} \frac{\partial M}{\partial q_\beta} \frac{\partial \dot{q}_\beta}{\partial \dot{q}_\alpha} = \frac{\partial M}{\partial q_\alpha} \\ \implies \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\alpha} \frac{d}{dt} M &= \frac{d}{dt} \frac{\partial M}{\partial q_\alpha} = \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \frac{dM}{dt} \end{aligned}$$

geschieht, also erhalten wir nach Addition der letzten Gleichung mit der Lagrange-Gleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\alpha} \left( L + \frac{d}{dt} M \right) - \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \left( L + \frac{d}{dt} M \right) = 0 .$$

## 2.4. Anwendungsbeispiel: Sphärisches Pendel

Als ausführliches Rechenbeispiel betrachten wir das sphärische Pendel. Dabei ist ein Körper fix mit dem Nullpunkt verbunden (wir gehen von einer starren Befestigung aus) und befindet sich zugleich im homogenen Erdgravitationsfeld. Geeignete verallgemeinerte Koordinaten sind dann  $q_1 = \vartheta$  und  $q_2 = \varphi$ . Zunächst wird die kinetische Energie  $T = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2$  mit  $\dot{\vec{r}} = \frac{d\vec{r}}{dt}$  in diesen Koordinaten ausgedrückt. Für das Differential von räumlichen Kugelkoordinaten gilt

$$d\vec{r} = \hat{r} dr + \hat{\vartheta} \cdot r d\vartheta + \hat{\varphi} \cdot r \sin \vartheta d\varphi \quad \implies \quad \dot{\vec{r}} = \dot{r} \cdot \hat{r} + \dot{\vartheta} \cdot r \hat{\vartheta} + \dot{\varphi} \cdot r \sin \vartheta \hat{\varphi} ,$$

also folgt  $\dot{\vec{r}}^2 = \dot{r}^2 + r^2 \dot{\vartheta}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2 \sin^2 \vartheta$ . Im Falle von  $\dot{r} = 0$  (also keine Änderung der Abstands-Koordinate der räumlichen Kugelkoordinaten) erhält man dann eine kinetische Energie

$$T = T(q, \dot{q}) = T(\vartheta, \varphi, \dot{\vartheta}, \dot{\varphi}) = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 = \frac{m}{2} r^2 (\dot{\vartheta}^2 + \dot{\varphi}^2 \sin^2 \vartheta) .$$

Das Erdfeld wird durch das Potential  $V = V(\vartheta) = mgR(1 - \cos(\pi - \vartheta))$  repräsentiert. Bezeichnet dann  $\theta := \pi - \vartheta$ , so gilt einerseits  $\sin^2 \vartheta = \sin^2 \theta$  und die Lagrange-Funktion lässt sich als

$$L = T - V = \frac{m}{2} R^2 (\dot{\theta}^2 + \dot{\varphi}^2 \sin^2 \theta) - mgR + mgR \cos \theta = L(\theta, \varphi, \dot{\theta}, \dot{\varphi})$$

schreiben. Bei der Berechnung der Bewegungsgleichungen gilt dann ganz ausführlich

$$\begin{aligned} q_1 = \theta : \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} &= mR^2 \dot{\theta} & \frac{\partial L}{\partial \theta} &= mR^2 \dot{\varphi}^2 \sin \theta \cos \theta - mgR \sin \theta \\ \implies \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} - \frac{\partial L}{\partial \theta} &= mR^2 \ddot{\theta} - mR^2 \dot{\varphi}^2 \sin \theta \cos \theta + mgR \sin \theta = 0 \\ q_2 = \varphi : \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} &= mR^2 \dot{\varphi} \sin^2 \theta & \frac{\partial L}{\partial \varphi} &= 0 , \quad \text{d.h. } \varphi \text{ ist eine zyklische Koordinate} \\ \implies \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} - \frac{\partial L}{\partial \varphi} &= \frac{d}{dt} (mR^2 \dot{\varphi} \sin^2 \theta) = 0 , \end{aligned}$$

## 2. Der Lagrange-Formalismus

---

wobei die letzte Gleichung wegen der zeitlichen Ableitung insbesondere

$$mR^2 \dot{\varphi} \sin^2 \theta = C \iff \dot{\varphi} = \frac{C}{mR^2 \sin^2 \theta}$$

impliziert. Setzen wir diesen Term in die erste Lagrange-Gleichung für  $q_1 = \theta$  ein, so folgt

$$\ddot{\theta} - \sin \theta \cos \theta \frac{C^2}{m^2 R^4 \sin^4 \theta} + \frac{g}{R} \sin \theta = 0 \iff \ddot{\theta} = \cos \theta \frac{C^2}{m^2 R^4 \sin^3 \theta} - \frac{g}{R} \sin \theta .$$

Hieraus lässt sich die Bewegung  $\theta = \theta(t)$  mit einem Trick bestimmen: Man betrachte die rechte Seite der letzten Gleichung als  $-\frac{\partial}{\partial \theta} V_{\text{eff}}(\theta)$ , also

$$\frac{\partial}{\partial \theta} V_{\text{eff}}(\theta) = \frac{g}{r} \sin \theta - \frac{C^2 \cos \theta}{m^2 R^4 \sin^3 \theta} \implies V_{\text{eff}}(\theta) = -\frac{g}{R} \cos \theta + \frac{1}{2} \frac{C^2}{m^2 R^4} \frac{1}{\sin^2 \theta} .$$

Damit haben wir nun ein „Potential“  $V_{\text{eff}}(\theta)$  bestimmt, durch welches wir über

$$\begin{aligned} \ddot{\theta} = -\frac{\partial}{\partial \theta} V_{\text{eff}}(\theta) &\iff \ddot{\theta} \cdot \dot{\theta} = -\frac{\partial}{\partial \theta} V_{\text{eff}}(\theta) \dot{\theta} \iff \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} \dot{\theta}^2(t) \right) = -\frac{d}{dt} V_{\text{eff}}(\theta(t)) \\ &\implies \frac{1}{2} \dot{\theta}^2 + V_{\text{eff}}(\theta) = C \end{aligned}$$

das Problem in eine quadratische Differentialgleichung erster Ordnung für  $\theta(t)$  umformen. Hiermal erhält man nun zumindest eine qualitative Bestimmung der Bewegung, so gilt in den beiden Grenzfällen des Bewegungszustands

$$\theta \rightarrow 0 : V_{\text{eff}}(\theta) \rightarrow \infty \quad \text{und} \quad \theta \rightarrow \pi : V_{\text{eff}}(\theta) \rightarrow \infty .$$

Falls  $\theta = \theta_0$  konstant gilt, dann ist das zugehörige  $\dot{\varphi}$  ebenfalls konstant (vgl. obige Einsetzung von  $\dot{\varphi}$  in die Lagrange-Gleichung), d.h. es gibt hier eine konstante Azimutalgeschwindigkeit (Kreisen des Pendels um die Normale der Erdoberfläche). Falls die Konstante  $C > C_0$  ist, so muss die Bewegung auf  $\theta_1 \leq \theta \leq \theta_2$  eingeschränkt sein, für  $C \geq C_0$  kann sie auch nah bei  $\theta_0$  sein. Entwickle nun

$$-\frac{\partial V_{\text{eff}}}{\partial \theta} = F_{\theta}(\theta) = \underbrace{F_{\theta}(\theta_0)}_0 + (\theta - \theta_0) \left. \frac{\partial F_{\theta}}{\partial \theta} \right|_{\theta_0} = -(\theta - \theta_0) \underbrace{\frac{g}{\cos \theta_0}}_{\omega^2} (1 + 3 \cos^2 \theta_0)$$

in eine Taylorreihe bis zu ersten Glied, dann erhalten wir mit

$$\ddot{\theta} = F_{\theta}(\theta) = -(\theta - \theta_0) \omega^2$$

und  $\theta - \theta_0 := \theta' \dot{\theta}' + \omega^2 \theta' = 0$  einen harmonischen Oszillator, also ist  $\theta' \propto A \sin(\omega t)$ . Es folgt

$$\dot{\varphi}(t) = \frac{C}{mR^2 \sin \theta} \implies \theta = \theta_0 + A \sin(\omega t) .$$

### 2.5. Das Hamiltonsche Prinzip der kleinsten Wirkung

Bisher haben wir die Lagrange-Gleichung aus dem Differentialprinzip von D'Alembert abgeleitet bzw. aus der Newtonschen Bewegungsgleichung. Alternativ werden wir sie nun aus einem Integralprinzip herleiten, welches sich auf die Bewegung als Ganzes bezieht. Dazu ist aber zuerst einige mathematische Vorbereitung nötig.

### 2.5.1. Variationsrechnung in einer Funktion

Gegeben sei eine Funktion  $y : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ , wobei die Funktion  $y(t)$  und ihre Ableitung  $\dot{y}(t)$  irgendwie miteinander funktional zu einer neuen Funktion  $I(y(t), \dot{y}(t), t)$  verknüpft seien. Für zwei beliebige feste Werte  $t_1$  und  $t_2$  betrachte man dann das Integral-Funktional

$$J = J[y] = \int_{t_1}^{t_2} I(y(t), \dot{y}(t), t) .$$

Dies ist ein Funktion  $y(t) \mapsto J[y] \in \mathbb{C}$ . Das Problem der Variationsrechnung ist nun: Für welche Funktion  $y(t)$  nimmt  $J$  einen stationären, extremalen Wert an, wenn man sich auf solche  $y(t)$  beschränkt, die an den Grenzen bestimmte vorgegebene, feste Werte haben, sodass  $y(t_1) = y_1$  und  $y(t_2) = y_2$  gilt?

**Beispiel:** Betrachten wir beispielsweise als Funktional die Bogenlänge des Graphen der Funktion  $y(t)$ , also

$$S[y] = \int_C ds = \int_{\tau_1}^{\tau_2} \sqrt{\left(\frac{dt}{d\tau}\right)^2 + \left(\frac{dy}{d\tau}\right)^2} d\tau = \int_{t_1}^{t_2} \sqrt{1 + \left(\frac{dy}{dt}\right)^2} dt = \int_{t_1}^{t_2} \sqrt{1 + \dot{y}^2} dt .$$

Für welche Funktion  $y(t)$  ist die Bogenlänge  $S[y]$  bei vorgegebenem  $(t_1, y_1)$  und  $(t_2, y_2)$  minimal?

Eine notwendige Bedingung für die Extremalität des Funktionals ist zunächst einmal die Stationarität. Sei  $y(t)$  die gesuchte Funktion, die das Funktion  $J$  extremal macht, dann betrachte eine infinitesimal benachbarte Funktion, welche durch dieselben Anfangs- und Endpunkte geht. Die Variation der Funktion  $y(t)$  sei durch  $\delta y(t)$  gegeben, die infinitesimal benachbarte Funktion sei also  $\tilde{y}(t) = y(t) + \delta y(t)$ , und insbesondere muss dann für das Funktional dieser Variation  $\delta J = 0$  gelten. Man setze

$$\delta y(t) = \varepsilon \eta(t) ,$$

wobei die Funktion  $\eta(t)$  beliebig mit  $\eta(t_1) = \eta(t_2) = 0$  sei. Dann setze der Kürze halber  $y(t, \varepsilon) := y(t) + \delta y(t) = y(t) + \varepsilon \eta(t)$ . Man bilde damit dann nun

$$J_\varepsilon[y] = \int_{t_1}^{t_2} I_\varepsilon(y, \dot{y}, t) dt = \int_{t_1}^{t_2} I(y(t, \varepsilon), \dot{y}(t, \varepsilon), t) dt ,$$

sodass bei gegebenen Funktionen  $y(t)$  und  $\eta(t)$  das Funktional eine Funktion in  $\varepsilon$  ist. Damit das Funktional  $J_\varepsilon$  nun stationär wird, muss

$$\left. \frac{d}{d\varepsilon} J_\varepsilon \right|_{\varepsilon=0} = 0$$

gelten. Berechnen wir explizit die  $\varepsilon$ -Ableitung des Funktionals, so erhalten wir

$$\frac{d}{d\varepsilon} J_\varepsilon = \frac{d}{d\varepsilon} \int_{t_1}^{t_2} I_\varepsilon dt = \int_{t_1}^{t_2} \left( \frac{\partial I}{\partial y} \frac{dy}{d\varepsilon} + \frac{\partial I}{\partial \dot{y}} \frac{d\dot{y}}{d\varepsilon} \right) dt$$

mit  $\frac{dy}{d\varepsilon} = \eta(t)$  und  $\frac{d\dot{y}}{d\varepsilon} = \frac{d}{dt} \frac{dy}{d\varepsilon} = \frac{d}{dt} \eta(t)$  wegen Vertauschbarkeit von Differentiationen, also folgt

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon} J_\varepsilon &= \int_{t_1}^{t_2} \left( \frac{\partial I}{\partial y} \eta(t) + \frac{\partial I}{\partial \dot{y}} \frac{d\eta}{dt} \right) dt \stackrel{\text{p.I.}}{=} \int_{t_1}^{t_2} \left( \frac{\partial I}{\partial y} \eta(x) - \frac{d}{dt} \frac{\partial I}{\partial \dot{y}} \eta(t) \right) dt + \underbrace{\left. \frac{\partial I}{\partial \dot{y}} \eta(t) \right|_{t_1}}_0 \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left( \frac{\partial I}{\partial y} - \frac{d}{dt} \frac{\partial I}{\partial \dot{y}} \right) \eta(t) dt . \end{aligned}$$

## 2. Der Lagrange-Formalismus

---

Nach der geforderten Stabilitätsgleichung folgt dann nun die Bedingung

$$\int_{t_1}^{t_2} \left( \frac{\partial I}{\partial y} - \frac{d}{dt} \frac{\partial I}{\partial \dot{y}} \right) \eta(t) dt \Big|_{\varepsilon=0} = 0 ,$$

und da diese für beliebige Variationsfunktionen  $\eta(t)$  mit  $\eta(t_1) = \eta(t_2) = 0$  gelten muss, erhält man nun mit

$$\frac{\partial I}{\partial y} - \frac{d}{dt} \frac{\partial I}{\partial \dot{y}} = 0$$

die Euler-Lagrange-Gleichung des Variationsproblems. Diese Differentialgleichung für  $y(t)$  hat im Allgemeinen unendlich viele Lösungen. Jede Lösung, für die die Randbedingungen  $y(t_1) = y_1$  und  $y(t_2) = y_2$  erfüllt sind, ist die gesuchte Funktion.

**Beispiel:** Im vorigen Beispiel der Bogenlänge hat man als Funktion  $I(y, \dot{y}, t) = \sqrt{1 + \dot{y}^2(t)}$ , also folgt durch Einsetzen

$$\frac{\partial}{\partial y} \sqrt{1 + \dot{y}^2(t)} - \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{y}} \sqrt{1 + \dot{y}^2(t)} = \frac{d}{dt} \frac{\dot{y}}{\sqrt{1 + \dot{y}^2}} = 0 ,$$

wobei letzteres die zum Problem gehörende Euler-Lagrange-Gleichung ist. Die Lösung ist dann wegen der zeitlichen Ableitung durch

$$\frac{\dot{y}}{\sqrt{1 + \dot{y}^2}} = C \iff \dot{y}^2 = \frac{C^2}{1 - C^2} = \tilde{C}^2$$

gegeben, also ist  $\dot{y}$  konstant. Aus den Randbedingungen ergibt sich dann  $y(t) = at + b$ , und offensichtlich ist eine gerade Strecke die richtige Lösung zum Problem der kürzesten Bogenlänge.

### 2.5.2. Variationsrechnung für mehrere Funktionen

Das vorgestellte Variationskonzept lässt sich auch auf mehrere Funktionen verallgemeinern. Dazu betrachte  $f$  Funktionen  $y_1(t), \dots, y_f(t)$  und  $I = I(y_1, \dots, y_f, \dot{y}_1, \dots, \dot{y}_f)$  als das Integral-definierende Funktional zu

$$J[y_1, \dots, y_f] = \int_{t_1}^{t_2} I(y_1(t), \dots, y_f(t), \dot{y}_1(t), \dots, \dot{y}_f(t), t) dt .$$

Analog zum vorigen Fall stellt sich nun die Frage, für welche  $f$  Funktionen  $y_1(t), \dots, y_f(t)$  dieses Integral stationär wird, wenn die Randbedingungen  $y_i(t_1) = y_i^{(1)}$  und  $y_i(t_2) = y_i^{(2)}$  fest sind. Dazu betrachte wieder die Variation

$$y_i(t) = y_i(t) + \delta y_i(t) = y_i(t) + \varepsilon \eta_i(t) = y_i(t, \varepsilon)$$

mit  $\eta_i(t_1) = \eta_i(t_2) = 0$  für alle  $i = 1, \dots, f$  und das entsprechende  $\varepsilon$ -abhängige Funktional

$$J_\varepsilon[y_1, \dots, y_f] = \int_{t_1}^{t_2} I(y_1(t, \varepsilon), \dots, y_f(t, \varepsilon), \dot{y}_1(t, \varepsilon), \dots, \dot{y}_f(t, \varepsilon), t) dt .$$

Nach der allgemein gültigen Stabilitätsbedingungen  $\frac{d}{d\varepsilon} J_\varepsilon \Big|_{\varepsilon=0} = 0$  erhalten wir dann

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon} J_\varepsilon &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_i \left( \frac{\partial I}{\partial y_i} \frac{dy_i}{d\varepsilon} + \frac{\partial I}{\partial \dot{y}_i} \frac{d\dot{y}_i}{d\varepsilon} \right) dt \\ &\stackrel{\text{P.I.}}{=} \int_{t_1}^{t_2} \sum_i \left( \frac{\partial I}{\partial y_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial I}{\partial \dot{y}_i} \right) \eta_i(t) dt + \overbrace{\sum_i \frac{\partial I}{\partial y_i} \eta_i(t) \Big|_{t_1}^{t_2}}^0 \implies \frac{\partial I}{\partial y_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial I}{\partial \dot{y}_i} = 0 \end{aligned}$$

für alle  $i = 1, \dots, f$  - also genau dieselbe Euler-Lagrange-Gleichung, wie zuvor für eine Funktion.

### 2.5.3. Das Prinzip der kleinsten Wirkung

Das gefundene Ergebnis muss nun physikalisch interpretiert werden, denn ersetzen wir in der vorigen, prinzipiell rein mathematischen Betrachtung,  $y_i(t) \rightarrow q_\alpha(t)$  und  $I(y, \dot{y}, t) \rightarrow L(q, \dot{q}, t)$ , so erhalten wir genau die Euler-Lagrange-Gleichung, die zuvor aus dem D'Alembertschen Prinzip der virtuellen Verrückungen hergeleitet wurde.

Da die Lösung der Lagrange-Gleichung genau die physikalische Bewegung des Systems beschreibt und vollständig durch Vorgabe von  $q_\alpha(t_1)$  und  $q_\alpha(t_2)$  determiniert ist, sie aber andererseits auch jede Funktion darstellt, welche das Integral

$$\int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt$$

stationär macht, gilt das **Prinzip der kleinsten Wirkung**. Übertragen auf die Lagrange-Funktion lässt sich dieses wie folgt formulieren: Ein System sei beschrieben durch die Lagrange-Funktion  $L(q, \dot{q}, t)$ . Für zwei beliebige Zeiten  $t_1$  und  $t_2$  sei die Konfiguration des Systems vorgegeben durch

$$q_\alpha(t_1) = q_\alpha^{(1)} \quad \text{und} \quad q_\alpha(t_2) = q_\alpha^{(2)} .$$

Dann ist die tatsächliche (physikalische) Bewegung des Systems zwischen  $q_\alpha^{(1)}$  und  $q_\alpha^{(2)}$  jene, für die das Wirkungsfunktional

$$S[q] = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt$$

stationär ist, möglicherweise ein Extremum annimmt, oder - was äquivalent ist - bei deren speziellen Variationen  $\delta q(t)$  mit  $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$  für das Wirkungsintegral  $\delta S = 0$  liefert.

**Bemerkung:** Das Prinzip der kleinsten Wirkung ist in der Physik von zentraler Bedeutung. Es handelt sich dabei um ein Integralprinzip (im Unterschied zum differentiellen Prinzip), d.h. die Wirkung ist von der Bewegung  $\{q(t) : \text{für alle } t\}$  abhängig. Prinzipiell lässt sich die gesamte Mechanik auch auf diesem Prinzip aufbauen, wie etwa von Landau unternommen. Außerdem handelt es sich auch um ein koordinatenunabhängiges Prinzip, welches sich leicht auch nicht-mechanische Probleme verallgemeinern lässt - es ist ein fundamentales Prinzip der Ökonomie der Natur, und findet auch in Wirtschaftsfragen eine Anwendung. Die Eichfreiheit der Lagrange-Funktion unter  $L \rightarrow \tilde{L} = L + \frac{d}{dt}M$  ist deutlich sichtbar im Wirkungsfunktional

$$\tilde{S}[q] = \int_{t_1}^{t_2} \tilde{L}(q, \dot{q}, t) dt = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt + \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt} M(q, t) dt = S[q] + M(q, t) \Big|_{t_1}^{t_2} .$$

## 3. Symmetrien und Erhaltungssätze

### 3.1. Allgemeines über Symmetrietransformationen

Erscheint eine der verallgemeinerten Koordinaten  $q_\beta$  des Systems  $\{q_\alpha : \alpha = 1, \dots, f\}$  nicht explizit in der Lagrange-Funktion  $L$ , wohl aber ihre zeitliche Ableitung  $\dot{q}_\beta$ , dann nennen wir diese Koordinate **zyklisch**. Für sie gilt unter Verwendung der Euler-Lagrange-Gleichung dann insbesondere

$$\frac{\partial L}{\partial q_\beta} = 0 \quad \implies \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\beta} = 0 .$$

Man definiert nun allgemein durch

$$p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}$$

den zu einer (beliebigen) verallgemeinerten Koordinate **konjugiert kanonischen Impuls**. Für eine zyklische verallgemeinerte Koordinate  $q_\beta$  folgt dann  $\frac{d}{dt} p_\beta = 0$ . Man beachte, dass allgemein  $p_\beta = p_\beta(q, \dot{q}, t) = p_\beta(q(t), \dot{q}(t), t)$  gilt.

**Definition 10:** Eine Variable  $V(q, \dot{q}, t)$  heißt **Erhaltungsgröße** oder **Konstante der Bewegung**, wenn

$$\frac{d}{dt} V(q(t), \dot{q}(t), t) = 0$$

für jede Bewegung  $q(t)$ , die der Lagrange-Gleichung genügt, gilt.

Demnach ist der zu einer zyklischen Variable konjugiert kanonische Impuls eine Erhaltungsgröße. Oft ist eine zyklische Koordinate mit einer Symmetrie des Systems verknüpft, wie wir es etwa beim sphärischen Pendel gesehen haben - dort lag eine Zylindersymmetrie um die  $z$ -Achse vor. Man vermutet daher einen Zusammenhang zwischen Symmetrie und Erhaltungsgrößen.

**Definition 11:** Man betrachte eine Punkt-Transformation der (verallgemeinerten) Koordinaten  $q_\alpha \rightarrow \tilde{q}_\alpha(q, t) = f_\alpha(q, t)$  für  $\alpha = 1, \dots, f$ , diese sei invertierbar, d.h. es existiert umgekehrt auch  $q_\alpha = q_\alpha(\tilde{q}, t)$ . Diese Transformation ist eine **Symmetrietransformation**, wenn sich dabei die Physik nicht ändert, d.h. (im Rahmen der Mechanik) wenn die Bewegungsgleichungen dieselben bleiben.

Die Bewegungsgleichungen seien dabei durch einen funktionalen Zusammenhang der Form  $X_i(q, \dot{q}, \ddot{q}, t) = 0$  gegeben, dann ist  $q_\alpha \rightarrow \tilde{q}_\alpha(q, t)$  eine Symmetrietransformation, wenn auch  $X_i(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, \ddot{\tilde{q}}, t) = 0$  gilt.

**Beispiel:** Betrachte beispielsweise  $X_i : m\ddot{r}_i - F(r_i, \dot{r}_i, t) = 0$ , dann ist  $r_i \rightarrow \tilde{r}_i$  eine Symmetrietransformation, wenn auch  $m\ddot{\tilde{r}}_i - F(\tilde{r}_i, \dot{\tilde{r}}_i, t) = 0$  gilt.

Es stellt sich die Frage, was diese Forderung für eine Lagrange-Funktion impliziert. Zunächst einmal muss die Wirkung  $S[q]$  dieselbe sein. Mit der aus dem Prinzip der kleinsten Wirkung bereits bekannten Beziehung

$$S = \int L dt$$

hat man nun zwei Möglichkeiten: Entweder ist die Lagrange-Funktion invariant, d.h. sie hat dieselbe funktionale Form in den  $q_\alpha$  und den  $\tilde{q}_\alpha$ , oder sie ändert sich nur um eine totale Zeitableitung (die in der bereits behandelten Eichinvarianz der Lagrange-Funktion aufgeht).

Dies lässt sich auch anders ausdrücken: Sei die Lagrange-Funktion  $L(q, \dot{q}, t)$  in den verallgemeinerten Komponenten  $q_\alpha$  eines Systems bekannt und  $q_\alpha \rightarrow \tilde{q}_\alpha(q, t)$  eine Symmetrietransformation, dann gilt

$$\begin{aligned} L(q, \dot{q}, t) &= L(q(\tilde{q}, t), \dot{q}(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t), t) = \tilde{L}(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t) \stackrel{\text{Sym.}}{=} L(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t) + \frac{d}{dt}G(\tilde{q}, t) \\ \iff L(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t) &= L(q, \dot{q}, t) - \frac{d}{dt}G(\tilde{q}, t) = L(q, \dot{q}, t) + \frac{d}{dt}M(q, t) , \end{aligned}$$

also ist eine Transformation  $q_\alpha \rightarrow \tilde{q}_\alpha(q, t)$  genau dann eine Symmetrietransformation, wenn eine geeignete Funktion  $F(q, t)$  existiert, sodass

$$L(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t) = L(q, \dot{q}, t) + \frac{d}{dt}F(q, t)$$

gilt. Im Bezug auf die Eichfunktion  $F$  führt man folgende Fallunterscheidung ein: Gilt  $\frac{d}{dt}F = 0$ , so ist die Lagrange-Funktion **streng invariant**, für  $\frac{d}{dt}F \neq 0$  nur **quasi-invariant**.

Häufig treten Symmetrietransformationen in Gruppen, sogenannten **Symmetriegruppen**, auf. Die verschiedenen Transformationen dieser (kontinuierlichen) Gruppen werden mittels reeller Parameter  $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r$  gekennzeichnet<sup>1</sup>, z.B. durch  $\varphi$  (Zylindersymmetrie) oder  $\omega$  (Kugelsymmetrie), etc. Eine beliebige Symmetrietransformation ist also beschrieben durch

$$q_\alpha \rightarrow \tilde{q}_\alpha(q, t) = f_\alpha(q, t; \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r) .$$

Im Folgenden bezeichnen wir mit  $\varepsilon_j$  stets einen kompletten Satz von  $r$  Parametern.

### 3.2. Das Noether-Theorem

Eines der wichtigsten Theoreme der Physik wurde von der Mathematikerin Emmy Noether formuliert, es liefert den Zusammenhang zwischen Symmetrietransformationen und den assoziierten Erhaltungsgrößen. Wir betrachten ein System mit der Lagrange-Funktion  $L(q, \dot{q}, t)$ , welche invariant unter den Transformationen der Symmetriegruppe

$$G = \{q_\alpha \rightarrow \tilde{q}_\alpha = f_\alpha(q, t; \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r) =: f(q, t; \varepsilon_j) \text{ für alle } \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_r\}$$

ist, wobei  $f_\alpha(q, t; 0) = (q, t)$  gelte, sprich für  $\varepsilon_j = 0$  erhält man die unmodifizierten Koordinaten. Dann gilt für jeden festen Satz von Parametern  $\varepsilon_j$  nach dem Ergebnis des letzten Abschnitts

$$L(\tilde{q} = f_\alpha(q, t; \varepsilon_j), \dot{\tilde{q}}, t) = L(q, \dot{q}, t) + \frac{d}{dt}F(q, t; \varepsilon_j) .$$

<sup>1</sup>Aus mathematischer Sicht sind Symmetriegruppen also in der Regel Lie-Gruppen, d.h. kontinuierliche Gruppen, die zugleich differenzierbare reelle Mannigfaltigkeiten der Dimension  $r$  sind.

### 3. Symmetrien und Erhaltungssätze

---

Man differenziere nun nach einem beliebigen Parameter  $\varepsilon_i$  und setze dann  $\varepsilon_j = 0$ , also

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\varepsilon_i} L(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t) &= \underbrace{\frac{d}{d\varepsilon_i} L(q, \dot{q}, t)}_0 + \frac{d}{d\varepsilon_i} \frac{d}{dt} F(q, t; \varepsilon_j) \\ \iff \sum_{\beta} \left( \frac{\partial L}{\partial \tilde{q}_{\beta}} \frac{d\tilde{q}_{\beta}}{d\varepsilon_i} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\tilde{q}}_{\beta}} \frac{d\dot{\tilde{q}}_{\beta}}{d\varepsilon_i} \right) &= \frac{d}{dt} \frac{d}{d\varepsilon_i} F . \end{aligned}$$

für alle  $i = 1, \dots, r$ . Mit  $\frac{\partial L}{\partial \tilde{q}_{\beta}} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\tilde{q}}_{\beta}}$  und  $\frac{d\dot{\tilde{q}}_{\beta}}{d\varepsilon_i} = \frac{d}{dt} \frac{d\tilde{q}_{\beta}}{d\varepsilon_i}$  ergibt sich daraus

$$\sum_{\beta} \left[ \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\tilde{q}}_{\beta}} \right) \frac{d\tilde{q}_{\beta}}{\varepsilon_i} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\tilde{q}}_{\beta}} \left( \frac{d}{dt} \frac{d\tilde{q}_{\beta}}{\varepsilon_i} \right) \right] = \frac{d}{dt} \sum_{\beta} \frac{\partial L}{\partial \dot{\tilde{q}}_{\beta}} \frac{d\tilde{q}_{\beta}}{\varepsilon_i} = \frac{d}{dt} \frac{d}{d\varepsilon_i} F .$$

Setzt man nun  $\varepsilon_j = 0$ , so folgt in der Formulierung mit  $\tilde{q}_{\beta} = f_{\beta}$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left( \sum_{\beta} \frac{\partial L}{\partial \dot{\tilde{q}}_{\beta}} \frac{df_{\beta}}{\varepsilon_i} - \frac{d}{d\varepsilon_i} F(q, t; \varepsilon_j) \right) \Big|_{\varepsilon_j=0} \\ = \frac{d}{dt} \left[ \sum_{\beta} \frac{\partial L}{\partial \dot{\tilde{q}}_{\beta}} \left( \frac{df_{\beta}}{\varepsilon_i} \right)_{\varepsilon_j=0} - \left( \frac{d}{d\varepsilon_i} F(q, t; \varepsilon_j) \right)_{\varepsilon_j=0} \right] = 0 , \end{aligned}$$

d.h. wir erhalten schließlich  $r$  Erhaltungsgrößen der Form

$$\sum_{\alpha} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\alpha}} \left( \frac{df_{\alpha}}{d\varepsilon_i} \right)_{\varepsilon_j=0} - \left( \frac{d}{d\varepsilon_i} F \right)_{\varepsilon_j=0}$$

für  $i = 1, \dots, r$ . Zu der  $r$ -parametrischen Symmetriegruppe  $G$  existieren also  $r$  Erhaltungsgrößen, sogenannte Noether-Ladungen,  $Q_i$  für  $i = 1, \dots, r$ . Ist insbesondere die Lagrange-Funktion streng invariant unter den  $G$ -Symmetrietransformationen, so verschwindet wegen  $F(q, t; \varepsilon_j) = 0$  der zweite Term, und es gilt

$$Q_i = \sum_{\alpha} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\alpha}} \left( \frac{df_{\alpha}}{d\varepsilon_i} \right)_{\varepsilon_j=0} .$$

### 3.3. Die zehn fundamentalen Erhaltungsgrößen

Mithilfe des Noether-Theorem werden wir nun aus einfachen Symmetrieeigenschaften, die in nahezu jedem System gegeben sind, die zehn fundamentalen Erhaltungsgrößen herleiten. Dazu betrachte ein System ohne Zwangsbedingungen mit der Lagrange-Funktion

$$L = T - V = \sum_i \frac{m_i}{2} \dot{r}_i^2 - V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) ,$$

wobei dann als verallgemeinerte Koordinaten die kartesischen  $q_{\alpha} = r_{i,a}$  für  $i = 1, \dots, N$  und  $a = 1, 2, 3$  gewählt werden.

### 3.3.1. Räumliche Translations-Invarianz: Impuls

Die Lagrange-Funktion  $L$  sei (quasi-)invariant unter der Gruppe der räumlichen Translationen, die durch

$$\vec{r}_i \rightarrow \tilde{\vec{r}}_i = \vec{r}_i + \vec{\xi}$$

für einen beliebigen Translationsvektor  $\vec{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$  für alle  $i = 1, \dots, N$  gegeben ist. In den einzelnen Koordinaten ausgedrückt gilt also  $r_{i,a} \rightarrow \tilde{r}_{i,a} = r_{i,a} + \xi_a$ .

Falls die Lagrange-Funktion streng invariant ist, also  $\frac{d}{dt}F = 0$  gilt, so erhalten wir als Noether-Ladungen

$$Q_i = \sum_{\alpha} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\alpha}} \left( \frac{df_{\alpha}}{d\varepsilon_i} \right)_{\varepsilon_j=0} \quad \text{wobei} \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\alpha}} \rightarrow \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_{i,a}} = \frac{\partial T}{\partial \dot{r}_{i,a}} = m_i \dot{r}_{i,a}$$

gilt. Wegen  $f_{\alpha}(q; \varepsilon) : r_{i,a} \rightarrow \tilde{r}_{i,a} = r_{i,a} + \xi_a = f_{i,a}(r; \xi_1, \xi_2, \xi_3)$  erhalten wir eine drei-parametrische Symmetriegruppe, wobei die  $\xi_1, \xi_2, \xi_3$  die Gruppenparameter  $\varepsilon_j$  sind. Es gilt also

$$\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \varepsilon_i} \rightarrow \frac{\partial f_{i,a}}{\partial \xi_c} = \delta_{ac} \quad \Longrightarrow \quad Q_i \rightarrow Q_c = \sum_{i,a} m_i \dot{r}_{i,a} \delta_{ac} = \sum_i m_i \dot{r}_{i,c} = \sum_i p_{i,c} = P_c .$$

Demnach folgt also aus der Invarianz bzw. Symmetrie unter Translationen die Erhaltung des Gesamtimpulses. Bei einem abgeschlossenen System garantiert die Homogenität des Raumes die Translations-Invarianz und damit die Gesamtimpulserhaltung.

**Beispiel:** Eine translationsinvariante Lagrange-Funktion ist etwa durch

$$L = \sum_i \frac{m_i}{2} \dot{\vec{r}}_i^2 - \sum_{i \neq j} V_{ij}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$$

gegeben, denn es gilt  $\vec{r}_i - \vec{r}_j \rightarrow \tilde{\vec{r}}_i - \tilde{\vec{r}}_j = (\vec{r}_i + \vec{a}) - (\vec{r}_j + \vec{a}) = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ .

Sofern am System ein äußeres Feld anliegt, geht im Allgemeinen leider keine oder nur noch eine eingeschränkte Translations-Invarianz, also ist der Gesamtimpuls  $\vec{P}$  nicht erhalten.

**Beispiel:** Betrachte ein äußeres Gravitationsfeld. Gilt  $\vec{F} - mg\hat{z} = 0$  für die vom Gravitationspotential  $V = V(z) = mgz$  repräsentierte Kraft, so bleiben nur  $P_x$  und  $P_y$  erhalten.

Ein zweites Beispiel ist durch ein geladenes Teilchen gegeben, welches sich in einem äußeren elektromagnetischen Feld, dargestellt durch die Potentiale  $(\Phi, \vec{A})$ , befindet. Die Lagrange-Funktion lautet hier

$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 - q \left( \Phi - \frac{1}{c} \vec{A} \cdot \dot{\vec{r}} \right) ,$$

d.h. eine Impulserhaltung liegt nur für den Fall  $\Phi(\vec{r} + \vec{\xi}) = \Phi(\vec{r})$  und  $\vec{A}(\vec{r} + \vec{\xi}) = \vec{A}(\vec{r})$  vor - und dies impliziert konstante Potentiale, welches wiederum zu verschwindenden Feldern führen. Sind aber  $\Phi$  und  $\vec{A}$  nur von den Koordinaten  $y$  und  $z$  abhängig, so bleibt  $p_x$  erhalten und es gilt  $p_x = m\dot{x} - \frac{q}{c} A_x$ .

Zuletzt betrachten wir noch den Fall, dass die Lagrange-Funktion  $L$  nur quasi-invariant unter der Gruppe  $G$  ist. In diesem Fall ist nicht der Gesamtimpuls  $\vec{P}$ , sondern die Größe  $\vec{P}_c - \frac{d}{d\xi_c}F$  für  $c = 1, 2, 3$  erhalten.

### 3.3.2. Räumliche Rotations-Invarianz: Drehimpuls

Als nächstes sei die Lagrange-Funktion invariant unter der Gruppe der Drehungen, also unter  $\vec{r}_i \rightarrow \tilde{\vec{r}}_i = R\vec{r}_i = \vec{\omega} \times \vec{r}_i$ , wobei die Matrix  $R \in \text{SO}(3)$  die Rotation darstellt. Dabei ist die  $\text{SO}(3)$ -Rotationsgruppe bzw. der Vektor  $\vec{\omega}$  ebenfalls drei-parametrig, und in Koordinaten gilt

$$r_{i,a} \rightarrow \tilde{r}_{i,a} = \epsilon_{ade}\omega_d r_{i,e} = f_{i,a}(\omega_1, \omega_2, \omega_3) ,$$

also folgt wie zuvor

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \rightarrow \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_{i,a}} = m_i \dot{r}_{i,a} \quad \text{und} \quad \frac{\partial f_a}{\partial \varepsilon_i} \rightarrow \frac{\partial f_{i,a}}{\partial \omega_c} = \epsilon_{ade} \delta_{dc} r_{i,e} = \epsilon_{ace} r_{i,e} ,$$

sodass wir als zugehörige Noether-Ladungen bzw. Erhaltungsgrößen

$$Q_i \rightarrow Q_c = \sum_{i,a} m_i \dot{r}_{i,a} \epsilon_{ace} r_{i,e} = \sum_{i,a} \epsilon_{cea} r_{i,e} m_i \dot{r}_{i,a} = \sum_i (\vec{r}_i \times m_i \dot{\vec{r}}_i)_c = \sum_i \ell_{i,c} = L_c$$

für  $c = 1, 2, 3$  bekommen. Demnach liefert die Invarianz bzw. Symmetrie unter Drehungen des Systems die Erhaltung des Gesamtdrehimpulses  $\vec{L}$ . Bei abgeschlossenen Systemen garantiert die Isotropie des Raumes die notwendige Invarianz unter Drehungen.

**Beispiel:** Betrachte noch einmal die zuvor bereits erwähnte Lagrange-Funktion, jetzt allerdings mit Beträgen

$$L = \sum_i \frac{m_i}{2} \dot{\vec{r}}_i^2 - \sum_{i \neq j} V_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \left( + \sum_i V_i(|\vec{r}_i|) \right)$$

sodass jegliche Richtungsabhängigkeit des Systems herausfällt.

Falls nur eine Invarianz unter Drehungen in eine Richtung gegeben ist, dann ist folglich auch nur die Projektion des Drehimpulses auf diese Richtung erhalten.

### 3.3.3. Spezielle Galilei-Invarianz: Schwerpunktsbewegung

Nun sei  $L$  quasi-invariant unter speziellen Galilei-Transformationen der Form

$$\vec{r}_i \rightarrow \tilde{\vec{r}}_i = \vec{r}_i + \vec{v}t ,$$

für  $i = 1, \dots, N$ , also unter Transformationen für Relativbewegungen konstanter Geschwindigkeit  $\vec{v}$ . In einzelnen Koordinaten gilt also  $r_{i,a} \rightarrow \tilde{r}_{i,a} = r_{i,a} + v_a t = f_{i,a}(v_1, v_2, v_3)$ , sodass man für die kinetische Energie  $T$  dann

$$T(\vec{r}_i) = \sum_i \frac{m_i}{2} \dot{\vec{r}}_i^2 \quad \rightarrow \quad T(\tilde{\vec{r}}_i) = \sum_i \frac{m_i}{2} \dot{\tilde{\vec{r}}}_i^2 = \sum_i \frac{m_i}{2} \dot{\vec{r}}_i^2 + \sum_i \frac{m_i}{2} (\vec{v}^2 + 2\vec{v}\dot{\vec{r}}_i) \neq T(\vec{r}_i)$$

erhält - diese ist also nicht invariant unter den speziellen Galilei-Transformationen. Der zusätzliche Term geht durch

$$\sum_i \frac{m_i}{2} (\vec{v}^2 + 2\vec{v}\dot{\vec{r}}_i) = \frac{d}{dt} \sum_i \frac{m_i}{2} (\vec{v}^2 t + 2\vec{v}\vec{r}_i) =: \frac{d}{dt} F(\vec{r}; \vec{v})$$

in die zusätzliche Eichfunktion von Symmetrietransformationen ein, somit liegt kein Problem vor. Das Potential  $V$  sei nun aber invariant unter Galilei-Transformationen, dann gilt

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \rightarrow \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_{i,a}} = m_i \dot{r}_{i,a} \quad \text{und} \quad \frac{\partial f_\alpha}{\partial \varepsilon_i} \rightarrow \frac{\partial f_{i,a}}{\partial v_c} = \delta_{ac} t$$

wegen  $f_{i,a} = r_{i,a} + v_a t$ , und man erhält als zugehörige Noether-Ladungen

$$\begin{aligned} Q_i \rightarrow Q_c &= \sum_{i,a} m_i \dot{r}_{i,a} \delta_{ac} t - \left( \frac{d}{dv_c} F \right)_{v_j=0} = t \sum_i m_i \dot{r}_{i,c} - \sum_i \frac{m_i}{2} (2v_c t + 2r_{i,c}) \Big|_{v_j=0} \\ &= t P_c - t v_c \sum_i m_i \Big|_{v_j=0} - \sum_i m_i r_{i,c} \Big|_{v_j=0} = t P_c - M R_c . \end{aligned}$$

Es ist also  $t\vec{P} - M\vec{R} = M\vec{R}_0 \iff \vec{R} = \frac{t}{M}\vec{P} + \vec{R}_0$  die Erhaltungsgröße zur speziellen Galilei-Invarianz, diese liefert uns folglich den Schwerpunktsatz.

### 3.3.4. Zeitliche Translationen: Energie

Bisher haben wir als Symmetrietransformationen lediglich Koordinatentransformationen der  $q_\alpha$  betrachtet. Da Zeit (in der Newtonschen Mechanik, nicht aber etwa in der Relativitätstheorie) universell vorgegeben ist, macht es physikalisch zunächst keinen Sinn einfache Zeittranslationen der Form  $t \rightarrow \tilde{t} = t + b$  zu betrachten. Wenn aber die Lagrange-Funktion  $L(q, \dot{q}, t)$  nicht explizit von  $t$  abhängt, also  $\frac{\partial L}{\partial t} = 0$  gilt, so ist  $L$  formal invariant unter einer derartigen Transformation  $t \rightarrow \tilde{t} = t + b$ . Betrachte dann die vollständige Zeitableitung

$$\frac{d}{dt} L = \frac{d}{dt} L(q(t), \dot{q}(t)) = \sum_\alpha \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \dot{q}_\alpha + \sum_\alpha \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \ddot{q}_\alpha ,$$

so ergibt sich unter Verwendung von  $\frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}$  nach Euler-Lagrange und  $\ddot{q}_\alpha = \frac{d}{dt} \dot{q}_\alpha$  dann

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} L &= \sum_\alpha \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) \dot{q}_\alpha + \sum_\alpha \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \left( \frac{d}{dt} \dot{q}_\alpha \right) = \frac{d}{dt} \sum_\alpha \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \dot{q}_\alpha \\ &\iff \frac{d}{dt} \left( \sum_\alpha \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \dot{q}_\alpha - L \right) = 0 . \end{aligned}$$

Somit erhalten wir eine zeitlich unabhängige Größe

$$h(q, \dot{q}) = \sum_\alpha \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \dot{q}_\alpha - L ,$$

die sogenannte **Energie-** bzw. **Jacobi-Funktion**. Invarianz unter „Zeit-Translationen“ (also keine explizite Zeitabhängigkeit) führt also zu der Erhaltung der Energiefunktion und damit zum Energieerhaltungssatz.

Um die physikalische Bedeutung der Energie-Funktion  $h(q, \dot{q})$  genauer zu verstehen, betrachte den Prototyp

$$L = T - V = \sum_i \frac{m_i}{2} \dot{\vec{r}}_i^2 - V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$$

### 3. Symmetrien und Erhaltungssätze

---

einer Lagrange-Funktion. Das System sei dabei ohne Zwangsbedingungen, sodass wir für die verallgemeinerten Koordinaten die gewöhnlichen kartesischen verwenden können, also  $q_\alpha \rightarrow r_{i,a}$  und  $L(\vec{r}, \dot{\vec{r}})$  gilt. Dann nimmt die Energie-Funktion die Form

$$h = h(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) = \sum_{i,a} m_i \dot{r}_{i,a} \cdot \dot{r}_{i,a} - \left( \sum_i \frac{m_i \dot{r}_i^2}{2} - V \right) = \sum_i \frac{m_i \dot{r}_i^2}{2} + V = T(\dot{\vec{r}}) + V(\vec{r})$$

an, also ist  $h$  die Gesamtenergie  $T + V$  ausgedrückt durch  $\vec{r}$  und  $\dot{\vec{r}}$ . Wir kommen im nächsten Kapitel von einem ganz anderen Betrachtungspunkt aus noch einmal auf diese Funktion zurück.

#### 3.3.5. Übersicht

Wir haben somit vier Typen von Erhaltungsgrößen gefunden, den Gesamtimpuls, den Gesamtdrehimpuls, die Schwerpunktsbewegung sowie die Gesamtenergie. Die jeweils drei Komponenten der ersten drei Größen liefern somit zusammen mit der Gesamtenergie zehn Erhaltungsgrößen, die noch einmal abschließend in einer Tabelle zusammengefasst sind:

Symmetriegruppe	folgt aus	Erhaltungsgröße
räumliche Translationen	Homogenität des Raumes	Gesamtimpuls
räumliche Drehungen	Isotropie des Raumes	Gesamtdrehimpuls
spez. Galilei-Transf.	eingeschränktes Relativitätsprinzip	Schwerpunktsbewegung
zeitliche Translationen	Homogenität der Zeit	Gesamtenergie

**Tabelle 3.1.:** Die zehn fundamentalen Erhaltungsgrößen

Die hier aufgeführten Symmetrietransformationen und ihre Kombinationen bilden zusammen dann die vollständige **Galilei-Gruppe**, deren Transformationen sich als

$$\vec{r} \rightarrow \tilde{\vec{r}} = R\vec{r} + \vec{v}t + \vec{a} \quad t \rightarrow \tilde{t} = t + b$$

formulieren lassen - diese ist folglich zehn-parametrig.

## 4. Der Hamilton-Formalismus

Im Lagrange-Formalismus wurde die Physik durch die verallgemeinerten Koordinaten  $q_\alpha$  sowie ihre zeitlichen Ableitungen  $\dot{q}_\alpha$  beschrieben. Diese Ableitungen sind aber prinzipiell recht „unphysikalische“ Objekte, daher werden wir nun versuchen, eine Abhängigkeit von  $q_\alpha$  und  $p_\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}$  zu finden.

### 4.1. Legendre-Transformationen

Zunächst betrachten wir eine Funktion  $y = y(x)$ . Ihr Informationsgehalt wird vollständig vom Graphen  $\{(x, y) : y = y(x)\}$  wiedergegeben. Man kann dieselbe Information mittels  $D = \frac{dy}{dx}$  beschreiben, beispielsweise wie folgt:

$$D = D(x) = \frac{dy}{dx} \quad \Longrightarrow \quad x = x(D) .$$

Einsetzen von  $x = x(D)$  in die Funktion ergibt  $y(x) = y(x(D)) = y(D)$ , aber  $y = y(D)$  enthält nicht mehr die gesamte Information, die in  $y = y(x)$  enthalten ist

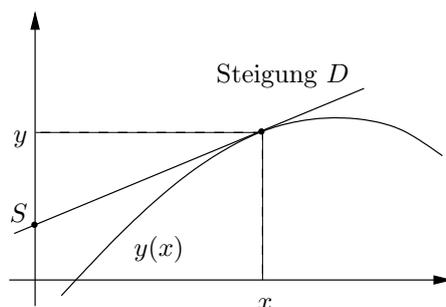
**Beispiel:** Die Ableitung der Polynomfunktion  $y(x) = \frac{1}{2}x^2 + 3x + 1$  lautet  $D(x) = y'(x) = x + 3$ , also gilt umgekehrt  $x = D - 3 = x(D)$ . Aber der Graph von  $y = y(D) = \frac{1}{2}(D^2 - 7)$  hat eine andere Form, als der von  $y(x)$ .

Die Frage ist, wie man die volle Information durch eine Funktion der Ableitung  $D$  ausdrücken kann. Dazu benötigen wir den Zusammenhang zwischen Punkt- und Liniengeometrie. Eine Kurve (der Graph eine Funktion) ist entweder bestimmt durch die Menge der Punkte  $(x, y)$  oder durch die Menge der einhüllenden Tangenten, wobei wiederum jede Tangente eindeutig durch  $D$  und den Schnitt  $S$  mit der  $y$ -Achse bestimmt ist. Der Zusammenhang ist dabei explizit durch

$$D = \frac{y - S}{x} \iff y - S = Dx \iff S = y - Dx$$

gegeben. Man erhält so eine Abhängigkeit  $S = S(D)$  der Schnittpunkte, indem man aus der Ableitung  $D = D(x) = \frac{dy}{dx}$  durch Umkehrung  $x = x(D)$  und dann wieder  $y(x(D)) = y(D)$  bestimmt. Letztlich folgt dann

$$S(D) = y(D) - Dx(D) = \tilde{y}_{[x]}(D) ,$$



wobei die neue Funktion  $\tilde{y}_{[x]}$  als **Legendre-Transformierte** von  $y$  hinsichtlich der Variable  $x$  bezeichnet wird.

Verallgemeinern wir dies nun auf eine Funktion in mehreren Variablen. Dazu sei eine Funktion  $y = y(x_1, \dots, x_N)$  gegeben, deren Graph als Hyperfläche im  $N + 1$ -dimensionalen Raum interpretiert werden kann. Durch

$$D_1 = \frac{\partial y}{\partial x_1}, \quad D_2 = \frac{\partial y}{\partial x_2}, \quad \dots, \quad D_N = \frac{\partial y}{\partial x_N}$$

seien die partiellen Ableitungen der Funktion benannt. Genau wie zuvor betrachten wir dann die Inversion  $x_1 = x_1(D_1, \dots, D_N)$  bis zu  $x_N = x_N(D_1, \dots, D_N)$ . Man bilde nun wieder den Schnittpunkt

$$S = S(D_1, \dots, D_N) = y - \sum_{k=1}^N D_k x_k \quad \rightarrow \quad \tilde{y}_{[x_1, \dots, x_N]}(D_1, \dots, D_N),$$

wobei  $y = y(D_1, \dots, D_N)$  und  $x_k = x_k(D_1, \dots, D_N)$  gilt. Die Legendre-Transformation läuft für mehrere Variablen also genauso ab, wie im vorigen Fall.

Um eine brauchbare Transformation zu erhalten, benötigen wir noch eine passende Umkehrtransformation. Dazu betrachte man zunächst das totale Differential der Schnittfunktion, welches die Form

$$dS = \sum_{k=1}^N \frac{\partial S}{\partial D_k} dD_k = dy - \sum_{k=1}^N x_k dD_k - \sum_{k=1}^N D_k dx_k$$

annimmt. Wegen  $dy = \sum_k \frac{\partial y}{\partial x_k} dx_k = \sum_k D_k dx_k$  erhält man daraus direkt

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N \frac{\partial S}{\partial D_k} dD_k &= \sum_k (-x_k) dD_k \iff x_k = -\frac{\partial S}{\partial D_k} = x_k(D_1, \dots, D_N) \\ &\iff D_k = D_k(x_1, \dots, x_N), \end{aligned}$$

sodass schließlich die ursprüngliche Funktion

$$y = S + \sum_k D_k x_k = S(D_1(x_1, \dots, x_N), \dots, D_N(x_1, \dots, x_N)) + \sum_k D_k(x_1, \dots, x_N)$$

folgt. Damit ist die Bijektivität der Transformation zeigt, sodass wir nun ein Hilfsmittel zur Verfügung habe, welches direkte Abhängigkeiten gegen Ableitungen der Funktion tauscht.

**Beispiel:** Betrachten wir die Funktion  $y(x) = \sin x$ , dann ist  $D = \frac{dy}{dx} = \cos x = D(x)$  die Ableitung und  $x = x(D) = \arccos D$  die zugehörige Umkehrfunktion. Damit erhalten wir dann  $y = y(D) = \sin(x(D)) = \sin \arccos D$ , sodass dann

$$S = \sin \arccos D - D \arccos D = S(D)$$

die Schnittfunktion ist.

Es sei noch angemerkt, dass auch partielle Legendre-Transformation hinsichtlich nur einiger Variablen möglich sind. Sei dazu  $y = y(x_1, x_2)$  eine Funktion in zwei Variablen, so gilt für die Legendre-Transformation hinsichtlich  $x_2$  dann

$$\tilde{y}_{[x_2]}(x_1, D_2) = y - D_2 x_2 \quad \text{mit} \quad D_2 = \frac{\partial y}{\partial x_2} = D_2(x_1, x_2).$$

Somit erhalten wir Abhängigkeit  $x_2 = x_2(x_1, D_2)$  für die zweite Variable, sodass die Funktion  $y = y(x_1, x_2(x_1, D_2)) = y(x_1, D_2)$  bezüglich der zweiten Variable Legendre-transformiert ist.

## 4.2. Die Hamiltonschen Gleichungen und Bewegungen im Phasenraum

Mit der zuvor erläuterten Legendre-Transformation kann nun eine Variable ersetzt werden. Die Physik eines Systems ist bestimmt durch die Lagrange-Funktion  $L = L(q_1, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f, t)$ . Um die hierin enthaltene Gesamtinformation durch  $q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f$  auszudrücken, bilde man (wie oben erklärt) die Legendre-Transformierte  $\tilde{L}_{[q_1, \dots, q_f]}$ . Dazu bestimmen wir zunächst die Variablenabhängigkeit

$$D_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} = p_1, \dots, D_f = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_f} = p_f \quad \implies \quad \dot{q}_\alpha = \dot{q}_\alpha(q, p)$$

und erhalten damit dann die bezüglich  $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f$  Legendre-transformierte Lagrange-Funktion

$$\tilde{L}_{[q_1, \dots, q_f]} = L - \sum_{\alpha=1}^f p_\alpha \dot{q}_\alpha = L(q, \dot{q}(q, p), t) - \sum_{\alpha=1}^f p_\alpha \dot{q}_\alpha(q, p) =: -H(q, p, t) .$$

Die neue **Hamilton-Funktion**  $H(q, p, t)$  beinhaltet ebenfalls die gesamte Information über die Physik des Systems und ist damit gleichwertig zur Lagrange-Funktion.

Es stellt sich nun die Frage, wie man aus  $H(q, p) = \sum_{\alpha} p_\alpha \dot{q}_\alpha - L(q, \dot{q}, t)$  mit  $\dot{q} = \dot{q}(q, p, t)$  die Physik erhält. Dazu bilde man zuerst das totale Differential

$$\begin{aligned} dH &= \sum_{\alpha} \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} dp_{\alpha} + \sum_{\alpha} \frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}} dq_{\alpha} + \frac{\partial H}{\partial t} dt = \sum_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} dp_{\alpha} + \sum_{\alpha} p_{\alpha} d\dot{q}_{\alpha} - dL \\ &= \sum_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} dp_{\alpha} + \sum_{\alpha} p_{\alpha} d\dot{q}_{\alpha} - \sum_{\alpha} \frac{\partial L}{\partial q_{\alpha}} dq_{\alpha} - \sum_{\alpha} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\alpha}} d\dot{q}_{\alpha} - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \sum_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} dp_{\alpha} + \sum_{\alpha} (-\dot{p}_{\alpha}) dq_{\alpha} - \frac{\partial L}{\partial t} dt \end{aligned}$$

der Hamilton-Funktion, woraus man dann durch entsprechenden Summandenvergleich

$$\dot{q}_{\alpha} = \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} \quad \dot{p}_{\alpha} = -\frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}} \quad \text{und} \quad \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}$$

für  $k = \alpha = 1, \dots, f$  erhält. Dies sind die sogenannten **kanonischen Hamilton-Gleichungen**. Diese  $2f$  Differentialgleichungen erster Ordnung ergeben die  $f$  Lagrange-Gleichungen erster Ordnung, die Lösungen sind die  $q_{\alpha}(t)$  und  $p_{\alpha}(t)$ . Die Anfangsbedingungen sind im Hamilton-Formalismus durch Vorgabe von  $q_{\alpha}(0)$  und  $p_{\alpha}(0)$  gegeben, im Lagrange-Formalismus durch  $q_{\alpha}(0)$  und  $\dot{q}_{\alpha}(0)$ , wir haben also jeweils  $2f$  Anfangsbedingungen.

**Beispiel:** Betrachte ein Teilchen ohne Zwangsbedingungen in einem Potential  $V(\vec{r})$ . Für die Lagrange-Funktion gilt dann

$$L = L(r_k, \dot{r}_k) = T - V = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r}) ,$$

sodass die zugehörige Hamilton-Funktion die Form

$$\begin{aligned} H &= \sum_k p_k \dot{r}_k - L = \sum_k p_k \frac{p_k}{m} - \frac{m}{2} \sum_k \left(\frac{p_k}{m}\right)^2 + V(\vec{r}) \\ &= \frac{\vec{p}^2}{m} - \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = H(\vec{r}, \vec{p}) \end{aligned}$$

#### 4. Der Hamilton-Formalismus

---

annimmt. Über die kanonischen Hamilton-Gleichungen erhält man dann die Bewegungsgleichungen des Systems, hier gilt

$$\dot{r}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} = \frac{p_k}{m} \implies \dot{\vec{r}} = \frac{\vec{p}}{m} \quad \text{und} \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial r_k} = -\frac{\partial V}{\partial r_k} \implies \dot{\vec{p}} = -\vec{\nabla}V(\vec{r}) ,$$

jeweils für  $k = 1, 2, 3$ . Durch Lösung der Bewegungsgleichungen erhält man dann wie üblich die Bewegung des Teilchens.

Allgemein gilt für ein System unter holonomen skleronomen Zwangsbedingungen mit konservativen echten (äußeren) Kräften mit den verallgemeinerten Koordinaten  $q_\alpha$  (Übung)

$$\sum_{\alpha} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_{\alpha}} \dot{q}_{\alpha} = 2T ,$$

und da die Kräfte konservativ sind  $\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_{\alpha}} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\alpha}}$ , sodass man als Hamilton-Funktion

$$\begin{aligned} H(q, p) &= \sum_{\alpha} p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha}(q, p) - L(q, \dot{q}(q, p)) = \sum_{\alpha} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\alpha}} \dot{q}_{\alpha} - L \\ &= \sum_{\alpha} \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_{\alpha}} \dot{q}_{\alpha} - (T - V) = 2T - (T - V) = T + V \end{aligned}$$

erhält. Die Hamilton-Funktion entspricht also - ähnlich wie die Energie-Funktion  $h(q, \dot{q})$  - der Gesamtenergie des Systems. Besonders interessant ist der Fall, dass  $H$ , also die Gesamtenergie  $E = T + V$ , eine Erhaltungsgröße ist. Allgemein gilt

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{\alpha} \frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}} \dot{q}_{\alpha} + \sum_{\alpha} \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} \dot{p}_{\alpha} + \frac{\partial H}{\partial t} = \sum_{\alpha} \frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} - \sum_{\alpha} \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}} + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} ,$$

hängt also die Hamilton-Funktion  $H$  nicht explizit von der Zeit ab, so ist die Gesamtenergie  $H$  eine Erhaltungsgröße des durch die Hamilton-Funktion beschriebenen Systems, also  $\frac{d}{dt}H = 0$ . Anders formuliert ist bei skleronomen Zwangsbedingungen mit konservativen (und zeitunabhängigen) äußeren Kräften die Energie erhalten.

Wie wir bereits gesehen haben, beschreiben die Hamiltonschen Gleichungen die verallgemeinerten Koordinaten  $q_{\alpha}(t)$  und die konjugiert kanonischen Impulse  $p_{\alpha}(t)$ . Der  $2f$ -dimensionale **Phasenraum** der zugehörigen Bewegung wird dann durch diese Funktionen  $q_{\alpha}$  und  $p_{\alpha}$  aufgespannt, die Phasenraumbewegung ist durch die Abbildung

$$t \mapsto (q_1(t), \dots, q_f(t), p_1(t), \dots, p_f(t))$$

gegeben, die zugehörige Bildmenge heißt Phasenbahnkurve. Jeder Punkt des Phasenraums entspricht dabei einem vollständig spezifizierten Zustand des betrachteten Systems zur Zeit  $t$ .

Man kann nun zeigen (Übung), dass die Hamiltonschen Gleichungen auch aus der Phasenraum-Form des Prinzips der kleinsten Wirkung abgeleitet werden können. Dazu definiert man das Wirkungsintegral im Phasenraum durch

$$\bar{S} = \bar{S}[q, p] = \int_{t_1}^{t_2} \left( \sum_{\alpha} p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} - H(q, \dot{q}, t) \right) dt ,$$

dies liefert ein Funktion in  $q_{\alpha}(t)$  und  $p_{\alpha}(t)$ . Durch die analogen Variationsmethoden, die wir bereits zuvor bei der Herleitung der Lagrange-Gleichung durch das Prinzip der kleinsten Wirkung verwendet haben, gelangt man dann auch hier auf die Hamiltonschen Gleichungen.

Im Phasenraum lautet das Prinzip der kleinsten Wirkung dann: Die tatsächliche Bewegung im Phasenraum bei vorgegebenen Werten von  $q(t)$  und  $p(t)$  bei  $t_1$  und  $t_2$  ist jene, für die  $\delta\bar{S} = 0$  bei infinitesimaler Variation von  $q(t)$  und (unabhängig davon)  $p(t)$  gilt, wobei  $\delta q(t)$  und  $\delta p(t)$  bei  $t_1$  und  $t_2$  verschwinden. Daraus folgen dann die kanonischen Gleichungen als Euler-Lagrange-Gleichung des zugehörigen Variationsproblems.

Für die praktische Berechnung der Bewegung liefern die Hamiltonschen Gleichungen keine großen Vorteile. Ein Vorteil zeigt sich jedoch dann, wenn einzelne Koordinaten zyklisch sind, also auf eine mögliche Symmetrie des Systems hindeuten. Sei dazu  $q_s$  zyklisch, dann gilt für die Lagrange-Funktion

$$L = L(q_1, \dots, q_{s-1}, q_{s+1}, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_s, \dots, \dot{q}_f, t)$$

was zu  $\frac{d}{dt}p_s = 0$  und damit  $p_s = a_s$  konstant führt. Andererseits hat man für die Ableitung dieses konjugiert kanonischen Impulses

$$\dot{p}_s = -\frac{\partial H}{\partial q_s} = 0 \quad \implies \quad H = H(q_1, \dots, q_{s-1}, q_{s+1}, \dots, q_f, p_1, \dots, a_s, \dots, p_f),$$

d.h. die Hamilton-Funktion  $H$  ist eine Funktion in  $2(f-1)$  Variablen. Falls  $H$  dann bekannt ist, dann erhält man die verallgemeinerte Koordinate  $q_s(t)$  aus

$$\dot{q}_s = \frac{\partial H}{\partial p_s} = \frac{\partial H}{\partial a_s}.$$

### 4.3. Poisson-Klammern

Die Variablen  $q_\alpha(t)$  und  $p_\alpha(t)$  sind messbare Größen eines physikalischen Systems. Daher bezeichnet man (im Rahmen der Mechanik) jede Funktion  $f(q, p, t)$  auch als **Observable**. Betrachten wir die zeitliche Änderung einer beliebigen Observable, so gilt

$$\frac{d}{dt}f(q, p, t) = \sum_{\alpha} \frac{\partial f}{\partial q_{\alpha}} \dot{q}_{\alpha} + \sum_{\alpha} \frac{\partial f}{\partial p_{\alpha}} \dot{p}_{\alpha} + \frac{\partial f}{\partial t} = \sum_{\alpha} \left( \frac{\partial f}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} - \frac{\partial f}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial H}{\partial q_{\alpha}} \right) + \frac{\partial f}{\partial t}.$$

Der eingeklammerte Teil taucht bei der Berechnung von zeitlichen Ableitung (und an anderen Stellen) immer wieder auf, daher definieren wir der Kürze halber für zwei beliebige Observablen  $f(q, p)$  und  $g(q, p)$  die **Poisson-Klammer**

$$\{f, g\}_{\text{PB}} := \sum_{\alpha} \left( \frac{\partial f}{\partial q_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial p_{\alpha}} - \frac{\partial f}{\partial p_{\alpha}} \frac{\partial g}{\partial q_{\alpha}} \right).$$

Die obere zeitliche Ableitung lässt sich dann kurz als

$$\frac{d}{dt}f(q, p, t) = \{f, H\}_{\text{PB}} + \frac{\partial f}{\partial t}$$

schreiben, d.h. falls keine explizite Zeitabhängigkeit vorliegt, also  $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$ , so folgt

$$\frac{d}{dt}f(q, p, t) = \{f, H\}_{\text{PB}}.$$

Demnach ist die Observable  $f$  also genau dann eine Erhaltungsgröße, wenn  $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$  gilt und außerdem die Poisson-Klammer  $\{f, H\}_{\text{PB}} = 0$  verschwindet. Man kann auch die kanonischen

Gleichungen mithilfe der Poisson-Klammern ausdrücken, es gilt nämlich für eine beliebige Observable  $f(q, p)$

$$\frac{\partial f}{\partial q_\alpha} = -\{p_\alpha, f\}_{\text{PB}} \quad \text{und} \quad \frac{\partial f}{\partial p_\alpha} = \{q_\alpha, f\}_{\text{PB}} .$$

Wir wollen diese Aussage für den ersten Fall explizit nachprüfen, wozu die Klammer gemäß

$$\{p_\alpha, f\}_{\text{PB}} = \sum_\beta \left( \frac{\partial p_\alpha}{\partial q_\beta} \frac{\partial f}{\partial p_\beta} - \frac{\partial p_\alpha}{\partial p_\beta} \frac{\partial f}{\partial q_\beta} \right) = - \sum_\beta \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial f}{\partial q_\beta} = - \frac{\partial f}{\partial q_\alpha}$$

auszurechnen ist, wir können also die Hamiltonschen Gleichungen auch mit Hilfe der Poisson-Klammern als

$$\dot{q}_\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} = \{q_\alpha, H\}_{\text{PB}} \quad \text{und} \quad \dot{p}_\alpha = - \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} = \{p_\alpha, H\}_{\text{PB}}$$

schreiben. Für die  $\{q_\alpha, f\}_{\text{PB}}$ -Klammer verläuft die Rechnung natürlich völlig analog.

Die Poisson-Klammern haben aber auch eine sehr wichtige andere Bedeutung, auf die wir insbesondere später im Rahmen der quantenmechanischen Unschärferelation zurückkommen werden, denn der Hamilton-Formalismus bildet die Basis für die Formulierung der Quantenmechanik. Einige wichtige Poisson-Klammern sind dann die folgenden:

$$\begin{aligned} \{q_\alpha, q_\beta\}_{\text{PB}} &= 0 & \{p_\alpha, p_\beta\}_{\text{PB}} &= 0 & \{q_\alpha, p_\beta\}_{\text{PB}} &= \delta_{\alpha\beta} \\ \{L_i, r_j\}_{\text{PB}} &= \epsilon_{ijk} r_k & \{L_i, p_j\}_{\text{PB}} &= \epsilon_{ijk} p_k & \{L_i, L_j\}_{\text{PB}} &= \epsilon_{ijk} L_k \end{aligned}$$

Es sei noch angemerkt, dass für zwei Erhaltungsgrößen  $f$  und  $g$  auch die Poisson-Klammer  $\{f, g\}_{\text{PB}}$  wieder eine Erhaltungsgröße ist. Poisson-Klammern sind invariant unter kanonischen Transformationen, die wir im nächsten Abschnitt behandeln.

## 4.4. Kanonische Transformationen

### 4.4.1. Das Problem der Forminvarianz konjugiert kanonischer Impulse

Nachdem wir die wichtige Bedeutung zyklischer Koordinaten bereits im vorigen Kapitel gesehen haben, stellt sich die Frage, ob es möglich ist durch Wahl einer geeigneten Transformation Koordinaten zyklisch zu machen. Wenn es möglich wäre  $\tilde{q}_\alpha$  so zu wählen, dass  $\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \tilde{q}_\alpha} = 0$  für alle  $\alpha = 1, \dots, f$  gelten würde, so wäre

$$\tilde{L} = \tilde{L}(0, \dots, 0, \dot{\tilde{q}}_1, \dots, \dot{\tilde{q}}_f) \quad \text{bzw.} \quad H = H(a_1, \dots, a_f, t)$$

wobei die  $a_\alpha = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha}$  Konstanten wären. Für die kanonischen Gleichungen würde in diesem Fall

$$\frac{\partial H}{\partial \tilde{p}_\alpha} = \frac{\partial H}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} = \dot{\tilde{q}}_\alpha = \frac{\partial}{\partial a_\alpha} H(a_1, \dots, a_f) = \text{konst} = \omega_\alpha$$

folgen, also wäre  $\tilde{q}_\alpha(t) = \omega_\alpha t + \varphi_\alpha$  für alle  $\alpha$ . Durch reine Punkt-Transformationen ist dies im Allgemeinen aber nicht möglich, also durch Transformationen mit  $q_\alpha \rightarrow \tilde{q}_\alpha = \tilde{q}_\alpha(q, t)$ , wo  $p_\alpha$  ungeändert bleibt.

Im Hamilton-Formalismus hat man aber  $2f$  unabhängige Variablen  $q_\alpha$  und  $p_\alpha$ , also sind allgemeiner auch Transformationen

$$q_\alpha \rightarrow \tilde{q}_\alpha = \tilde{q}_\alpha(q, p, t) \quad p_\alpha \rightarrow \tilde{p}_\alpha = \tilde{p}_\alpha(q, p, t)$$

denkbar. Es lässt sich nun fragen, ob derartige Transformationen neue Koordinaten liefern, für welche die kanonischen Gleichungen

$$\dot{q}_\alpha = \frac{\partial K}{\partial \tilde{p}_\alpha} \quad \text{und} \quad \dot{\tilde{p}}_\alpha = -\frac{\partial K}{\partial \tilde{q}_\alpha}$$

gelten. Um diese Bedingung genauer zu verstehen, betrachten wir zunächst nur Punkttransformationen

$$q \rightarrow \tilde{q} = \tilde{q}(q, t) \quad p \rightarrow \tilde{p} .$$

Wir wissen bereits, dass für die Lagrange-Funktion  $\tilde{L}(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t) = L(q(\tilde{q}, t), \dot{q}(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t), t)$  ebenfalls auf die Lagrange-Gleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} - \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \tilde{q}_\alpha} = 0$$

führt. Für den transformierten konjugiert kanonischen Impuls gilt dann

$$\tilde{p}_\alpha = \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} = \sum_\beta \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\beta} \frac{\partial \dot{q}_\beta}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} = \sum_\beta p_\beta(q, \dot{q}, t) \frac{\partial q_\beta}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} = \sum_\beta c_{\beta\alpha}(\tilde{q}) p_\beta(q(\tilde{q}, t), \dot{q}(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t)) ,$$

also gilt  $\tilde{p}_\alpha(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t) \neq p_\alpha(q(\tilde{q}, t), \dot{q}(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t), t)$ , die Impulse ergeben sich bei einer Punkttransformation also nicht einfach durch Einsetzen der neuen Koordinaten - im Gegensatz zur Lagrange-Funktion sind die Impulse, und damit auch die Hamilton-Funktion, nicht forminvariant. Daher setzen wir nun

$$K(\tilde{q}, \tilde{p}) = \sum_\alpha \tilde{p}_\alpha \dot{\tilde{q}}_\alpha - \tilde{L}(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}, t) \neq H(q(\tilde{q}, \tilde{p}, t), p(\tilde{q}, \tilde{p}), t)$$

mit der Ableitung  $\dot{\tilde{q}} = \dot{\tilde{q}}(\tilde{q}, \tilde{p}, t)$ . Unter Verwendung der Ableitung

$$\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \tilde{q}_\alpha} = \frac{d}{dt} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} = \frac{d}{dt} \tilde{p}_\alpha = \dot{\tilde{p}}_\alpha$$

erhalten wir für das totale Differential der Lagrange-Funktion in den neuen Koordinaten

$$d\tilde{L} = \sum_\alpha \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \tilde{q}_\alpha} d\tilde{q}_\alpha + \sum_\alpha \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \dot{\tilde{q}}_\alpha} d\dot{\tilde{q}}_\alpha + \frac{\partial \tilde{L}}{\partial t} dt = \sum_\alpha \dot{\tilde{p}}_\alpha d\tilde{q}_\alpha + \sum_\alpha \tilde{p}_\alpha d\dot{\tilde{q}}_\alpha + \frac{\partial \tilde{L}}{\partial t} dt ,$$

also folgt für das totale Differential der Funktion  $K$  damit

$$\begin{aligned} dK &= \sum_\alpha \frac{\partial K}{\partial \tilde{q}_\alpha} d\tilde{q}_\alpha + \sum_\alpha \frac{\partial K}{\partial \tilde{p}_\alpha} d\tilde{p}_\alpha + \frac{\partial K}{\partial t} dt = \sum_\alpha \tilde{p}_\alpha d\dot{\tilde{q}}_\alpha + \sum_\alpha \dot{\tilde{q}}_\alpha d\tilde{p}_\alpha - d\tilde{L} \\ &= \sum_\alpha \dot{\tilde{q}}_\alpha d\tilde{p}_\alpha - \sum_\alpha \dot{\tilde{p}}_\alpha d\tilde{q}_\alpha - \frac{\partial \tilde{L}}{\partial t} dt . \end{aligned}$$

Folglich erhalten wir daraus dann entsprechend

$$\dot{\tilde{q}}_\alpha = \frac{\partial K}{\partial \tilde{p}_\alpha} , \quad \dot{\tilde{p}}_\alpha = -\frac{\partial K}{\partial \tilde{q}_\alpha} \quad \text{und} \quad \frac{\partial K}{\partial t} = -\frac{\partial \tilde{L}}{\partial t} ,$$

also sind die kanonischen Gleichungen forminvariant unter Punkttransformationen, allerdings gilt nicht mehr eine Invarianz der Form  $K(\tilde{q}, \tilde{p}) = H(q(\tilde{q}, \tilde{p}, t), p(\tilde{q}, \tilde{p}, t), t)$ , wie es noch bei Lagrange-Funktionen der Fall war. Somit bedeutet die Aussage der Forminvarianz der kanonischen Gleichungen strenggenommen nur, dass es eine geeignete neue Funktion  $K(\tilde{q}, \tilde{p})$  gibt, sodass die kanonischen Gleichungen erfüllt sind, also

$$\dot{\tilde{q}}_\alpha = \frac{\partial K}{\partial \tilde{p}_\alpha} \quad \text{und} \quad \dot{\tilde{p}}_\alpha = -\frac{\partial K}{\partial \tilde{q}_\alpha}$$

gilt. Dieses Ergebnis ist noch nicht wirklich das, was wir eigentlich suchen.

Wir betrachten nun ein System, welches durch die Koordinaten  $q_\alpha$  und die konjugiert kanonischen Impulse  $p_\alpha$  mit der Hamilton-Funktion  $H(q, p, t)$  gegeben ist. Dann gelten zunächst einmal die (ursprünglichen) Hamiltonschen Gleichungen

$$\dot{q}_\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} \quad \text{und} \quad \dot{p}_\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha} .$$

Sei weiter  $T$  eine beliebige Transformation mit der Umkehrtransformation  $T^{-1}$  der Gestalt

$$T : \quad q_\alpha \rightarrow \tilde{q}_\alpha = \tilde{q}_\alpha(q, p, t) \quad p_\alpha \rightarrow \tilde{p}_\alpha = \tilde{p}_\alpha(q, p, t) .$$

Dann sind automatisch die Ableitungen der neuen Koordinaten  $\dot{\tilde{q}}_\alpha$  und  $\dot{\tilde{p}}_\alpha$  bestimmt durch die kanonischen Gleichungen und durch die inverse Transformation  $T^{-1}$ , denn es gilt

$$\dot{q}_\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} = \dot{q}_\alpha(q, p) = \dot{q}_\alpha(q(\tilde{q}, \tilde{p}, t), p(\tilde{q}, \tilde{p}, t))$$

und analog auch für  $p_\alpha$ , womit für die neuen Ableitungen

$$\dot{\tilde{q}}_\alpha = \sum_\beta \frac{\partial \tilde{q}_\alpha}{\partial q_\beta} \dot{q}_\beta + \sum_\beta \frac{\partial \tilde{q}_\alpha}{\partial p_\beta} \dot{p}_\beta + \frac{\partial \tilde{q}_\alpha}{\partial t} = \sum_\beta \left( \frac{\partial \tilde{q}_\alpha}{\partial q_\beta} \frac{\partial H}{\partial p_\beta} - \frac{\partial \tilde{q}_\alpha}{\partial p_\beta} \frac{\partial H}{\partial q_\beta} \right) - \frac{\partial \tilde{q}_\alpha}{\partial t} = \dot{\tilde{q}}_\alpha(\tilde{q}, \tilde{p}, t)$$

folgt. Analog verfährt man auch für  $\dot{p}_\alpha$  und  $\dot{\tilde{p}}_\alpha$ , d.h.  $\dot{\tilde{q}}_\alpha$  und  $\dot{\tilde{p}}_\alpha$  sind bereits fixierte Funktionen von  $\tilde{q}$  und  $\tilde{p}$ . Dann wird es aber im Allgemeinen keine Funktion  $K(\tilde{q}, \tilde{p}, t)$  geben, sodass diese schon fixierten Funktionen sich darstellen lassen als

$$\dot{\tilde{q}}_\alpha = \frac{\partial K}{\partial \tilde{p}_\alpha} \quad \text{und} \quad \dot{\tilde{p}}_\alpha = -\frac{\partial K}{\partial \tilde{q}_\alpha} .$$

**Definition 12:** Eine Transformation heißt **kanonisch**, wenn es zu jeder Hamilton-Funktion  $H(q, p, t)$  eine geeignete Funktion  $K(\tilde{q}, \tilde{p}, t)$  gibt, sodass die kanonischen Gleichungen

$$\dot{\tilde{q}}_\alpha = \frac{\partial K}{\partial \tilde{p}_\alpha} \quad \text{und} \quad \dot{\tilde{p}}_\alpha = -\frac{\partial K}{\partial \tilde{q}_\alpha}$$

gelten. Folglich sind die kanonischen Transformationen jene Transformationen, welche die kanonischen Gleichungen forminvariant lassen (vgl. noch einmal die obigen Ausführungen dazu).

#### 4.4.2. Kriterium für Kanonizität einer Transformation

Wir wollen nun ein einfacher anzuwendendes Kriterium für die Kanonizität einer Transformation  $T$  finden. Dazu sei noch einmal daran erinnert, dass die kanonischen Gleichung zum Prinzip der

kleinsten Wirkung im Phasenraum äquivalent sind, also zu  $\delta\bar{S}[q, p] = 0$ , wobei das Phasenraum-Wirkungsfunktional die Form

$$\bar{S}[q, p] = \int_{t_1}^{t_2} \left( \sum_{\alpha} p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} - H \right) dt$$

hat, d.h.  $q_{\alpha}(t)$  und  $p_{\alpha}(t)$  genügen genau dann den kanonischen Gleichungen, wenn  $\delta\bar{S}[q, p]$  verschwindet. Man betrachte nun eine Transformation  $q_{\alpha} \rightarrow \tilde{q}_{\alpha}$  und  $p_{\alpha} \rightarrow \tilde{p}_{\alpha}$ , dann ist diese genau dann kanonisch, wenn für

$$\tilde{\bar{S}}[\tilde{q}, \tilde{p}] = \int_{t_1}^{t_2} \left( \sum_{\alpha} \tilde{p}_{\alpha} \dot{\tilde{q}}_{\alpha} - K(\tilde{q}, \tilde{p}, t) \right) dt$$

gilt  $\delta\tilde{\bar{S}} = 0$  für ein geeignetes  $K$ , d.h. wenn es eine geeignete Funktion  $K(\tilde{q}, \tilde{p}, t)$  gibt, sodass gleichzeitig mit  $\delta\bar{S} = 0$  auch  $\delta\tilde{\bar{S}} = 0$  gilt. Dies ist genau dann der Fall, wenn

$$\sum_{\alpha} p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} - H(q, p, t) - \left( \sum_{\alpha} \tilde{p}_{\alpha} \dot{\tilde{q}}_{\alpha} - K(\tilde{q}, \tilde{p}, t) \right) = \frac{d}{dt} F(q, p, \tilde{q}, \tilde{p}, t)$$

ist, denn aus  $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = \delta p(t_1) = \delta p(t_2) = 0$  folgt  $\delta\tilde{q}(t_1) = \delta\tilde{q}(t_2) = \delta\tilde{p}(t_1) = \delta\tilde{p}(t_2) = 0$ .

Damit ist nun ein Kriterium gefunden, wann eine Transformation  $T$  kanonisch ist. Nun sind aber die  $4f$  Variablen  $q_{\alpha}$ ,  $p_{\alpha}$ ,  $\tilde{q}_{\alpha}$  und  $\tilde{p}_{\alpha}$  durch die  $2f$  Transformationsgleichungen in  $T$  miteinander verknüpft, d.h. nur  $2f$  der Variablen sind unabhängig. Die Funktion  $F = F(q, p, \tilde{q}, \tilde{p}, t)$  ist also nicht von allen vier Koordinaten bzw. Impulsen abhängig. Es kann sein, dass

- $q_{\alpha}$  und  $\tilde{q}_{\alpha}$  unabhängig sind, dann gilt  $F = F_1(q, \tilde{q}, t)$ .
- $q_{\alpha}$  und  $\tilde{p}_{\alpha}$  unabhängig sind, dann gilt  $F = F_2(q, \tilde{p}, t)$ .
- $p_{\alpha}$  und  $\tilde{q}_{\alpha}$  unabhängig sind, dann gilt  $F = F_3(p, \tilde{q}, t)$ .
- $p_{\alpha}$  und  $\tilde{p}_{\alpha}$  unabhängig sind, dann gilt  $F = F_4(p, \tilde{p}, t)$ .

Allerdings sind auch gemischte Fälle möglich, diese wollen wir aber nicht weiter betrachten - das Prinzip ist völlig analog.

**Beispiel:** Bei einer reinen Punkttransformation  $q_{\alpha} \rightarrow \tilde{q}_{\alpha} = \tilde{q}_{\alpha}(q, t)$  und  $p_{\alpha} \rightarrow \tilde{p}_{\alpha}$  sind  $q$  und  $\tilde{q}$  nicht unabhängig voneinander, also existiert keine erzeugende Funktion  $F_1(q, \tilde{q}, t)$ , aber  $p$  und  $\tilde{q}$  sind unabhängig. Demnach existiert eine erzeugende Form  $F_2(p, \tilde{q}, t)$ .

Man betrachte nun den Fall, dass  $q_{\alpha}$  und  $\tilde{q}_{\alpha}$  unabhängig voneinander sind. Dies ist sicherlich dann der Fall, wenn die Transformationsgleichung  $\tilde{q}_{\alpha} = \tilde{q}_{\alpha}(q, p, t)$  nach den  $p_{\alpha}$  auflösbar ist, also  $p_{\alpha} = p_{\alpha}(q, \tilde{q}, t)$  gilt, denn dann ist auch

$$\tilde{p}_{\alpha} = \tilde{p}_{\alpha}(q, p, t) = \tilde{p}_{\alpha}(q, p(q, \tilde{q}, t)) = \tilde{p}_{\alpha}(q, \tilde{q}, t) .$$

Damit lässt sich für die Funktion  $K$

$$\sum_{\alpha} p_{\alpha} \dot{q}_{\alpha} - H(q, p, t) - \left( \sum_{\alpha} \tilde{p}_{\alpha} \dot{\tilde{q}}_{\alpha} - K(\tilde{q}, \tilde{p}, t) \right) = \frac{d}{dt} F_1(q, \tilde{q}, t)$$

herleiten, und mit der vollständigen zeitlichen Ableitung

$$\frac{d}{dt}F_1 = \sum_{\alpha} \frac{\partial F_1}{\partial q_{\alpha}} \dot{q}_{\alpha} + \sum_{\alpha} \frac{\partial F_1}{\partial \tilde{q}_{\alpha}} \dot{\tilde{q}}_{\alpha} + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

erhält man dann weiter die Gleichheit

$$\sum_{\alpha} \left( p_{\alpha} - \frac{\partial F_1}{\partial q_{\alpha}} \right) \dot{q}_{\alpha} - \sum_{\alpha} \left( \tilde{p}_{\alpha} + \frac{\partial F_1}{\partial \tilde{q}_{\alpha}} \right) \dot{\tilde{q}}_{\alpha} - H + K - \frac{\partial F_1}{\partial t} = 0 .$$

Nach Voraussetzung sind  $q_{\alpha}$  und  $\tilde{q}_{\alpha}$  unabhängig, also sind auch  $\dot{q}_{\alpha}$  und  $\dot{\tilde{q}}_{\alpha}$  unabhängig, sodass wir die Gleichungen

$$p_{\alpha} = \frac{\partial F_1}{\partial q_{\alpha}} , \quad \tilde{p}_{\alpha} = - \frac{\partial F_1}{\partial \tilde{q}_{\alpha}} \quad \text{und} \quad K(\tilde{q}, \tilde{p}, t) = H(q, p, t) + \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

erhalten. Also ist eine Transformation  $T$ , bei der die  $q_{\alpha}$  und  $\tilde{q}_{\alpha}$  unabhängig voneinander sind, genau dann kanonisch, wenn es neben der Funktion  $K(\tilde{q}, \tilde{p}, t)$  auch eine Funktion  $F_1(q, \tilde{q}, t)$  gibt, sodass die ersten beiden der vorigen Gleichungen erfüllt sind. Es gilt dann weiter die dritte Gleichung. Analoge Kriterien finden sich auch für die übrigen drei der zuvor aufgelisteten Fälle.

#### 4.4.3. Anwendungsbeispiel

Zur Veranschaulichung der vorgestellten Konzepte soll abschließend noch ein ausführliches Beispiel für die eine kanonische Transformation bzw. Erzeugende gegeben werden. Wir betrachten dazu den eindimensionalen harmonischen Oszillator in  $q = x$  und  $p$ , der durch die Hamilton-Funktion

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}q^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2q^2 \quad \text{mit} \quad \omega^2 = \frac{k}{m}$$

beschrieben wird. Weiter erkläre man die transformierten Koordinaten  $\tilde{q}$  und  $\tilde{p}$  durch

$$q(\tilde{q}, \tilde{p}) = \sqrt{\frac{2}{m\omega}} \sqrt{\tilde{p}} \sin \tilde{q} \quad \text{und} \quad p(\tilde{q}, \tilde{p}) = \sqrt{2m\omega} \sqrt{\tilde{p}} \cos \tilde{q} ,$$

sodass für die zugehörigen Umkehrfunktionen dann

$$\tilde{q}(q, p) = \arctan \left( m\omega \frac{q}{p} \right) \quad \text{und} \quad \tilde{p}(q, p) = \frac{1}{2} \left( m\omega q^2 + \frac{p^2}{m\omega} \right)$$

gilt. Da diese Transformation zeitunabhängig ist und zudem  $q$  und  $\tilde{q}$  voneinander unabhängig sind, kann  $F_1(q, \tilde{q})$  als Erzeugende gewählt werden, und es gilt

$$K(\tilde{q}, \tilde{p}, t) = H(q(\tilde{q}, \tilde{p}), p(\tilde{q}, \tilde{p})) = \frac{1}{2m} 2m\omega\tilde{p} \cos^2 \tilde{q} + \frac{m}{2}\omega^2 \frac{2\tilde{p}}{m\omega} \sin^2 \tilde{q} = \omega\tilde{p} .$$

Wegen  $K(\tilde{q}, \tilde{p}) = \omega\tilde{p}$  ist folglich  $\tilde{q}$  zyklisch. Für die kanonischen Gleichungen hat man nun

$$\dot{\tilde{q}} = \frac{\partial K}{\partial \tilde{p}} = \omega \quad \text{und} \quad \dot{\tilde{p}} = \frac{\partial K}{\partial \tilde{q}} = 0 \quad \implies \quad \tilde{p} = \frac{E}{\omega} ,$$

also gilt insgesamt  $\tilde{q}(t) = \omega t + \varphi$  und  $\tilde{p}(t) = \frac{E}{\omega}$ . Die Integrationskonstanten  $E$  und  $\varphi$  können durch die Anfangswerte ausgedrückt werden. Aus  $T$  folgt dann

$$q(t) = \sqrt{\frac{2}{m\omega}} \sqrt{\frac{E}{\omega}} \sin(\omega t + \varphi) = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \sin(\omega t + \varphi) \quad \text{und} \quad p(t) = \sqrt{\frac{2E}{m}} \cos(\omega t + \varphi) .$$

Es bleibt noch zu zeigen, dass die Transformation auch tatsächlich kanonisch ist, d.h. dass es eine Funktion  $F_1(q, \tilde{q})$  gibt, sodass die beiden Gleichungen

$$p_\alpha = \frac{\partial F_1}{\partial q_\alpha} \quad \text{und} \quad \tilde{p}_\alpha = -\frac{\partial F_1}{\partial \tilde{q}_\alpha}$$

gelten. Dazu behaupten wir, dass für die gesuchte erzeugende Funktion

$$F_1(q, \tilde{q}) = \frac{m\omega}{2} q^2 \cot \tilde{q}$$

gilt. Einsetzen und Nachrechnen liefert dann direkt

$$\begin{aligned} p = \frac{\partial F_1}{\partial q} &= m\omega q \cot \tilde{q} \iff \tilde{q} = \operatorname{arccot} \left( \frac{1}{m\omega} \frac{p}{q} \right) = \arctan \left( m\omega \frac{q}{p} \right) \\ \implies \tilde{p}(q, p) &= \frac{m\omega}{2} \frac{q^2}{\sin^2(\arctan(m\omega \frac{q}{p}))} = \frac{p^2}{2m\omega} + \frac{m\omega}{2} q^2 \end{aligned}$$

für die erste Gleichung, während für die zweite völlig analog folgt

$$\tilde{p} = -\frac{\partial F_1}{\partial \tilde{q}} = \frac{m\omega}{2} q^2 \frac{1}{\sin^2 \tilde{q}}.$$

**Bemerkung:** Man kann zeigen, dass die Poisson-Klammern genau unter kanonischen Transformationen forminvariant sind.



Teil II.

# Spezielle Relativitätstheorie

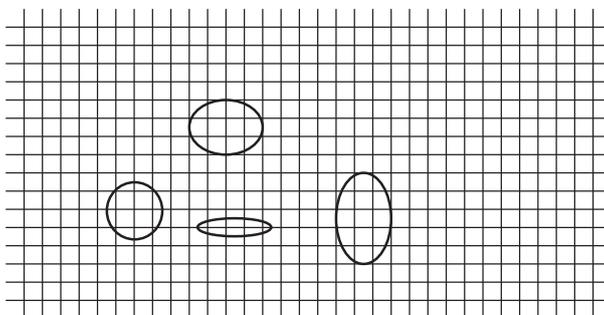
## 5. Raum und Zeit in der klassischen Physik

Bereits in der klassischen Mechanik wurde des öfteren auf Unterschiede der Newtonschen Theorie zur speziellen Relativitätstheorie hingewiesen. Im Wesentlichen erwachsen diese Probleme aus Newtons Annahme, dass Raum und Zeit absolute Begriffe seien. Erst Einstein zerschmetterte dieses jahrhundertalte Fundament der Physik um die Unvereinbarkeit der Maxwellschen Theorie und Newtonschen Mechanik aufzulösen, und zudem den Ätherbegriff des hypothetischen Lichtwellenmediums zu revidieren. Zunächst sollen daher einige aus dem vorigen Abschnitt vertraut klingende Begriffe präzise eingeführt werden, um Definitions- und Interpretationsprobleme von vorneherein auszuschließen.

### 5.1. Raum- und Zeitmessungen, Bezugssysteme, Inertialsysteme

Eine **Bewegung** entspricht stets einer Veränderung des Ortes im Laufe der Zeit. Weiter ist ein **Bezugssystem** im allgemeinsten Fall ein beliebiges System von Bezugskörpern (materielle Objekte), das zusätzlich mit einer Uhr ausgestattet ist. Speziell sei ein **starres Bezugssystem** ein System von materiellen Bezugskörpern, die sich in zeitlich zueinander unveränderter Lage befinden.

Diesem Bezugssystem wird ein (kartesisches) **Koordinatensystem** in beliebiger Art zugeordnet, z.B. durch orthogonale Blechwände oder ein starres Stangengerüst, wie in der folgenden Abbildung angedeutet:



**Abbildung 5.1.:** Das Bezugssystem  $\Sigma$  mit dem Koordinatensystem  $K_\Sigma$ , auf den einzelnen Knotenpunkten befinden sich synchronisierte Uhren.

Dieses ist natürlich auf unendlich viele Weisen möglich. Mit jedem Knotenpunkt des Koordinatensystems wird außerdem eine baugleiche **Uhr** verknüpft - wir gehen dabei stets von idealisierten Uhren aus, die keinerlei Ungenauigkeiten oder ähnliches aufweisen. Alle diese Uhren werden in einer bestimmten Weise miteinander synchronisiert. Mittels eines derartig ausgestatteten Bezugssystems kann man die Orts- und Zeitkoordinaten  $(r_k, t) = (\vec{r}, t)$  relativ zu diesem Bezugssystem eines Ereignisses bestimmen, d.h. messen.

Unter einem **Ereignis** versteht man dabei ein physikalisches Geschehen, das sowohl räumlich, als auch zeitlich lokalisiert ist, z.B. das Aufblitzen einer Lampe, das Auftreffen eines Teilchens auf einen Schirm oder das „Hier-und-jetzt-sein“ eines Teilchens.

Die **Messung** der Raum- und Zeitkoordinaten eines Ereignisses relativ zum Bezugssystem  $\Sigma$  verläuft nun wie folgt: Man definiere die **Raumkoordinate** des Ereignisses als die Raumkoordinate derjenigen Uhr in der unmittelbaren Nähe des Ereignisses, und die **Zeitkoordinate** durch den Zeigerstand dieser Uhr. Dabei sei noch einmal auf das obige Bild verwiesen, dass eine gewisse Grobkörnigkeit andeutet.

Die Messung muss dabei **lokal** sein, denn eine Messung ist immer eine Feststellung einer lokalen Koinzidenz. Ein **Beobachter** ist das ganze System aller registrierenden Uhren.

**Bemerkung:** • *Es existieren somit immer viele verschiedene*

- Bezugssysteme  $\Sigma, \Sigma', \Sigma'', \dots$
- Koordinatenachsen  $K_\Sigma, K'_\Sigma, K''_\Sigma, \dots$
- Koordinatensätze  $(x, y, z), (r, \vartheta, \varphi), (\rho, \phi, z), \dots$

- *Bei der Messung der räumlichen Koordinate wird vorausgesetzt, dass*
  - *es frei verschiebbare starre Maßstäbe gibt,*
  - *die Geometrie des Raumes euklidisch ist, d.h. der Abstand zweier Punkte ist gegeben durch*

$$d_{AB} = \sqrt{(x_B - x_A)^2 + (y_B - y_A)^2 + (z_B - z_A)^2}$$

- *Die **Zeit** ist diejenige Dimension von Ereignissen, die eine Ordnung nach „vorher“ und „nachher“ erlaubt, die Zeit ist somit ein Ordnungsparameter. Weiter benötigt man eine Metrisierung der Zeit, d.h. eine Möglichkeit, Zeitintervalle quantitativ zu vergleichen. Grundsätzlich ist hier jede Bewegung als Referenzbewegung denkbar. Praktisch aber erscheinen periodische oder gleichmäßig monotone Bewegungen für die **Zeitmessung** sinnvoll.*
- *Die **Synchronisation** der Uhren ist konventionsabhängig. Wir definieren die Synchronisation zweier Uhren  $U_A$  und  $U_B$  wie folgt:*

$$\otimes_{t'_A} \xleftrightarrow{t''_A} \otimes_{t_B} \quad \text{mit} \quad t_B = t'_A + \frac{1}{2}(t''_A - t'_A).$$

*Der Faktor  $\frac{1}{2}$  ist dabei die Einsteinsche Konvention - die allerdings auch natürlich erscheint. Man beachte, dass sich daraus eine **ortsgebundene Zeitangabe** ergibt.*

Besondere Bezugssysteme sind nun die **Inertialsysteme**. Dabei heißt ein starres Bezugssystem  $\Sigma$  Inertialsystem, wenn in ihm das Newtonsche Trägheitsgesetz gilt, d.h. wenn sich freie Teilchen relativ  $\Sigma$  ohne Beschleunigung bewegen. Genauer gesagt liegt ein Inertialsystem vor, wenn (genügend viele) sich selbst überlassene Körper geradlinig fliegen, dies ist rein raum-geometrisch feststellbar. Als Zeitskala wählt man jene, in der diese freien Körper gleiche Strecken in gleichen Zeiten zurücklegen. Dies ist die sogenannte **Inertialzeit** oder auch **Newtonzeit**. In diesem Zeitsystem gilt dann, dass sich im Inertialsystem freie Körper geradlinig-gleichförmig bewegen. Im Folgenden sollen stets kartesische Koordinatensysteme mit der Inertialzeit sowie der Einsteinsynchronisation verwendet werden, man schreibt dafür  $K_\Sigma(\vec{r}_\Sigma, t)$ .

Als nächstes sollen nun verschiedene Inertialsysteme betrachtet werden. Solche, die sich nur durch die Wahl der kartesischen Koordinatenachsen unterscheiden und / oder die Kalibration der

Uhren, heißen **relativ ruhend zueinander**. Sind die Koordinaten eines Ereignisses bezüglich des einen Systems durch  $(r_k, t)$  gegeben, und bezüglich eines anderen durch  $(r'_k, t')$ , dann gilt:

$$r'_k = \sum_i R_{ki} r_i + a_k \quad t' = t + \beta ,$$

wobei  $R$  eine orthogonale  $3 \times 3$ -Matrix mit Koeffizienten  $R_{ki} \in \mathbb{R}$  ist, also gilt  $R^t R = R R^t = \mathbb{1}$ . Zur Vereinfachung solcher, im Folgenden immer wieder auftretenden, Summen führt man die **Einsteinsche Summenkonvention** ein, die festlegt, dass über zwei gleiche Indizes summiert wird - das Summenzeichen wird dadurch unnötig.

**Beispiel:**  $r'_k = R_{ki} r_i + a_k = \sum_i R_{ki} r_i + a_k$  oder  $\vec{a} \vec{b} = \sum_{i=1}^3 a_i b_i = a_i b_i = a_k b_k$ . Mit dem  $\epsilon$ -Tensor können wir das Kreuzprodukt als  $\vec{a} \times \vec{b} = \sum_{k,l} \epsilon_{ikl} a_k b_l = \epsilon_{ikl} a_k b_l$  darstellen.

## 5.2. Koordinatenwechsel zwischen Inertialsystemen

Sei nun wieder die Koordinatentransformation betrachtet, wobei  $R_{ik}$ ,  $a_k$  und  $\beta$  konstant seien.  $R$  ist eine Drehmatrix, welche das Koordinatensystem des Inertialsystems IS in jenes von IS' transformiert. Umgekehrt gilt, wenn IS ein Inertialsystem mit den Koordinaten  $(r_k, t)$  ist, dann ist auch

$$r'_k = R_{ki} r_i + a_k \quad t' = t + b$$

ein Inertialsystem, denn die Bewegungsgleichung eines freien Körpers lautet nach Newton

$$\frac{d^2}{dt^2} \vec{r} = \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}' = 0 .$$

### 5.2.1. Eindimensionale Herleitung des Transformationsgesetzes

Man betrachte nun zwei Inertialsysteme IS und IS', die nicht zueinander in Ruhe stehen. Die Koordinaten eines Ereignisses seien in IS durch  $(r_k, t)$  und in IS' durch  $(r'_k, t')$  gegeben. Weiter gehe man nun davon aus, dass die Koordinatenachsen von IS' immer parallel zu denen von IS seien. Außerdem seien zum Zeitpunkt  $t = t' = 0$  die Koordinatenursprünge identisch. Man beschränke sich der Einfachheit halber auf reine  $x$ -Bewegungen und suche dann die allgemeinste Form von Koordinatentransformationen

$$x \rightarrow x' = f_1(x, t) \quad t \rightarrow t' = f_0(x, t) .$$

Da beide Systeme Inertialsysteme sind, bewegt sich ein freier Körper relativ zu beiden gleichförmig geradlinig. Die Weltlinie eines freien Körpers relativ zu dem Inertialsystem IS ist daher  $x = vt + x_0$ , also eine Gerade im  $(x, t)$ -Diagramm. Folglich ist auch die Weltlinie desselben Körpers relativ zu IS' von der Form  $x' = v' t' + x'_0$ , bildet also hier eine Gerade im  $(x', t')$ -Diagramm.

Der Hauptsatz der affinen Geometrie, der an dieser Stelle nur zitiert<sup>1</sup> werden soll, besagt nun, dass die allgemeinste Transformation

$$(x, t) \mapsto (x', t') = (f_1(x, t), f_0(x, t))$$

---

<sup>1</sup>Für mathematisch genauere Ausführungen siehe etwa „Analytische Geometrie“ von Fischer.

die eine Gerade in eine andere Gerade überführt, durch das **affine Transformationsgesetz**

$$x' = \frac{L_{11}x + L_{10}t + c_1}{\alpha x + \beta t + \gamma} \quad t' = \frac{L_{01}x + L_{00}t + c_0}{\alpha x + \beta t + \gamma}$$

gegeben ist, wobei  $L_{11}$ ,  $L_{10}$ ,  $L_{00}$ ,  $c_1$ ,  $c_0$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$  Konstanten sind. Wenn man zusätzlich verlangt, dass endliche Koordinaten in endliche Koordinaten übergehen sollen (aus physikalischer Sicht sicherlich eine berechnete Forderung), dann sind die möglichen Transformationen zudem linear, d.h. von der Gestalt

$$x' = L_{11}x + L_{10}t + c_1 \quad t' = L_{01}x + L_{00}t + c_0 .$$

Nach den Voraussetzungen gilt  $x'(x=0, t=0) = 0 = c_1$  und  $t'(x=0, t=0) = 0 = c_0$ , sodass man schließlich das folgende Ergebnis erhält:

$$x' = L_{11}x + L_{10}t \quad t' = L_{01}x + L_{00}t .$$

Wie ist die Form dieser Abbildung zu interpretieren? Man betrachte einen Punkt, der in  $IS'$  ruht. Für diesen gilt dann

$$dx' = 0 = L_{11} dx + L_{10} dt \quad \implies \quad \frac{dx}{dt} = -\frac{L_{10}}{L_{11}} = \text{konst.} ,$$

wobei  $\frac{dx}{dt}$  der Geschwindigkeit des Punktes relativ zu  $IS$  entspricht.

Da dieser Punkt beliebig gewählt war, muss sich  $IS'$  relativ zu  $IS$  mit konstanter Geschwindigkeit in  $x$ -Richtung bewegen. Umgekehrt gilt, dass wenn sich ein Bezugssystem relativ zu einem Inertialsystem mit konstanter Geschwindigkeit bewegt, so ist es auch ein Inertialsystem.

**Satz 13:** *Ist ein Inertialsystem gegeben, so sind alle dazu mit konstanter Geschwindigkeit bewegten oder alle relativ dazu gedrehten oder verschobenen Systeme ebenfalls Inertialsysteme.*

Sei nun  $P$  in  $IS'$  ruhend. Man betrachte zwei Bewegungsereignisse, d.h. es werden zweimal die Koordinaten von  $P$  zu unterschiedlichen Zeiten gemessen. Diese seien in  $IS'$  gegeben durch  $(x'_1, t'_1)$  und  $(x'_2, t'_2)$ , sowie in einem weiteren Inertialsystem  $IS$  durch  $(x_1, t_1)$  und  $(x_2, t_2)$ . Da  $P$  in  $IS'$  ruht, gilt

$$\begin{aligned} \Delta x' &= x'_2 - x'_1 = dx' = 0 \quad \text{und} \\ \Delta x' &= x'_2 - x'_1 = L_{11}x_2 + L_{10}t_2 - (L_{11}x_1 + L_{10}t_1) \\ &= L_{11}(x_2 - x_1) + L_{10}(t_2 - t_1) = L_{11} dx + L_{10}dt . \end{aligned}$$

Man erkennt somit, dass das allgemeinste Transformationsgesetz zwischen zwei Inertialsystemen von der Gestalt

$$x' = L_{11} \left( x + \frac{L_{10}}{L_{11}} t \right) = L_{11}(x - vt) \quad t' = L_{01}x + L_{00}t = L_{01}x + L_{00}t$$

ist, wobei die Konstanten  $L_{ik}$  von der **Relativgeschwindigkeit**  $v$  abhängen, also Funktionen in  $v$  sind, sodass wir effektiv erhalten:

$$x' = L_{11}(v) \cdot (x - vt) \quad t' = L_{01}(v)x + L_{00}(v)t .$$

### 5.2.2. Verallgemeinerung auf beliebige Richtungen

Die Überlegungen, die hier zunächst für den eindimensionalen Fall durchgeführt worden sind, lassen sich nun recht einfach auf Bewegungen in beliebige Richtungen  $(r_k, t)$  verallgemeinern. Seien die Weltlinien eines freien Teilchens in  $\text{IS}$  und  $\text{IS}'$  durch

$$r_k = v_k t + (r_0)_k \quad \text{und} \quad r'_k = v'_k t' + (r'_0)_k$$

für  $k = 1, 2, 3$  gegeben. Für die allgemeinste Transformation, die Geraden in Geraden überführt, welche nicht singular sind, gilt

$$r'_k = L_{ki} r_i + L_{k0} t \quad t' = L_{0i} r_i + L_{00} t .$$

Auch hier soll zunächst wieder ein Punkt betrachtet werden, der im Inertialsystem  $\text{IS}'$  ruht, d.h. es gilt  $dr'_k = 0$  für alle  $k$ , also folgt

$$dr'_k = 0 = L_{ki} dr_i + L_{k0} dt \quad \implies \quad L_{ki} \frac{dr_i}{dt} = -L_{k0}$$

für alle  $i, k = 1, 2, 3$ . Dies definiert nun eine  $3 \times 3$ -Matrix  $L = [L_{ij}]$ . Um deren Koeffizienten zu bestimmen, betrachte man die zugehörige inverse Matrix  $L^{-1}$ . Durch linksseitige Multiplikation der letzten Gleichung mit  $L^{-1}$  findet man dann

$$\begin{aligned} -(L^{-1})_{jk} L_{k0} &= (L^{-1})_{jk} L_{ki} \frac{dr_i}{dt} = (L^{-1}L)_{ji} \frac{dr_i}{dt} = \delta_{ji} \frac{dr_i}{dt} = \frac{dr_j}{dt} \\ \iff \frac{dr_j}{dt} &= \underbrace{-(L^{-1})_{jk} L_{k0}}_{\text{konstant}} = v_j . \end{aligned}$$

Folglich bewegt sich  $\text{IS}'$  bezüglich  $\text{IS}$  mit konstanter Geschwindigkeit, und zwar in allen Komponenten, das Ergebnis ist somit völlig analog zum eindimensionalen Fall.

### 5.2.3. Spezielle Galilei-Transformationen und die Galilei-Gruppe

Betrachtet man nun wieder ein beliebiges Inertialsystem  $\text{IS}$  mit den Koordinaten  $(r_k, t)$ , dann ist die Bahn eines freien Teilchens per Definition durch die Bahngleichung

$$\frac{d^2}{dt^2} \vec{r}(t) = 0$$

gegeben. Sei  $\Sigma'$  ein anderes Bezugssystem mit achsenparallelen Koordinatenachsen, welches sich zudem achsenparallel zu  $\text{IS}$  bewegt. Dann sind die räumlichen Koordinaten eines beliebigen Bahnpunktes des Teilchens relativ zu  $\Sigma'$  durch

$$r'_k = r_k - R_k(t)$$

gegeben. Folglich ist  $\Sigma'$  mit dem Koordinatensystem  $K_{\Sigma'}$  genau dann ein Inertialsystem, wenn die Gleichung für die Bewegung desselben freien Teilchens (relativ zu  $\Sigma'$ ) durch

$$\frac{d^2}{dt^2} \vec{r}' = 0$$

formuliert ist. Die Alltagserfahrung suggeriert uns die Existenz einer universalen Zeit, die sich später aber als falsch herausstellen wird. Angenommen es gäbe tatsächlich eine universelle, absolute Zeit, so folgt  $t = t'$  oder genauer  $\Delta t = \Delta t'$  für Zeitdifferenzen, und damit dann

$$\frac{d^2}{dt'^2} \vec{r}' = 0 \iff \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}' = 0 \implies \frac{d^2}{dt^2} (\vec{r} - \vec{R}(t)) = \frac{d^2}{dt^2} \vec{R}(t) = 0 ,$$

sodass für die Schwerpunktsbewegung  $\vec{R}(t) = \vec{v}t + \vec{R}_0$  mit  $\vec{v}$  konstant gilt. D.h. die Raumzeit-Koordinaten eines beliebigen Ereignisses sind relativ zu zwei Inertialsystemen - unter der Annahme der Universalzeit - gemäß

$$r'_k = r_k - v_k t - R_0 \quad t' = t$$

verknüpft. Dieses Transformationsgesetz entspricht in der Tat der Alltagserfahrung und auch der Newtonschen Theorie, denn speziell für  $\vec{v} = (v, 0, 0)$  gilt

$$x' = x - vt \quad y' = y \quad z' = z \quad t' = t .$$

Dies steht aber nicht im Widerspruch zum ursprünglichen, rein aus der Definition des Inertialsystems folgenden Transformationsgesetzes, welches wir zuvor hergeleitet haben, sondern ist nur ein spezieller Fall mit  $L_{11}(v) = 1$ ,  $L_{01}(v) = 0$  und  $L_{00}(v) = 1$ . Diese Spezialisierung hängt selbstverständlich mit der zusätzliche Annahme der Universalzeit zusammen. Die obige Transformation heißt **spezielles Galilei-Transformationsgesetz**. Klarerweise gilt auch hier, dass relativ zueinander ruhende Bezugssysteme mit (relativ zueinander) gedrehten oder verschobenen Koordinatenachsen auch gleichzeitig inertial sind. Das allgemeine Transformationsgesetz zwischen beliebigen Inertialsystemen aufgrund der Alltagserfahrung ist also gegeben durch

$$\vec{r}' = R\vec{r} - \vec{v}t + \vec{a} \quad t' = t + b$$

für eine beliebige Rotationsmatrix  $R$  und beliebige Vektoren  $\vec{v}$  und  $\vec{a}$  sowie  $b \in \mathbb{R}$ . Dies ist eine allgemeine Galilei-Transformation. Alle solche Transformationen bilden eine Gruppe, die als **Galilei-Gruppe** bezeichnet wird.

#### 5.2.4. Absolute Größen unter Galilei-Transformationen

Sei nun wieder ein Inertialsystem IS mit Koordinaten  $(r_k, t)$  vorgegeben. Man betrachte dann alle Systeme, die aus diesem Inertialsystem via Galilei-Transformationen hervorgehen, diese bilden dann alle möglichen Inertialsysteme. Es stellt sich die Frage, welche raumzeitlichen Größen einen absoluten Wert haben, d.h. einen Wert, der in allen Inertialsystemen den gleichen Wert hat - also Galilei-invariant ist. Dabei stellt man fest, dass lediglich Koordinaten-Differenzen mögliche absolute Größen sind. Betrachten wir dazu zwei Ereignisse, zum einen in IS mit den Koordinaten  $(r_k, t)$  und  $(\tilde{r}_k, \tilde{t})$  und zum anderen in IS' mit  $(r'_k, t')$  und  $(\tilde{r}'_k, \tilde{t}')$ . Dann gilt zunächst für die Zeit

$$\Delta t = t - \tilde{t} = (t + b) - (\tilde{t} + b) = t' - \tilde{t}' = \Delta \tilde{t} ,$$

also ist der zeitliche Abstand von Ereignissen absolut. Für den Betrag des räumlichen Abstands gilt aber

$$\begin{aligned} |\Delta \vec{r}'| &= |\vec{r}' - \tilde{r}'| = |(R\vec{r} - \vec{v}t + \vec{a}) - (R\tilde{r} - \vec{v}\tilde{t} + \vec{a})| = |R\vec{r} - R\tilde{r} - \vec{v}(t - \tilde{t})| \\ &= |R(\vec{r} - \tilde{r}) - \vec{v}(t - \tilde{t})| \neq |\vec{r} - \tilde{r}| = |\Delta \vec{r}| , \end{aligned}$$

d.h. nur für Ereignisse, die in IS gleichzeitig sind (was nach dem vorigen Ergebnis für Zeitdifferenzen äquivalent dazu ist, dass sie in IS' gleichzeitig sind) gilt die Gleichheit

$$|\Delta \vec{r}'| = |R(\vec{r} - \tilde{r})| = |\vec{r} - \tilde{r}| = |\Delta \vec{r}| .$$

### 5.2.5. Das Relativitätsprinzip der Mechanik

Als nächstes soll nun die Dynamik von beliebigen Systemen betrachtet werden, insbesondere soll das zweite Newtonsche Axiom genauer untersucht werden. Unser Ziel dabei wird sein zu verstehen, wie sich die Physik eines beliebigen mechanischen Systems, einmal aus Sicht von  $IS$  betrachtet, einmal von  $IS'$  betrachtet, verhält. Dabei gehen wir von einem abgeschlossenen System aus, d.h. alle äußeren Kräfte verschwinden.

Zunächst einmal gilt der folgenden Erfahrungssatz: Es ist unmöglich durch mechanische Experimente innerhalb eines abgeschlossenen Systems zu entscheiden, ob das System ruht oder sich gleichförmig geradlinig bewegt, ebensowenig hängt die Mechanik vom absoluten Ort oder der Richtung ab. Daraus folgt dann:

**Satz 14 (Relativitätsprinzip der Mechanik):** *Alle Inertialsysteme sind für die Mechanik gleichwertig.*

*Beweis.* Dies lässt sich formal zeigen, wenn man voraussetzt, dass das richtige Transformationsgesetz zwischen den einzelnen Inertialsystemen ein Element der Galilei-Gruppe ist, und man sich weiter auf Kraftgesetze der Form

$$\vec{F}_i = \sum_{i \neq j} \vec{F}_{ij}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \sum_{i \neq j} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) F_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

beschränkt. Die obige Aussage lässt sich nun wie folgt beweisen: Man beachte zunächst, dass im Inertialsystem das Newtonsche Kraftgesetz

$$m_i \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_i = \vec{F}_i = \sum_{i \neq j} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) F_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

gilt. Man definiere weiter für beliebige  $R$ ,  $\vec{v}$ ,  $\vec{a}$  und  $b$  die Galilei-transformierten Koordinaten  $\vec{r}' = R\vec{r} - \vec{v}t + \vec{a}$  und  $t' = t + b$ , dann findet man schließlich

$$\begin{aligned} m_i \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_i &= m_i \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}'_i = m_i \frac{d^2}{dt^2} (R\vec{r}_i - \vec{v}t + \vec{a}) = Rm_i \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_i \\ &= R \sum_{i \neq j} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) F_{ij}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = \sum_{i \neq j} (R\vec{r}_i - R\vec{r}_j) F_{ij}(|R(\vec{r}_i - \vec{r}_j)|) \\ &= \sum_{i \neq j} [(R\vec{r}_i - \vec{v}t + \vec{a}) - (R\vec{r}_j - \vec{v}t + \vec{a})] F_{ij}(|(R\vec{r}_i - \vec{v}t + \vec{a}) - (R\vec{r}_j - \vec{v}t + \vec{a})|) \\ &= \sum_{i \neq j} (\vec{r}'_i - \vec{r}'_j) F_{ij}(|\vec{r}'_i - \vec{r}'_j|) = \sum_{i \neq j} \vec{F}_{ij}(\vec{r}'_i, \vec{r}'_j), \end{aligned}$$

d.h. das Bewegungsgesetz relativ zum Inertialsystem  $IS'$  lautet

$$m_i \frac{d^2}{dt'^2} \vec{r}'_i = \sum_{i \neq j} F_{ij}(\vec{r}'_i, \vec{r}'_j).$$

Damit ist das Relativitätsprinzip der Newtonschen Mechanik bewiesen. □

Die Grundlagen der Mechanik sind also invariant unter den Galilei-Transformationen, d.h. wenn die Galilei-Transformationen die richtigen Transformationsgesetze zwischen Inertialsystemen sind, dann sind alle Inertialsysteme hinsichtlich der Gesetze der Newtonschen Mechanik gleichwertig, mit anderen Worten gilt dann das generelle Relativitätsprinzip der Mechanik.

### 5.3. Das allgemeine Relativitätsprinzip der Physik

Aus grundsätzlichen physikalischen Überlegungen schließt man, dass alle Inertialsysteme hinsichtlich der gesamten Physik gleichwertig sind. Man spricht vom **Relativitätsprinzip der Physik**, welches im Detail die folgenden Eigenschaften hat:

- *Homogenität des Raumes*: Es gibt keinen (absolut) ausgezeichneten Punkt im Raum.
- *Isotropie des Raumes*: Es gibt keine ausgezeichnete Richtung im Raum.
- *Homogenität der Zeit*: Es gibt keinen ausgezeichneten Zeitpunkt.
- *Invarianz unter Geschwindigkeits-Transformationen*: Es gibt keine ausgezeichnete Geschwindigkeit.

Man beachte, dass der letzte Unterpunkt insbesondere besagt, dass es keine absolute Ruhe gibt. Es stellt sich also die Frage, ob es dieses Relativitätsprinzip auch in Galileischer Form gilt, also insbesondere ob alle Naturgesetze invariant unter Galilei-Transformationen sind.

Diese Frage lässt sich mit Nein beantworten, denn z.B. zeigt sich, dass sich alle Kraftwirkungen mit endlicher Geschwindigkeit ausbreiten, etwa eine Welle mit  $c$ . Folglich existiert eine maximale Ausbreitungsgeschwindigkeit, die zufällig  $c$  ist. Nach dem Relativitätsprinzip muss diese aber in jedem Inertialsystem denselben Wert haben, d.h.  $c$  muss eine universelle Geschwindigkeit sein. Dies steht aber im Widerspruch zum Galileischen Transformations-Gesetz, denn dies impliziert

$$v' = \frac{dx'}{dt'} = \frac{d}{dt}(x - \bar{v}t) = \frac{dx}{dt} - \bar{v} = v - \bar{v} ,$$

wobei  $v'$  die Geschwindigkeit (eines Objekts) relativ zu  $IS'$ ,  $\bar{v}$  die Geschwindigkeit von  $IS'$  relativ zu  $IS$  und  $v$  die Geschwindigkeit (des Objekts) relativ zu  $IS$  ist. Somit folgt  $v' = \bar{v} - v$  und  $v = \bar{v} + v'$ , d.h. die einzig mögliche universelle Geschwindigkeit wäre  $v = \infty = v'$ . Demnach ist entweder das Relativitätsprinzip oder das Galilei-Transformationsgesetz falsch.

**Beispiel:** Man führe dazu nun folgendes Experiment durch: Man betrachte zwei Inertialsysteme  $IS$  und  $IS'$ , wobei sich  $IS'$  wieder mit der Geschwindigkeit  $\bar{v}$  relativ zu  $IS$  bewege. Weiter betrachte man einen Läufer, der sich relativ zu  $IS'$  mit  $v'$  fortbewege.

Die naive Erwartung für die vom Läufer relativ von  $IS$  aus zurückgelegte Distanz wäre die Addition beider Wege: Innerhalb der Zeit  $t = \Delta t$  legt der Läufer den Weg  $v'\Delta t$  zurück, dies folgt aus der Definition der Geschwindigkeit  $v'$ . Innerhalb derselben Zeit bewegt sich der Ursprung  $O'$  von  $IS'$  um das Wegstück  $\bar{v}\Delta t$  gemäß der Definition der Relativgeschwindigkeit  $\bar{v}$ . Folglich ist der Weg des Läufers relativ zu  $IS$  gerade gleich

$$\bar{v}\Delta t + v'\Delta t = v\Delta t \quad \text{mit} \quad \bar{v} + v' = v .$$

Hierbei wird jedoch der wichtige Punkt außer Acht gelassen, dass die Geschwindigkeit  $v'$  mit den Maßstäben und Uhren im (relativ zu  $IS$ ) bewegten Inertialsystem  $IS'$ , während  $\bar{v}$  und  $v$  mit den Maßstäben und Uhren in  $IS$  zu messen sind.

### 5.4. Lorentz-Transformationen

Es soll nun weiter von der Gültigkeit des allgemeinen Relativitätsprinzips der Physik ausgegangen werden. Als Ersatz für die Galilei-Transformationen betrachten wir daher nun die Lorentz-Transformationen.

### 5.4.1. Reine Geschwindigkeits-Transformationen in $x$ -Richtung

Aus dem affinen Transformationsgesetz für Geraden haben wir in 5.2.1 ganz elementar hergeleitet, dass für eine allgemeine räumlich eindimensionale Transformation

$$\begin{aligned}x' &= L_{11}x + L_{10}t = L_{11} \left( x - \left( -\frac{L_{10}}{L_{11}} \right) t \right) = a(x - vt) \\t' &= L_{01}x + L_{00}t = L_{00} \left( t - \left( -\frac{L_{01}}{L_{00}} \right) x \right) = b \left( t - \alpha \frac{x}{v} \right)\end{aligned}$$

gilt. Nach dem Relativitätsprinzip sind  $a$ ,  $b$  und  $\alpha$  universale Funktionen der Geschwindigkeit  $v$ , d.h. es folgt für die beiden relevanten Komponenten

$$x' = a(v)(x - vt) \quad t' = b(v) \left( t - \alpha(v) \frac{x}{v} \right) .$$

Ebenfalls aus dem Relativitätsprinzip, genauer aus der Isotropie des Raumes, folgt, dass  $a(-v) = a(v)$ ,  $b(-v) = b(v)$  und  $\alpha(-v) = \alpha(v)$  gilt. Weiter müssen die beiden Geschwindigkeitstransformationen der Koordinaten  $\Sigma$  von IS und  $\Sigma'$  von IS' unter

$$\Sigma \xrightarrow{v} \Sigma' \quad \text{und} \quad \Sigma' \xrightarrow{-v} \Sigma$$

zueinander invers sein, d.h. insbesondere, dass die Zusammensetzung beider die Identität ergibt. Man betrachte daher beide Transformationen explizit:

$$\begin{aligned}\Sigma \xrightarrow{v} \Sigma' &: \quad x' = a(v)(x - vt) \quad t' = b(v) \left( t - \alpha(v) \frac{x}{v} \right) \\ \Sigma' \xrightarrow{-v} \Sigma &: \quad x = a(-v)(x' + vt') \quad t = b(-v) \left( t' + \alpha(-v) \frac{x'}{v} \right)\end{aligned}$$

Durch Einsetzen von  $t$  in  $t'$  findet man unter Verwendung obiger Identitäten dann sofort

$$t' = b(v) \left( b(v)t' + b(v)\alpha(v) \frac{x'}{v} - \frac{\alpha(v)}{v} a(v)(x' + vt') \right) = b \left( (b - \alpha a)t' + (b\alpha - a\alpha) \frac{x'}{v} \right) ,$$

also muss  $b\alpha - a\alpha = (b - a)\alpha = 0$  sein, was im allgemeinsten Fall zu  $a = b$  führt. Eine analoge Rechnung für die räumlichen Koordinaten  $x$  und  $x'$  liefert letztlich

$$b(b - \alpha a) = 1 \iff b^2(1 - \alpha) = 1 \iff b = \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(v)}} =: \gamma(v) ,$$

sodass die vollständige Transformation von der folgenden Form ist:

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - \alpha(v)}} \quad t' = \frac{t - \alpha(v) \frac{x}{v}}{\sqrt{1 - \alpha(v)}} .$$

Als nächstes soll nun das Relativitätsprinzip auf zwei verschiedene Geschwindigkeitstransformationen hintereinander angewandt werden. Dazu ist es nötig drei Inertialsysteme mit den Koordinatensystemen  $\Sigma$ ,  $\Sigma'$  und  $\Sigma''$  zu betrachten. Dabei seien die Koordinaten eines Ereignisses relativ zu

- $\Sigma$  durch  $(x, t)$  gegeben, es bewege sich  $\Sigma'$  relativ zu  $\Sigma$  mit  $v$  in  $x$ -Richtung,
- $\Sigma'$  durch  $(x', t')$  gegeben, es bewege sich  $\Sigma''$  relativ zu  $\Sigma'$  mit  $w$  in  $x$ -Richtung,

- $\Sigma''$  durch  $(x'', t'')$  gegeben, es bewege sich  $\Sigma''$  relativ zu  $\Sigma$  mit  $u$  in  $x$ -Richtung.

Analog zum zuvor betrachteten Fall gilt dann zunächst für die einzelnen Transformationen

$$\begin{aligned} \Sigma \xrightarrow{v} \Sigma' & : \quad x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - \alpha(v)}} & t' &= \frac{t - \alpha(v)\frac{x}{v}}{\sqrt{1 - \alpha(v)}} \\ \Sigma' \xrightarrow{w} \Sigma'' & : \quad x'' = \frac{x' - wt'}{\sqrt{1 - \alpha(w)}} & t'' &= \frac{t' - \alpha(w)\frac{x'}{w}}{\sqrt{1 - \alpha(w)}} \end{aligned}$$

sodass man für die Transformation  $\Sigma \xrightarrow{v} \Sigma' \xrightarrow{w} \Sigma''$  dann durch Einsetzen

$$\begin{aligned} x'' &= \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(w)}} \left( \frac{x}{\sqrt{1 - \alpha(v)}} - \frac{vt}{\sqrt{1 - \alpha(v)}} - \frac{wt}{\sqrt{1 - \alpha(v)}} + \frac{w\alpha(v)\frac{x}{v}}{\sqrt{1 - \alpha(v)}} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(v)}} \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(w)}} \left( 1 + \alpha(v)\frac{w}{v} \right) x - \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(v)}} \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(w)}} (v + w)t \\ t'' &= \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(v)}} \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(w)}} \left( 1 + \alpha(w)\frac{v}{w} \right) t - \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(v)}} \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(w)}} \left( \frac{\alpha(v)}{v} + \frac{\alpha(w)}{w} \right) x \end{aligned}$$

erhält. Andererseits muss natürlich auch wieder für die Direkt-Transformation

$$x'' = \frac{x - ut}{\sqrt{1 - \alpha(u)}} \quad t'' = \frac{t - \alpha(u)\frac{x}{u}}{\sqrt{1 - \alpha(u)}}$$

gelten. Durch Vergleich der beiden Ergebnisse erhält man dann die folgenden Gleichungen

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(u)}} &= \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(v)}} \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(w)}} \left( 1 + \alpha(v)\frac{w}{v} \right) \\ \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(u)}} &= \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(v)}} \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(w)}} \left( 1 + \alpha(w)\frac{v}{w} \right) \\ \frac{u}{\sqrt{1 - \alpha(u)}} &= \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(v)}} \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha(w)}} (v + w) \end{aligned} \right\} \implies \frac{\alpha(v)}{v^2} = \frac{\alpha(w)}{w^2} \quad (5.1)$$

Da die zusammengesetzte Gleichung (5.1) für beliebige Geschwindigkeiten  $v$  und  $w$  gelten muss, müssen folglich beiden Seiten konstant sein, d.h. es gilt  $\alpha(v) = kv^2$ . Sofort schließt sich die Frage an, wie die so eingeführte Konstante  $k$  mit der Einheit  $[k] = [v]^{-2}$  interpretieren lässt. Dazu betrachte man die differentielle Form

$$\left. \begin{aligned} x' &= \frac{x - vt}{\sqrt{1 - kv^2}} \quad \rightarrow \quad dx' = \frac{dx - v dt}{\sqrt{1 - kv^2}} \\ t' &= \frac{t - kv^2\frac{x}{v}}{\sqrt{1 - kv^2}} \quad \rightarrow \quad dt' = \frac{dt - kv dx}{\sqrt{1 - kv^2}} \end{aligned} \right\} \implies dt'^2 - k dx'^2 = \dots = dt^2 - k dx^2 .$$

Demnach ist  $dt^2 - k dx^2$  eine universelle Konstante und es folgt, dass ein Punkt in IS mit der Geschwindigkeit

$$\left( \frac{dx}{dt} \right)^2 = \frac{1}{k} \iff \frac{dx}{dt} = \sqrt{k^{-1}}$$

diese Geschwindigkeit auch relativ zu einem anderen Inertialsystem  $IS'$  hat. Mit anderen Worten hat also  $\sqrt{k^{-1}}$  die Bedeutung einer Universalgeschwindigkeit, die empirisch gerade der Lichtgeschwindigkeit  $c$  entspricht, sodass letztlich

$$k = \frac{1}{c^2} \quad \implies \quad \alpha(v) = \frac{v^2}{c^2} \quad \text{und} \quad x' = \gamma(x - vt) \quad t' = \gamma\left(t - \frac{x}{c}\right)$$

gilt. Wäre die Universalgeschwindigkeit dagegen  $\infty$ , wie bei den Galilei-Transformationen, so sieht man direkt, dass  $k = 0$  gilt, und damit wäre auch  $\alpha(v) = -kv^2 = 0$ . Die Transformation geht somit für  $k \rightarrow 0$  über in die Galilei-Transformation

$$x' = x - vt \quad t' = t .$$

**Bemerkung:** Es sei an dieser Stelle noch einmal angemerkt, dass die Galilei-Transformation zwar nicht streng richtig ist, für Geschwindigkeiten  $v \ll c$  die Werte jedoch kaum von denen der eben hergeleiteten Lorentz-Transformationen abweichen.

### 5.4.2. Notation mittels Vierervektoren, Tensorschreibweise

Die Lorentz-Transformation lässt sich in einer wesentlich eleganteren Schreibweise formulieren. Hierzu führt man sogenannte **Vierervektoren** ein, deren Komponenten wie folgt definiert sind:

$$x^0 := x_0 := ct \quad (\text{Dimension einer Länge}) \quad x^i := -x_i \quad \vec{x} = \vec{r} ,$$

sodass man dann

$$\begin{aligned} x^\mu &:= (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, r_1, r_2, r_3) = (x_0, \vec{x}) = (ct, \vec{r}) \quad \text{und} \\ x_\mu &:= (x^0, -x^1, -x^2, -x^3) = (ct, -r_1, -r_2, -r_3) = (x_0, -\vec{x}) = (ct, -\vec{r}) \end{aligned}$$

erhält, wobei wir die untere Sorte der Vierervektoren (die sogenannten „kovarianten“) erst später benötigen. Die Lorentz-Transformation lässt sich dann mit den Vierervektoren auch als

$$x'^1 = \gamma(v) \left(x^1 - \frac{v}{c}x^0\right) \quad x'^2 = x^2 \quad x'^3 = x^3 \quad x'^0 = \gamma(v) \left(x^0 - \frac{v}{c}x^1\right)$$

formulieren, oder alternativ auch mit Hilfe von Matrizen. Dazu definieren wir die Spaltenvektoren  $x$  und  $x'$  und die Transformationsmatrix durch

$$x = \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad x' = \begin{pmatrix} x'^0 \\ x'^1 \\ x'^2 \\ x'^3 \end{pmatrix} \quad \text{sowie} \quad L = \begin{pmatrix} \gamma & -\frac{v}{c}\gamma & 0 & 0 \\ -\frac{v}{c}\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} .$$

Eine weitere äquivalente Formulierung ist die sogenannte **Tensorschreibweise**  $x^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$ , wobei die 16 Matrizenfunktionen sich aus den obigen ergeben. Wir kommen später noch auf diese Notationsweise zurück.

### 5.4.3. Geschwindigkeits-Transformationen mit beliebiger Relativgeschwindigkeit

Als Verallgemeinerung wird nun eine nicht notwendig in  $x$ -Richtung weisende Relativgeschwindigkeit  $\vec{v}$  betrachtet. Der allgemeinste Ansatz hierfür (folgt aus der Definition des Inertialsystems) ist

$$r'_k = L_{kl}r_l + L_{k0}t \quad t' = L_{0l}r_l + L_{00}t .$$

Es ist hier allerdings günstig einen anderen Ansatz zu wählen, wobei man berücksichtigt, dass  $\vec{r}$  (bzw.  $\vec{x}$ ) ein Vektor und  $t$  (bzw.  $x^0$ ) ein Skalar ist, und weiter sowohl  $x'^0$  als auch  $\vec{x}'$  von den ursprünglichen Koordinaten  $x^0$  und  $\vec{x}$  linear bzw. von  $\vec{v}$  beliebig abhängen, also

$$x'^0 = f(\vec{x}, x^0, \vec{v}) \quad \text{und} \quad \vec{x}' = \vec{g}(\vec{x}, x^0, \vec{v}) .$$

Unter diesen Bedingungen lautet der allgemeinste Ansatz dann

$$x'^0 = A(\vec{v})x^0 + B(\vec{v})(\vec{v}\vec{x}) \quad \text{und} \quad \vec{x}' = Z(\vec{v})\vec{x} + D(\vec{v})(\vec{v}\vec{x})\frac{\vec{v}}{v^2} + E(\vec{v})x^0\vec{v} .$$

für beliebige Funktionen  $A(\vec{v})$ ,  $B(\vec{v})$ ,  $D(\vec{v})$ ,  $E(\vec{v})$  und  $Z(\vec{v})$ . Die Isotropie des Raumes impliziert, dass  $A(\vec{v}) = A(v)$ ,  $B(\vec{v}) = B(v)$ , usw. gilt. Weiter bewegt sich  $IS'$  und damit auch der Ursprung  $O'$  nach Voraussetzung relativ zu  $IS$  mit der Geschwindigkeit  $v$ , d.h. die Raumkomponente von  $O'$  (relativ zu  $IS$ ) genügt der Gleichung

$$\vec{x} = \vec{v}t = \vec{v}\frac{x^0}{c} .$$

Andererseits ist dessen Raumkomponente (relativ zu  $IS'$ ) gleich  $\vec{x}' = 0$ . Es gilt allgemein

$$\vec{x}' = Z\vec{x} + D(\vec{v}\vec{x})\frac{\vec{v}}{v^2} + Ex^0\vec{v} ,$$

also folgt für den Ursprung

$$0 = \vec{x}' = Z\vec{v}\frac{x^0}{c} + D\left(\vec{v}\vec{v}\frac{x^0}{c}\right)\frac{\vec{v}}{v^2} + Ex^0\vec{v} = (Z + D + cE)\frac{x^0}{c}\vec{v} ,$$

sodass folglich  $Z + D + cE = 0$  sein muss, da  $\vec{v}$  beliebig ist. Nach dem Relativitätsprinzip sind die Funktionen  $A$ ,  $B$ , usw. universal, d.h. nur von  $v$  abhängig. Man betrachte dann weiter die Transformationen zwischen  $\Sigma$  und  $\Sigma'$  mit der Relativgeschwindigkeit  $\vec{v}$ :

$$\begin{aligned} \Sigma \xrightarrow{\vec{v}} \Sigma' : \quad x'^0 &= A(v)x^0 + B(v)(\vec{v}\vec{x}) & \vec{x}' &= Z(v)\vec{x} + D(v)(\vec{v}\vec{x})\frac{\vec{v}}{v^2} + E(v)x^0\vec{v} \\ \Sigma' \xrightarrow{-\vec{v}} \Sigma : \quad x^0 &= A(v)x'^0 - B(v)(\vec{v}\vec{x}') & \vec{x} &= Z(v)\vec{x}' + D(v)(\vec{v}\vec{x}')\frac{\vec{v}}{v^2} - E(v)x'^0\vec{v} \end{aligned}$$

Setzt man diese wieder ineinander ein, so ergeben sich die Identitäten

$$Z^2 = 1 , \quad A^2 - EBv^2 = 1 , \quad B(A + cE) = 0 , \quad E(A + cE) = 0 , \quad c^2E^2 - v^2EB = 1 .$$

Dies sind effektiv vier Relationen für die fünf Funktionen  $A$ ,  $B$ ,  $D$ ,  $E$  und  $Z$  mit der Lösung

$$Z = 1 \quad B = c\frac{1 - A^2}{Av^2} \quad E = -\frac{A}{c} \quad \implies \quad D = A - Z = A - 1 .$$

Betrachtet man nun wie im  $x$ -Richtungsfall zwei Geschwindigkeitstransformationen

$$\Sigma \xrightarrow{\vec{v}} \Sigma' \quad \text{und} \quad \Sigma' \xrightarrow{\vec{w}} \Sigma'' ,$$

so impliziert dies wieder eine Geschwindigkeitstransformation  $\Sigma \xrightarrow{\vec{v}} \Sigma' \xrightarrow{\vec{w}} \Sigma''$ , welche sich ähnlich wie im Spezialfall der  $x$ -Richtung behandeln lassen, weshalb (auch wegen Umfang der expliziten Rechnung) auf die Details verzichtet werden soll. Man erhält letztlich auch hier wieder

$$\frac{1 - A^2(w)}{w^2A(w)} = \frac{1 - A^2(v)}{v^2A(v)} ,$$

## 5. Raum und Zeit in der klassischen Physik

---

und da die Geschwindigkeiten  $\vec{v}$  und  $\vec{w}$  beliebig sind, folgt dann wieder

$$\frac{1 - A^2(v)}{v^2 A(v)} = -k \cdot \text{konst} \quad \implies \quad A(v) = \frac{1}{\sqrt{1 - kv^2}} .$$

Die Konstante  $k$  lässt sich hier wieder ganz analog wie oben interpretieren, es gilt nämlich auch hier die Lorentz-Invarianz

$$(dx'^0)^2 - k(dx')^2 = (dx^0)^2 - k(d\vec{x})^2 .$$

Folglich ist  $\sqrt{k^{-1}}$  eine universelle Geschwindigkeit. Auch hier gibt es wieder zwei prinzipielle Möglichkeiten für die Wahl von  $k$ . Für  $\sqrt{k^{-1}} = \infty$  erhält man das Galileische Transformationsgesetz

$$\vec{x}' = \vec{x} - \vec{v} \frac{x^0}{c} ,$$

während für endliches  $\sqrt{k^{-1}} = c \iff k = \frac{1}{c^2}$  die Lorentz-Transformation

$$x'^0 = \gamma \left( x^0 - \frac{\vec{v}\vec{x}}{c} \right) \quad \vec{x}' = \vec{x} + \frac{\gamma - 1}{v^2} \vec{v}(\vec{v}\vec{x}) - \gamma \vec{v} \frac{x^0}{c}$$

folgt. Auch lassen sich hier wieder andere Schreibweisen finden, etwa

$$x'^0 = \gamma \left( x^0 - \frac{\vec{v}\vec{x}}{c} \right) \quad \vec{x}' = \gamma \left( \vec{x}^* - \frac{\vec{v}x^0}{c} \right) \quad \text{mit} \quad \vec{x}^* = \frac{1}{\gamma} \left( \vec{x} - \frac{1 - \gamma}{v^2} (\vec{v}\vec{x})\vec{v} \right) .$$

Alternativ lässt sich der räumliche Vektor  $\vec{x}$  auch in einen Anteil parallel zu  $\vec{v}$  und einen orthogonalen Anteil zerlegen. Für diese Anteile gilt  $\vec{x}_{\parallel} = (\vec{x}\hat{v})\hat{v}$  und  $\vec{x}_{\perp} = \vec{x} - \vec{x}_{\parallel}$ , und es folgt damit für die Transformation

$$x'^0 = \gamma \left( x^0 - \frac{\vec{v}\vec{x}_{\parallel}}{c} \right) \quad \vec{x}'_{\parallel} = \gamma \left( \vec{x}_{\parallel} - \frac{\vec{v}x^0}{c} \right) \quad \vec{x}'_{\perp} = \vec{x}_{\perp} .$$

Speziell für den Fall  $\vec{v} = (v, 0, 0)$  findet sich somit wieder die bereits am Anfang hergeleitete Lorentz-Transformation

$$x'^0 = \gamma \left( x^0 - \frac{vx^1}{c} \right) \quad x'^1 = \gamma \left( x^1 - \frac{vx^0}{c} \right) \quad x'^2 = x^2 \quad x'^3 = x^3$$

für einen Boost in  $x$ -Richtung. Schließlich gibt es auch hier eine Matrixschreibweise

$$\begin{pmatrix} x'^0 \\ \vec{x}' \end{pmatrix} = \left( \begin{array}{c|c} \gamma & -\frac{\gamma}{c}\vec{v}^t \\ \hline -\frac{\gamma}{c}\vec{v} & \mathbb{1} + \frac{\gamma-1}{v^2}\vec{v}\vec{v}^t \end{array} \right) \begin{pmatrix} x^0 \\ \vec{x} \end{pmatrix} ,$$

sowie die bereits erwähnte Tensorschreibweise  $x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} x^{\nu}$ .

Bekanntlich sind auch gedrehte und verschobene Bezugssysteme inertial. Eine Drehung lässt sich dabei mit Hilfe einer  $3 \times 3$ -Drehmatrix  $R \in \text{SO}(3)$  schreiben als  $x' = Lx$  mit

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & & & \\ 0 & R & & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

schreiben. Die Menge aller Geschwindigkeits-Transformationen und aller Drehungen bildet eine Gruppe, die sogenannte **orthochrone eigentliche Lorentz-Gruppe** und wird mit  $\mathcal{L}_+^{\uparrow}$  bezeichnet. Nimmt man weiter noch die Gruppe der Translationen hinzu, so ergibt sich eine weitere Gruppe, die sogenannte **Poincaré-Gruppe**, die man mit  $\mathcal{P}_+$  bezeichnet.

# 6. Geometrische Darstellung der Lorentz-Transformation

## 6.1. Eigenschaften der Lorentz-Transformation

In diesem Kapitel wollen wir die zuvor elementar hergeleiteten Lorentz-Transformationen und ihre physikalische Bedeutung näher betrachten. Außerdem soll eine weitere Form von Lorentz-Transformationen, die sogenannten Boosts, hergeleitet werden.

### 6.1.1. Der metrische Tensor

Zuerst ist es sinnvoll, einige der bereits erwähnten Begriffe zu präzisieren. Dazu betrachte zwei Inertialsysteme mit den Koordinaten

$$x = (x^\mu) = \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ct \\ \vec{r} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad x' = (x'^\mu) = \begin{pmatrix} x'^0 \\ x'^1 \\ x'^2 \\ x'^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ct' \\ x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ct' \\ \vec{r}' \end{pmatrix} .$$

Wie wir bereits gesehen haben ist  $c$  eine endliche, maximale Signalausbreitungsgeschwindigkeit, welche in allen Inertialsystemen denselben Wert hat. Es gilt deshalb

$$dt'^2 - k d\vec{x}'^2 = dt^2 - k d\vec{x}^2 \quad \text{mit} \quad k = \frac{1}{c^2} .$$

Man definiert nun weiter das **Viererlängenelement**, welches invariant unter dem Wechsel von einem Inertialsystem in ein anderes durch eine Lorentz-Transformation ist, durch

$$ds^2 = c^2 dt'^2 - d\vec{x}'^2 = c^2 dt^2 - k d\vec{x}^2 .$$

Man führt weiter den **metrischer Tensor**

$$g = (g_{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \implies \quad ds^2 = dx^\mu g_{\mu\nu} dx^\nu = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu$$

ein, um so zu einer eleganten Formulierung des Längenelements zu kommen. Diese letzte Schreibweise des Längenelements ist auch unter dem Namen **Ricci-Kalkül** bekannt. Seit jetzt  $x'$  gegeben durch einen Diffeomorphismus  $f(x)$ , also  $x'^\mu = f^\mu(x)$ , sodass für die Differentiale  $ds^2 = dx^\mu g_{\mu\nu} dx^\nu = dx'^\mu g_{\mu\nu} dx'^\nu$  gilt, dann führt dies in Komponentenschreibweise zu

$$g_{\rho\sigma} dx^\rho dx^\sigma = g_{\mu\nu} dx'^\mu dx'^\nu = g_{\mu\nu} \frac{\partial f^\mu}{\partial x^\rho} dx^\rho \cdot \frac{\partial f^\nu}{\partial x^\sigma} dx^\sigma =: g_{\mu\nu} \Lambda^\mu_\rho \Lambda^\nu_\sigma dx^\rho dx^\sigma$$

sodass man durch Vergleich der Koeffizienten zu der Transformationsbeziehung

$$g_{\rho\sigma} = g_{\mu\nu} \frac{\partial f^\mu}{\partial x^\rho} \frac{\partial f^\nu}{\partial x^\sigma}$$

## 6. Geometrische Darstellung der Lorentz-Transformation

gelangt. Da der metrische Tensor  $g_{\rho\sigma}$  unabhängig von  $x$  ist, liefert die Differentiation der letzten Gleichung nach  $x^\alpha$  mit Hilfe der Produktregel die Identität

$$0 = g_{\mu\nu} \left( \frac{\partial^2 f^\mu}{\partial x^\alpha \partial x^\rho} \frac{\partial f^\nu}{\partial x^\sigma} + \frac{\partial f^\mu}{\partial x^\rho} \frac{\partial^2 f^\nu}{\partial x^\alpha \partial x^\sigma} \right).$$

Zyklische Vertauschung der Indizes  $\rho \rightarrow \sigma \rightarrow \alpha \rightarrow \rho$  ergibt dann zwei weitere analoge Relationen

$$0 = g_{\mu\nu} \left( \frac{\partial^2 f^\mu}{\partial x^\rho \partial x^\sigma} \frac{\partial f^\nu}{\partial x^\alpha} + \frac{\partial f^\mu}{\partial x^\sigma} \frac{\partial^2 f^\nu}{\partial x^\rho \partial x^\alpha} \right) \quad \text{und} \quad 0 = g_{\mu\nu} \left( \frac{\partial^2 f^\mu}{\partial x^\sigma \partial x^\alpha} \frac{\partial f^\nu}{\partial x^\rho} + \frac{\partial f^\mu}{\partial x^\alpha} \frac{\partial^2 f^\nu}{\partial x^\sigma \partial x^\rho} \right)$$

für den metrischen Tensor. Addiert man die ersten beiden Gleichungen und subtrahiert schließlich die dritte, so folgt

$$2g_{\mu\nu} \frac{\partial^2 f^\mu}{\partial x^\alpha \partial x^\rho} \frac{\partial f^\nu}{\partial x^\sigma} = 0.$$

Da nach Voraussetzung  $f$  ein Diffeomorphismus (und damit insbesondere umkehrbar) ist, gilt nach dem Satz der Umkehrfunktion

$$\frac{\partial x^\sigma}{\partial f^\beta} \frac{\partial f^\nu}{\partial x^\sigma} = \frac{\partial f^\nu}{\partial f^\beta} = \delta_\beta^\nu,$$

sodass mit der vorletzten Gleichung

$$0 = g_{\mu\nu} \frac{\partial^2 f^\mu}{\partial x^\alpha \partial x^\rho} \frac{\partial f^\nu}{\partial x^\sigma} \cdot \frac{\partial x^\sigma}{\partial f^\beta} = g_{\mu\beta} \frac{\partial^2 f^\mu}{\partial x^\alpha \partial x^\rho} \quad (6.1)$$

gilt. Weiter ist aufgrund der Definition der Matrix  $g$  gerade  $g = g^{-1}$ . Wir verwenden hierfür in allgemeiner Notation  $g^{-1} = (g^{\mu\nu})$ , sodass

$$g_{\mu\beta} g^{\beta\gamma} = g_{\beta\mu} g^{\beta\gamma} = \delta_\mu^\gamma$$

folgt, und durch Multiplikation von Gleichung (6.1) mit  $g^{\beta\gamma}$  erhält man letztlich die Identität

$$\delta_\mu^\gamma \frac{\partial^2 f^\mu}{\partial x^\alpha \partial x^\rho} = \frac{\partial^2 f^\gamma}{\partial x^\alpha \partial x^\rho} = 0.$$

Zweifache Integration liefert dann  $f^\gamma = \Lambda^\gamma_\beta x^\beta + a^\gamma$  mit Konstanten  $\Lambda^\gamma_\beta$  und  $a^\gamma$ , bzw. kürzer  $f = Lx + a$  mit der Matrix  $L = (\Lambda^\gamma_\beta)$  und  $a = a^\gamma \in \mathbb{R}^4$ .

### 6.1.2. Boost-Transformationen in $x$ -Richtung

Die Transformation eines Vektors  $x$  in  $\mathbb{S}$  zu einem Vektor  $x'$  in  $\mathbb{S}'$  ist also (in Matrixdarstellung) gegeben durch  $x' = Lx + a$ , d.h. es gilt

$$dx' = L dx \quad \implies \quad ds^2 = dx'^t g dx' = dx'^t g dx' = (dx^t L^t) g (L dx) = dx^t (L^t g L) dx,$$

und da dies für beliebige  $dx$  gelten muss, findet sich schließlich  $L^t g L = g$ . Betrachten wir dann eine spezielle Lorentz-Transformation

$$L = \begin{pmatrix} \Lambda^0_0 & \Lambda^0_1 & 0 & 0 \\ \Lambda^1_0 & \Lambda^1_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \implies \quad L^t = \begin{pmatrix} \Lambda^0_0 & \Lambda^1_0 & 0 & 0 \\ \Lambda^0_1 & \Lambda^1_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\implies \quad L^t g L = \begin{pmatrix} (\Lambda^0_0)^2 - (\Lambda^1_0)^2 & \Lambda^0_0 \Lambda^0_1 - \Lambda^1_0 \Lambda^1_1 & 0 & 0 \\ \Lambda^0_1 \Lambda^0_0 - \Lambda^1_0 \Lambda^0_1 & (\Lambda^0_1)^2 - (\Lambda^1_1)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

dann ergeben sich daraus die Gleichungen

$$(\Lambda^0_0)^2 - (\Lambda^1_0)^2 = 1, \quad \Lambda^0_1 \Lambda^0_0 - \Lambda^1_1 \Lambda^1_0 = 0 \quad \text{und} \quad (\Lambda^0_1)^2 - (\Lambda^1_1)^2 = -1,$$

also drei Gleichungen für vier Unbekannte. Es bleibt also letztlich ein freier Parameter übrig, welcher hier mit  $u$  bezeichnet sei und **Rapidität** genannt wird. Die erste der vorigen drei Gleichungen wird offensichtlich durch Ansatz

$$\Lambda^0_0 = \cosh u \quad \text{und} \quad \Lambda^1_0 = -\sinh u$$

erfüllt. Aus der zweiten und dritten Gleichung ergeben sich dann die Bedingungen

$$\begin{aligned} \Lambda^0_1 \cosh u + \Lambda^1_1 \sinh u = 0 &\iff \Lambda^0_1 = -\Lambda^1_1 \frac{\sinh u}{\cosh u} = -\Lambda^1_1 \tanh u \quad \text{und} \\ (\Lambda^1_1)^2 (\tanh^2 u - 1) = -1 &\implies \Lambda^1_1 = \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh^2 u}}. \end{aligned}$$

Unter Verwendung der allgemeinen Beziehung der Hyperbelfunktionen folgt über

$$1 - \tanh^2 u = 1 - \frac{\sinh^2 u}{\cosh^2 u} = \frac{\cosh^2 u - \sinh^2 u}{\cosh^2 u} = \frac{1}{\cosh^2 u}$$

dann  $\Lambda^1_1 = \pm \cosh u$ , sodass sich für die Darstellungsmatrix der Lorentz-Transformation

$$L = \begin{pmatrix} \cosh u & -\sinh u & 0 & 0 \\ \mp \sinh u & \pm \cosh u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ergibt. Wegen der Gleichheit  $L^t g L = g$  folgt mit Hilfe des Determinanten-Multiplikationssatzes

$$\det(L^t g L) = \det(L^t) \det(g) \det(L) = -(\det L)^2 \stackrel{!}{=} \det g = -1,$$

sodass  $(\det L)^2 = 1$  und damit  $\det L = \pm 1$  gilt. Nun betrachte man die dargestellte Transformation  $x' = Lx$  genauer. Wenn  $L$  stetig mit der Identitäts-Transformation verbunden sein soll, so muss  $\det L = 1$  gelten, da  $\det \mathbb{1}_4 = 1$  ist. Da die Determinanten-Abbildung zudem stetig ist, muss dann

$$\det L = \pm \cosh^2 u \mp \sinh^2 u = \pm(\cosh^2 u - \sinh^2 u) \stackrel{!}{=} 1$$

gelten. Für den Spezialfall, dass  $\Lambda^0_0 \geq 1$  ist, folgt unter der Transformation  $x' = Lx$  dann

$$ct' = ct \cosh u - x \sinh u.$$

Betrachtet man einen Beobachter bei  $x = 0$ , so gilt  $ct' = ct \cosh u$ , d.h. die Zeitordnung bleibt hier erhalten. Es bleibt aber noch zu klären, welche Bedeutung der eingeführte Rapiditäts-Parameter  $u$  hat. Dazu betrachte man den Nullpunkt des Inertialsystems  $\text{IS}'$ , also die Koordinaten  $x' = 0$ ,  $y' = 0$  und  $z' = 0$ . Weiter seien die Koordinaten relativ zu  $\text{IS}$  durch  $x$ ,  $y$  und  $z$  gegeben. Nach der obigen Transformation gilt dann gerade

$$x'^0 = x^0 \cosh u - x^1 \sinh u \quad x'^1 = -x^0 \sinh u + x^1 \cosh u \quad x'^2 = x^2 \quad x'^3 = x^3,$$

## 6. Geometrische Darstellung der Lorentz-Transformation

sodass  $0 = -x^0 \sinh u + x^1 \cosh u$  und  $x^1 = \frac{\sinh u}{\cosh u} x^0 = ct \tanh u = \frac{v}{c} ct = vt$  folgt, und somit auch über  $v = c \tanh u$  schließlich  $\tanh u = \frac{v}{c} = \beta$ , also gilt

$$\begin{aligned} \cosh u &= \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh^2 u}} = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \gamma(v) = \gamma \quad \text{und} \\ \sinh u &= \frac{\tanh u}{\sqrt{1 - \tanh^2 u}} = \frac{\beta}{\sqrt{1 - \beta^2}} = \frac{\frac{v}{c}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \beta\gamma(v). \end{aligned}$$

Die Transformationsmatrix  $L$  zu  $x' = Lx$  lässt sich damit deutlich kürzer als

$$L = \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

schreiben, und damit stellt  $L$  gerade

$$\begin{aligned} t' &= x'^0 = \gamma(x^0 - \beta x^1) \\ x' &= x'^1 = \gamma(x^1 - \beta x^0) \quad y' = x'^2 = x^2 = y \quad z' = x'^3 = x^3 = z \end{aligned}$$

dar. Zusammenfassend lässt sich also sagen, dass Lorentz-Transformationen gerade diejenigen Transformationen sind, die das Linienelement  $ds^2 = dt^2 - d\vec{x}^2$  invariant lassen. Weiter lassen sie auch  $x^2 = x^\mu g_{\mu\nu} x^\nu = t^2 - \vec{x}^2$  invariant, also die Länge des Vierervektors  $x^\mu$ , denn es gilt

$$x'^2 = x'^\mu g_{\mu\nu} x'^\nu = x'^t g x' = x'^t L^t g L x = x'^t g x = x^\mu g_{\mu\nu} x^\nu = x^2.$$

Die Rapidität ist in der speziellen Relativitätstheorie das Äquivalent zur Geschwindigkeit in der Newtonschen Mechanik. Die Rapidität hat den Vorteil, dass zwei Rapiditäten addiert werden können, was im relativistischen Fall für zwei klassische Geschwindigkeiten nicht möglich ist - darauf kommen wir später in 6.3.6 noch zurück.

**Bemerkung:** Man betrachte noch einmal den Fall  $v \ll c$  für die behandelte Lorentz-Transformation, dann gilt durch Taylor-Entwicklung gemäß

$$\gamma(v) = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \approx 1 - \frac{v^2}{2c^2} + \mathcal{O}\left(\left(\frac{v}{c}\right)^4\right)$$

für die Transformation  $x' = \gamma(x - vt) \approx x - vt$  und  $t' = \gamma\left(t - \frac{v}{c^2}x\right) \approx t$ , für kleine Geschwindigkeiten erhält man also wieder (nahezu) die Galilei-Transformation.

## 6.2. Geometrische Veranschaulichung der Koordinatenbeziehungen

Zur Vereinfachung sei von nun an die Lichtgeschwindigkeits-Konstante  $c = 1$  konstant gesetzt und außerdem lediglich die  $x$ -Komponente betrachtet, also ein eindimensionaler Raum. Man gehe dann von zwei Inertialsystemen IS und IS' aus, und versuche zunächst die  $x'$ -Achse und die  $t'$ -Achse im Koordinatensystem von IS zu bestimmen. Für die  $t'$ -Achse in IS' gilt  $x' = 0$ , sodass sich bei einer Relativgeschwindigkeit  $v$  das Transformationsverhalten

$$x' = \gamma(x - vt) = 0 \iff x = vt$$

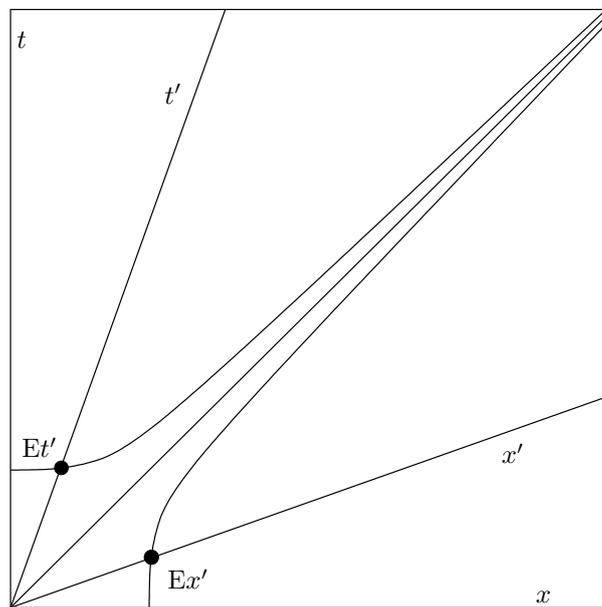
ergibt. Analog hat man für die  $x'$ -Achse in  $IS'$  stets  $t' = 0$ , und damit

$$t' = \gamma \left( t - \frac{v}{c^2} x \right) = 0 \iff x = \frac{t}{v},$$

also sind die gesuchte Achsen gefunden. Das nächste Problem ist jetzt, diese korrekt zu skalieren. Dazu beachte man, dass der Einheitspunkt auf der  $t'$ -Achse ( $Et'$ ) in  $IS'$  die Koordinaten

$$x'_{Et'} = 0 \quad t'_{Et'} = 1 \quad \implies \quad t'^2_{Et'} - x'^2_{Et'} = 1 = t^2_{Et'} - x^2_{Et'}.$$

besitzt. Die letzte Gleichung definiert dabei eine Hyperbel in der  $(x, t)$ -Ebene, der Schnittpunkt der Hyperbel mit der  $t'$ -Achse ist der Einheitspunkt  $Et'$ . Völlig analog findet sich eine zweite Hyperbel für die Skalierung der  $x'$ -Achse mit dem Einheitspunkt  $Ex'$ . Die Ergebnisse lassen sich in einem Diagramm zusammenfügen:



**Abbildung 6.1.:** Koordinateneichungs-Diagramm der speziellen Relativitätstheorie

Ein Ergebnis  $A$  lässt sich mit Hilfe dieses Diagramms bezüglich beider Koordinatensysteme angeben, in  $IS$  sind dies gerade die kartesischen Koordinaten, während man in  $IS'$  die Koordinaten parallel zu den gestrichelten Achsen angibt.

## 6.3. Physikalische Konsequenzen der Lorentz-Transformation

Es sei zunächst bemerkt, dass  $v \leq c$  gelten muss, damit die Lorentz-Transformationen nicht zu imaginären Zahlenwerten führen. Wir diskutieren nun weitere Folgerungen.

### 6.3.1. Relativität der Gleichzeitigkeit

Seien  $(t_A, x_A)$  und  $(t_B, x_B)$  bzw.  $(t'_A, x'_A)$  und  $(t'_B, x'_B)$  die Koordinaten zweier Ereignisse  $A$  und  $B$  mit Koordinaten in den Inertialsystemen  $IS$  und  $IS'$ . Der zeitliche Abstand zwischen diesen Ereignissen ist dann  $\Delta t = t_B - t_A$  bzw.  $\Delta t' = t'_B - t'_A$ . Mit der Lorentz-Transformation

$$t = \gamma(v)(t' - vx') \quad x = \gamma(v)(x' - vt')$$

zwischen beiden Inertialsystemen folgt dann aber auch

$$\Delta t = \gamma(v) [(t'_B - t'_A) - v(x'_B - x'_A)] = \gamma(v)(\Delta t' - v\Delta x') \stackrel{!}{=} t_B - t_A .$$

für das Zeitintervall. D.h. falls zwei Ereignisse in  $\text{IS}'$  gleichzeitig sind, also  $\Delta t' = 0$  gilt, so ist  $\Delta t = \gamma(v)(-v\Delta x') \neq 0$  und analog für Ereignisse die in  $\text{IS}$  gleichzeitig sind  $\Delta t' = \gamma(v)v\Delta x \neq 0$ .

Man beachte, dass falls zwei Ereignisse in  $\text{IS}$  nicht gleichzeitig sind, also  $\Delta t \neq 0$  gilt, so gibt es immer ein Bezugssystem, relativ zu denen sie gleichzeitig sind. Dies gilt allerdings nur dann, wenn  $O$  außerhalb des **Lichtkegels**  $t^2 - x^2 = 0$  liegt. Alle Ereignisse außerhalb des Lichtkegels lassen sich mit dem Ereignis  $O$  gleichzeitig machen, d.h. es existiert ein Inertialsystem  $\text{IS}'$ , sodass relativ zu  $\text{IS}'$  das betrachtete Ereignis gleichzeitig mit  $O$  stattfindet.

### 6.3.2. Kausalstruktur der Raumzeit

Es ist kein Signal möglich, dass sich mit höherer Geschwindigkeit als der Lichtgeschwindigkeit  $c$  fortpflanzt, denn es lässt sich zeigen, dass sonst eine Kommunikation mit der Vergangenheit möglich wäre. Ein Ereignis außerhalb des Lichtkegels von  $O$  kann die Geschehnisse bei  $O$  somit nicht kausal beeinflussen und umgekehrt auch nicht von ihnen beeinflusst werden.

Der **Vorwärtskegel**, also der zukunftsgerichtete Kegel, beinhaltet alle jenen Ereignisse, die kausal von  $O$  beeinflusst werden können, der **Rückwärtskegel** umgekehrt alle die Ereignisse, die  $O$  beeinflussen können. Die Weltlinie eines Teilchens ist so, dass sie in jedem Punkt innerhalb des Lichtkegels in diesem Punkt liegt.

### 6.3.3. Längenkontraktion

Ein Maßstab ruhe im Inertialsystem  $\text{IS}'$  in der  $x$ -Richtung, der Anfangspunkt sei mit  $A$  und der Endpunkt mit  $E$  bezeichnet. Die Ortskoordinaten von  $A$  bzw.  $E$  in  $\text{IS}'$  seien mit  $x'_A$  und  $x'_E$  benannt. Folglich ist die Länge des Stabes gemessen im Inertialsystem  $\text{IS}'$  gegeben durch

$$x'_E - x'_A = l' .$$

Durch eine entsprechende Lorentz-Transformationen betrachten wir dann die Länge des Stabes relativ zu  $\text{IS}$ . Es gilt dann für die Koordinaten von Anfangs- und Endpunkt

$$x'_A = \gamma(v)(x_A - vt_A) \quad x'_E = \gamma(v)(x_E - vt_E) ,$$

sodass für die Länge des Stabes

$$\begin{aligned} x'_E - x'_A = l' &= \gamma(v) [(x_E - x_A) - \overbrace{v(t_E - t_A)}^0] = \gamma(v)(x_E - x_A) = \gamma(v)l \\ \iff l &= \frac{l'}{\gamma(v)} = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} l' < l' \end{aligned}$$

folgt. Folglich erscheint der Stab vom relativ zu  $\text{IS}'$  mit  $v$  bewegten Inertialsystem  $\text{IS}$  kleiner als von  $\text{IS}'$  aus betrachtet.

**Bemerkung:** Die optische Wahrnehmung der Längenkontraktion ist deutlich anders, als es diese lineare Kontraktion in Bewegungsrichtung suggerieren würde, da bei einem realen Objekt aufgrund der endlichen Ausdehnung die Lichtsignale alle mit unterschiedlichen Winkel und Laufwegen in ein nahezu punktförmiges Objekt (Auge, Kamera, etc.) einfallen würden. Somit würden bewegte Körper optisch gedreht bzw. deformiert erscheinen.

### 6.3.4. Zeitdilatation

Betrachten wir nun eine in  $IS'$  ruhende Uhr und dazu die beiden Ereignisse, dass der Zeiger der Uhr auf 0 bzw. 1 steht, wobei diese Ereignisse die Koordinaten  $(t_0, x_0)$  bzw.  $(t_1, x_1)$  in  $IS$  und  $(t'_0, x'_0 = 0)$  bzw.  $(t'_1, x'_1 = 0)$  in  $IS'$  haben. Es gilt

$$\begin{aligned} t'_0 &= \gamma(v)(t_0 - vx_0) & t'_1 &= \gamma(v)(t_1 - vx_1) \\ x'_0 &= \gamma(v)(x_0 - vt_0) = 0 & x'_1 &= \gamma(v)(x_1 - vt_1) = 0 \end{aligned} ,$$

folglich erhält man also  $x_0 = vt_0$  und  $x_1 = vt_1$ , und damit weiter

$$\begin{aligned} t'_1 - t'_0 &= \gamma(v)[(t_1 - t_0) - v(x_1 - x_0)] = \gamma(v)[(t_1 - t_0) - v^2(t_1 - t_0)] \\ &= \gamma(v)(1 - v^2)(t_1 - t_0) = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2}}(1 - v^2)\Delta t = \sqrt{1 - v^2}\Delta t . \end{aligned}$$

Somit erhalten wir  $\Delta t' = \sqrt{1 - v^2}\Delta t < \Delta t$  für die Zeitintervalle. Somit geht von  $IS$  aus betrachtet die Uhr in  $IS'$  langsamer.

### 6.3.5. Eigenzeit

Mit den vorigen beiden Unterpunkten haben wir unter anderem die beiden wichtigsten Fundamente der Newtonschen Theorie zerstört: Die Existenz des absoluten Raums und der absoluten Zeit. Es stellt sich nun die Frage, ob es eine besondere bzw. sinnvolle Zeitskala gibt.

Man betrachte dazu ein Inertialsystem  $IS$ , es bewege sich ein Massenpunkt relativ zu diesem mit der Geschwindigkeit  $v(t)$ . Zu jedem beliebigen Zeitpunkt  $t$  existiert wieder ein Inertialsystem  $IS'$ , relativ zu dem der Massenpunkt (im Augenblick  $t$ ) ruht, man spricht von einem **instantanen** oder **lokalen Inertialsystem**. Der Massenpunkt sei dabei fest verknüpft mit einer mitbewegten Uhr.

Nun verfolge man zwei Ereignisse an dieser Uhr, ihr (infinitesimales) Zeitintervall sei  $dt'$ . Gemessen mit den Uhren in  $IS$  sei das Zeitintervall zwischen denselben Ereignissen gleich  $dt$ . Während des Zeitintervalls bewegt sich die Uhr nun um das Wegstück  $d\vec{x}$  relativ zu  $IS$ . In  $IS'$  dagegen ist  $d\vec{x}' = 0$ , da die Uhr im lokalen Inertialsystem  $IS'$  ruht. Da  $IS$  und  $IS'$  beide Inertialsysteme sind, gilt unter einer Lorentz-Transformation insbesondere

$$\begin{aligned} ds^2 &= dt^2 - d\vec{x}^2 = dt^2 \left( 1 - \left( \frac{d\vec{x}}{dt} \right)^2 \right) = dt'^2 - d\vec{x}'^2 = dt'^2 \\ \iff dt' &= \sqrt{ds^2} = \sqrt{1 - \left( \frac{d\vec{x}}{dt} \right)^2} dt = \sqrt{1 - v(t)^2} dt . \end{aligned}$$

Während die Uhr in  $IS'$  das Zeitintervall  $dt'$  anzeigt, gibt die Uhr in  $IS$  stattdessen  $dt$  an, es gilt dabei nach dem vorigen Punkt der Zeitdilatation

$$dt' = \sqrt{1 - v(t)^2} dt = \sqrt{ds^2} < dt$$

bzw. bei genauerer Betrachtung

$$d\tau := dt' = \frac{1}{c} \sqrt{ds^2} = \sqrt{1 - \frac{v(t)^2}{c^2}} = \frac{1}{\gamma(v)} dt .$$

Wenn die Uhren in IS also das Zeitintervall  $t_2 - t_1$  anzeigen, so gibt die mitbewegte Uhr das **Eigenzeitintervall**

$$t'_2 - t'_1 = \int_{t_1}^{t_2} \sqrt{1 - v(t)^2} dt = \int_{t_1}^{t_2} d\tau = \tau_2 - \tau_1 = \frac{1}{c} \int_{t_1}^{t_2} \sqrt{ds^2}$$

an. Der so definierte Zeitablauf wird entsprechend **Eigenzeit** genannt. Das invariante Linienelement  $ds^2$  lässt sich also physikalisch durch  $\sqrt{ds^2}$  als Element der Eigenzeit interpretieren. Die Weltlinie eines Teilchens kann dabei mittels eines beliebigen Parameters  $\lambda$  über  $\lambda \mapsto x^\mu(\lambda)$  parametrisiert werden.

### 6.3.6. Geschwindigkeits-Additionstheorem

Ein Massepunkt bewege sich mit der Geschwindigkeit  $\vec{w}'$  relativ zum Inertialsystem IS'. Dieses wiederum bewege sich mit konstanter Geschwindigkeit  $\vec{v}$  relativ zu IS - man beachte, dass wir nun wieder in dreidimensionalen Raumkoordinaten rechnen. Es stellt sich dann natürlich die Frage, mit welcher Geschwindigkeit sich der Massepunkt relativ zu IS bewegt. Dazu gehen wir davon aus, dass die Bahnereignisse des Massepunkts relativ zu IS durch die Koordinaten  $(t, \vec{x})$  parametrisiert seien und relativ zu IS' die Koordinaten  $(t', \vec{x}')$  haben. Es gilt dann wieder die Transformation

$$t' = \gamma(v)(t - \vec{v}\vec{x}) \quad \vec{x}' = \vec{x} + \frac{\gamma(v) - 1}{v^2}(\vec{v}\vec{x})\vec{v} - \gamma(v)t\vec{v},$$

zwischen den Koordinaten von IS und IS'. Die Umkehrung erhält man mit  $\vec{v} \rightarrow -\vec{v}$ , also

$$t = \gamma(v)(t' + \vec{v}\vec{x}') \quad \vec{x} = \vec{x}' + \frac{\gamma(v) - 1}{v^2}(\vec{v}\vec{x}')\vec{v} + \gamma(v)t'\vec{v}.$$

Nun gilt für  $\vec{x}'$  und  $t'$  die Beziehung  $\vec{x}' = \vec{w}'t'$ , da sich der Massepunkt nach Voraussetzung relativ zu IS' mit  $\vec{w}'$  bewegt. Mit der zweiten der oberen beiden Transformationen folgt dann

$$\vec{x} = \vec{w}'t' + \frac{\gamma(v) - 1}{v^2}(\vec{v}\vec{w}')t'\vec{v} + \gamma(v)t'\vec{v} = \left( \vec{w}' + \frac{\gamma(v) - 1}{v^2}(\vec{v}\vec{w}')\vec{v} + \gamma(v)\vec{v} \right) t'$$

für die Koordinaten bezüglich IS. Die Strecke geteilt durch die Zeit liefert dann

$$\vec{u} := \frac{\vec{x}}{t} = \left( \vec{w}' + \frac{\gamma(v) - 1}{v^2}(\vec{v}\vec{w}')\vec{v} + \gamma(v)\vec{v} \right) \frac{t'}{t} \quad \text{mit} \quad \frac{t'}{t} = \frac{1}{\gamma(v)(1 + \vec{v}\vec{w}')} \\ \iff \vec{u} = \frac{\frac{\vec{w}'}{\gamma} + \frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{\vec{v}\vec{w}'}{v^2} \vec{v} + \vec{v}}{1 + \vec{v}\vec{w}'},$$

als Geschwindigkeit des Massepunkts relativ zu IS - die Addition zweier Geschwindigkeiten ist also in der Relativitätstheorie im allgemeinsten Fall recht kompliziert. Man beachte, dass diese Situation nicht symmetrisch unter der Vertauschung von  $\vec{v}$  und  $\vec{w}'$  ist. Abschließend betrachten wir noch zwei Spezialfälle des obigen Additionstheorems:

- $\vec{v} \parallel \vec{w}'$ : Sind die beiden zu addierenden Geschwindigkeiten parallel zueinander, so gilt

$$\frac{1}{v^2}(\vec{v}\vec{w}')\vec{v} = \frac{\vec{v}}{v}|\vec{w}'| = \hat{w}'|\vec{w}'| = \vec{w}' \quad \implies \quad \vec{u} = \frac{\vec{w}' + \vec{v}}{1 + \frac{\vec{v}\vec{w}'}{c^2}}.$$

Man beachte dabei, dass  $\vec{u} \rightarrow \vec{v} + \vec{w}'$  für  $\vec{v}, \vec{w}' \ll c$  geht, für kleine Geschwindigkeiten erhalten wir also wieder das Newtonsche Additionsgesetz für Geschwindigkeiten. Ist umgekehrt  $|\vec{w}'| = c$ , so folgt  $u = c$ , völlig unabhängig von  $\vec{v}$ . Ein mit Lichtgeschwindigkeit bewegtes Objekt (Lichtteilchen) hat also immer die Geschwindigkeit  $c$ .

- $\vec{v} \perp \vec{w}'$ : Wegen  $\vec{v}\vec{w}' = 0$  vereinfacht sich das Additionstheorem drastisch zu

$$\vec{u} = \vec{v} + \frac{1}{\gamma} \vec{w}' ,$$

d.h. die Bewegung senkrecht zur Bewegungsrichtung des Massepunkts wirkt verlangsamt.

# 7. Lorentz-Vektoren und -Tensoren

## 7.1. Der Minkowski-Raum

Als nächstes soll nun ein einheitlicher Formalismus für die Berechnungen der Relativitätstheorie eingeführt werden, den wir in Ansätzen schon kennengelernt haben. Zunächst einmal ist aber das zugrundeliegende mathematische Objekt, das die Raumzeit beschreibt, genauer zu verstehen.

### 7.1.1. Lorentz-Skalarprodukt und Arten von Vektoren

Die allgemeinsten Transformationen zwischen Inertialsystemen vermitteln die bereits erwähnten **Poincaré-Transformationen**, welche als affine Lorentz-Transformationen durch

$$x^\mu \rightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu + a^\mu \quad \text{mit} \quad g_{\mu\nu} \Lambda^\mu{}_\rho \Lambda^\nu{}_\sigma = g_{\rho\sigma}$$

gegeben sind. Dies sind genau jene Transformationen, die das Linienelement  $ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu$  invariant lassen. Die Menge aller dieser Transformationen bildet die **Poincaré-Gruppe**  $\mathcal{P}$  bzw. bei Verzicht auf Spiegelungen  $\mathcal{P}_+^\uparrow$ . Die Untergruppe der homogenen Transformationen

$$x^\mu \rightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$$

bildet die **Lorentz-Gruppe**  $\mathcal{L}$ . Diese ist weiter isomorph zur Gruppe aller  $4 \times 4$ -Matrizen  $L$  mit der Invarianzeigenschaft  $L^t g L = g$ . Die Raum-Zeit-Koordinaten eines Ereignisses bzgl. eines Inertialsystems seien  $x^\mu$ , sie bilden ein vierkomponentigen Spaltenvektor, Quadrupel genannt. Diese Quadrupel bilden wiederum einen vierdimensionalen Vektorraum. Gleiches gilt für Quadrupel  $x'^\mu$ , welche die Koordinaten desselben Ereignisses bezüglich  $\text{IS}'$  beinhalten. Da die Transformation zwischen  $x^\mu$  und  $x'^\mu$  eine affine Transformation ist, besitzt die Menge der Ereignisse  $x$  die Struktur eines affinen Raums  $X^4$ , es bilden dann die Abstands-Vektoren

$$x_1^\mu - x_2^\mu$$

einen vierdimensionalen Vektorraum  $V^4$ . Solche Verbindungsvektoren transformieren unter einer Poincaré-Transformation dann wie

$$\Delta x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu \Delta x^\nu .$$

In diesem Vektorraum der Verbindungsvektoren ist eine passende metrische Struktur durch

$$(\Delta x)^2 = g_{\mu\nu} \Delta x^\mu \Delta x^\nu$$

gegeben, also durch das invariante Abstandsquadrat von Ereignissen. Die Raumzeit versehen mit dieser affinen und metrischen Struktur heißt **Minkowski-Raum**. Es gibt nun eine Reihe von physikalischen Objekten  $u$ , die bezüglich jedes Inertialsystems durch vier Komponenten  $u^\mu$ , sogenannte **kontravariante** Komponenten, festgelegt sind, wobei diese beim Übergang von  $\text{IS}$  nach  $\text{IS}'$  gemäß

$$u'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu u^\nu ,$$

also genau wie  $\Delta x^\mu$ , transformieren. Solche Objekte heißen **Vierervektoren** bzw. **Lorentz-Vektoren**. Beispiele hierfür sind Verbindungsvektoren  $\Delta x$ , die Vierergeschwindigkeit  $u^\mu$ , die Viererbeschleunigung  $b^\mu$ ,  $K^\mu$ , der Viererimpuls  $p^\mu$ , etc. Die  $u^\mu$  bilden auch einen vierdimensionalen Vektorraum, in dem ein invariantes Skalarprodukt durch

$$(u, v) \mapsto uv = g_{\mu\nu}u^\mu v^\nu$$

definiert ist. Das zugehörige Längenquadrat eines solchen Vierervektors ist dann folglich

$$u^2 = g_{\mu\nu}u^\mu u^\nu = (u^0)^2 - (u^1)^2 - (u^2)^2 - (u^3)^2 = (u^0)^2 - \vec{u}^2.$$

Man beachte, dass dieses Längenquadrat sowohl positive wie auch negative Werte annehmen kann, da das Skalarprodukt nicht positiv definit ist. Allgemein heißt ein vierdimensionaler Vektorraum mit einem derartigen Skalarprodukt „Vektorraum mit Minkowski-Geometrie“. Ein Vektor  $u \in V^4$  heißt abhängig vom Längenquadrat

- **zeitartig**, wenn  $u^2 > 0$  ist, wobei dann noch zwischen **zukunftsorientierten** Vektoren für  $u^0 > 0$  und **vergangenheitsorientierten** für  $u^0 < 0$  unterschieden wird.
- **lichtartig**, wenn  $u^2 = 0$  ist.
- **raumartig**, wenn  $u^2 < 0$  ist.

Für diese Benennung gibt es einen physikalischen Grund, der aus der Interpretation des bereits bekannten Lichtkegels folgt. Betrachte dazu etwa  $u^\mu = x_1^\mu - x_2^\mu$  und  $x_1^\mu = (0, 0, 0, 0)$  als Ursprung.

### 7.1.2. Ko- und kontravariante Vierervektoren

Jeder Vierervektor  $u$  kann alternativ auch bestimmt werden durch seine **kovarianten** Komponenten, die durch

$$u_\mu = g_{\mu\nu}u^\nu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^0 \\ u^1 \\ u^2 \\ u^3 \end{pmatrix} = (u^0, -u^1, -u^2, -u^3) = (u_0, u_1, u_2, u_3)$$

bestimmt sind, es gilt also  $u_0 = u^0$  und  $u_i = -u^i$  für  $i = 1, 2, 3$ . Mit Hilfe dieser Komponenten kann man die absolute Länge als

$$u^2 = g_{\mu\nu}u^\mu u^\nu = u_\nu u^\nu$$

schreiben. Umgekehrt hat man  $u^\mu = g^{\mu\nu}u_\nu$  mit  $g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu}$ , wobei an  $g^{\mu\rho}g_{\rho\nu} = \delta_\nu^\mu$  erinnert sei. Der metrische Tensor  $g^{\mu\nu}$  stellt also das Bindeglied zwischen ko- und kontravarianten Vektoren dar.<sup>1</sup>

Wie transformieren die kovarianten Komponenten nun unter Poincaré-Transformationen? Dazu beachte man zunächst, dass

$$u'^\mu = \Lambda^\mu_\nu u^\nu \quad \text{und} \quad u'_\mu = g_{\mu\nu}u^\nu = g_{\mu\nu}\Lambda^\nu_\rho u^\rho = g_{\mu\nu}\Lambda^\nu_\rho g^{\rho\sigma}u_\sigma$$

gelten. Sei  $\Lambda_\mu^\sigma = g_{\mu\nu}\Lambda^\nu_\rho g^{\rho\sigma}$ , so folgt analog zum Transformationsgesetz der kontravarianten Vektoren für die kovarianten  $u'_\mu = \Lambda_\mu^\sigma u_\sigma$ , also haben wir

$$u^\mu \rightarrow u'^\mu = \Lambda^\mu_\nu u^\nu \quad \text{und} \quad u_\mu \rightarrow u'_\mu = \Lambda_\mu^\nu u_\nu$$

<sup>1</sup>Um sich die Hoch- und Tiefstellung der Indizes zu merken, sei auf den englischen Spruch „co is below“ verwiesen.

mit  $\Lambda_\mu^\nu = g_{\mu\rho}\Lambda^\rho_\sigma g^{\sigma\nu}$ . Dabei erfüllen die  $\Lambda_\mu^\nu$  bestimmte Relationen, so folgt z.B. aus der Invarianz des Skalarprodukts  $u'^\mu u'_\mu = u^\sigma u_\sigma$ , die bereits verwendete Eigenschaft

$$u'^\mu u'_\mu = \Lambda^\mu_\rho u^\rho \Lambda_\mu^\sigma u_\sigma = \Lambda^\mu_\rho \Lambda_\mu^\sigma u^\rho u_\sigma = u^\rho \delta_\rho^\sigma u_\sigma = \delta_\rho^\sigma u^\rho u_\sigma \implies \Lambda^\mu_\rho \Lambda_\mu^\sigma = \delta_\rho^\sigma .$$

Völlig analog zeigt man dann weiter, dass aus  $u'_\mu u'^\mu = u_\sigma u^\sigma$  weiter  $\Lambda_\rho^\mu \Lambda^\sigma_\mu = \delta_\rho^\sigma$  folgt. Man sagt auch, dass  $\Lambda_\mu^\sigma$  zu  $\Lambda^\mu_\sigma$  **kontragradient** ist. Weiter ergibt sich daraus die Umkehrtransformation

$$u^\sigma = u'^\mu \Lambda_\mu^\sigma ,$$

denn aus  $u'^\mu = \Lambda^\mu_\rho u^\rho$  ergibt sich  $u'^\mu \Lambda_\mu^\rho = \overbrace{\Lambda^\mu_\rho \Lambda_\mu^\sigma}^{\delta_\rho^\sigma} u^\rho = u^\sigma$  nach den obigen Identitäten.

### 7.1.3. Ableitungen von Funktionen der Vierergrößen

Betrachten wir nun eine skalare Funktion  $\varphi(x)$  in Abhängigkeit des Vierervektors  $x$  und berechnen wir dann die partielle Ableitung nach kontravarianten Komponenten

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} \varphi(x) .$$

Unter Poincaré-Transformation verhalten sich diese vier Ableitungsgrößen gemäß

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} \varphi(x) \rightarrow \frac{\partial}{\partial x'^\mu} \varphi(x'(x)) = \frac{\partial x^\sigma}{\partial x'^\mu} \frac{\partial}{\partial x^\sigma} \varphi(x) ,$$

nun ist aber  $x^\sigma = \Lambda_\mu^\sigma x'^\mu + a^\sigma$ , also gilt weiter

$$\frac{\partial x^\sigma}{\partial x'^\mu} = \Lambda_\mu^\sigma \implies \frac{\partial}{\partial x^\mu} \varphi(x) \rightarrow \frac{\partial}{\partial x'^\mu} \varphi(x') = \Lambda_\mu^\sigma \frac{\partial}{\partial x^\sigma} \varphi(x) .$$

Folglich transformieren die betrachteten Ableitungen wie die kanonischen Indizes eines kovarianten Vierervektors, man schreibt deshalb auch

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} \varphi =: \partial_\mu \varphi ,$$

wobei man die Stellung der Indizes beachte. Ähnlich zeigt man auch, dass die Ableitung nach einem kovarianten Vektor wie ein kontravarianter Vektor transformiert.

## 7.2. Lorentz-Tensoren

Kommen wir nun zu einer Verallgemeinerung der Vierervektoren. Ein Objekt  $T$ , welches in jedem Inertialsystem durch ein System von Komponenten

$$T^{\mu'_1 \dots \mu'_a \nu'_1 \dots \nu'_b}$$

festgelegt ist, so dass zwischen seinen Komponenten in verschiedenen Inertialsystemen IS und IS' die Relation

$$T^{\mu'_1 \dots \mu'_a \nu'_1 \dots \nu'_b} = \Lambda^{\mu_1}_{\rho_1} \dots \Lambda^{\mu_a}_{\rho_a} \Lambda_{\nu_1}^{\sigma_1} \dots \Lambda_{\nu_b}^{\sigma_b} T^{\rho_1 \dots \rho_a \sigma_1 \dots \sigma_b}$$

besteht, heißt **Lorentz-Tensor** vom Typ  $(a, b)$ . Die verwendeten Vierervektoren ordnen sich, wie man direkt überprüft, unter diesem allgemeineren Oberbegriff unter:

- *Kontravariante Vektoren:*  $u^\mu$  ist ein Tensor vom Typ  $(1, 0)$ , denn  $u'^\mu = \Lambda^\mu_\rho u^\rho$ .
- *Kovariante Vektoren:*  $u_\mu$  ist ein Tensor vom Typ  $(0, 1)$ , denn  $u'_\mu = \Lambda_\mu^\rho u_\rho$ .
- Das Produkt  $u^\mu u^\nu$  ist ein Tensor vom Typ  $(2, 0)$ , denn  $u'^\mu u'^\nu = \Lambda^\mu_\rho \Lambda^\nu_\sigma u^\rho u^\sigma$ .

**Bemerkung:** Bei der obigen Definition des Tensor-Transformationsverhaltens befinden sich die Striche „'“ an den einzelnen Indizes, also  $T^{\mu'\nu'}$ , während wir sie bei Vektoren direkt an den Vektor platzierten, etwa  $u'^\mu$ . Prinzipiell ist die erste Notation die richtige, denn durch

$$T^{\mu'\nu} = \Lambda^{\mu'}_\mu T^{\mu\nu}$$

lässt sich durchaus ein „teiltransformierter“ Tensor formulieren. Praktisch hat diese Notation allerdings keine Relevanz, da ein einzelnes Objekt, dessen Komponenten aus zwei verschiedenen Inertialsystemen stammen völlig unphysikalisch ist. Für die Vierervektoren, die nur einen Index haben, verwenden wir daher weiter die Notation  $x'^\mu$ , auch wenn  $x'^\mu$  präziser wäre.

Durch geeignete Kombination weiterer Vierervektoren lassen sich so Tensoren beliebiger Stufe konstruieren. Durch Multiplikation mit dem metrischen Tensor  $g^{\mu\nu}$  lassen sich die Indizes eines Tensor herauf- oder hinuntertransportieren, etwa wird aus einem  $(2, 0)$ -Tensor durch

$$T^{\mu_1\mu_2} = u^{\mu_1} v^{\mu_2} \quad \implies \quad g_{\nu_1\mu_1} T^{\mu_1\mu_2} = T_{\nu_1}{}^{\mu_2}$$

ein  $(1, 1)$ -Tensor. Damit die Naturgesetze mit dem Relativitätsprinzip verträglich sind, müssen sie so formuliert werden können, dass sie Lorentz-kovariant sind, d.h. unter Lorentz-Transformation forminvariant bleiben. Diese Forminvarianz ist sicherlich dann gegeben, wenn es sich um Gleichungen zwischen Lorentz-Tensoren der gleichen Stufe handelt. Gilt  $T^{\mu\nu} = R^{\mu\nu}$  in IS, so ist wegen

$$T^{\mu'\nu'} = \Lambda^\mu_\rho \Lambda^\nu_\sigma T^{\rho\sigma} = \Lambda^\mu_\rho \Lambda^\nu_\sigma R^{\rho\sigma} = R^{\mu'\nu'}$$

auch  $T^{\mu'\nu'} = R^{\mu'\nu'}$  in IS'. Man macht nun die Beobachtung, dass die Gesetze der Mechanik, insbesondere das zweite Newtonsche Gesetz, Galilei-invariant sind. Die Frage ist: Sind sie auch Lorentz-invariant?

# 8. Relativistische Punktmechanik

## 8.1. Lorentz-invariante Bewegungsgleichungen

Aus der klassischen Mechanik kennt man das zweite Newtonsche Gesetz, welches besagt, dass innerhalb eines Inertialsystems die Beschleunigung, die ein Körper erfährt, gerade durch

$$m \frac{d^2}{dt^2} \vec{r} = \vec{F}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, \dots)$$

mit der Kraft  $\vec{F}$ , die auf ihn wirkt, zusammenhängt, wobei die Ableitung in  $m \frac{d}{dt} (\frac{d}{dt} \vec{r}) = m \frac{d}{dt} \vec{v}$  als die Newton-Geschwindigkeit  $\frac{d}{dt} \vec{r} = \vec{v}$  zu interpretieren ist.

### 8.1.1. Verletzung der Forminvarianz in der Newtonschen Theorie

Das erste was es zu untersuchen gilt ist, wie sich die Geschwindigkeit  $\vec{v}$  unter Lorentz-Transformationen verhält. Dazu gehe man davon aus, dass ein Teilchen in IS die Newton-Geschwindigkeit  $\vec{v}$  gemäß der obigen Definition hat, dann ist seine Newton-Geschwindigkeit in einem anderen Inertialsystem IS', welches sich relativ zu IS mit der Geschwindigkeit  $\vec{w}$  bewegt, durch  $\vec{v}' = \frac{d\vec{r}'}{dt'}$  gegeben, wobei für die Lorentz-transformierten Koordinaten

$$t' = \gamma(w) \left( t - \frac{w}{c^2} x \right) \quad x' = \gamma(w)(x - wt) \quad y' = y \quad z' = z$$

gilt, was sich völlig analog auf die infinitesimalen Größen  $dt'$ ,  $dx'$ ,  $dy'$ ,  $dz'$  überträgt. Also gilt

$$v'_x = \frac{dx'}{dt'} = \frac{\gamma(w) dx - w dt}{\gamma(w) dt - \frac{w}{c^2} dx} = \frac{\frac{dx}{dt} - w}{1 - \frac{w}{c^2} \frac{dx}{dt}} = \frac{v_x - w}{1 - \frac{wv_x}{c^2}}$$

$$v'_y = \frac{dy'}{dt'} = \frac{dy}{\gamma(w)(dt - \frac{w}{c^2} dx)} = \frac{\frac{dy}{dt}}{\gamma(w)(1 - \frac{w}{c^2} \frac{dx}{dt})} = \frac{v_y}{\gamma(w)(1 - \frac{wv_x}{c^2})} \quad (\text{analog für } z)$$

Man mag an dieser Stelle bereits erwarten, dass die Newton-Beschleunigung des Kraft-Gesetzes noch unübersichtlicher transformiert, man erkennt aber sofort, dass diese Gleichung sicherlich nicht forminvariant unter Lorentz-Transformationen ist, und somit nicht mit dem Relativitätsprinzip verträglich ist, welches wir als Fundament der Relativitätstheorie angesetzt haben. Daher ist nun eine korrekte relativistische Verallgemeinerung des zweiten Newtonschen Gesetzes zu finden, wobei wir zwei Forderungen an die gesuchte Gleichung stellen:

- Lorentz-Forminvarianz, d.h. sie kann als Tensor-Gleichung formuliert werden,
- die Gleichung geht für  $v \ll c$  wieder in das Newtonsche Kraftgesetz über.

### 8.1.2. Vierergeschwindigkeit und Viererimpuls

Man beachte, dass die Weltlinie eines Teilchens in Analogie zur klassischen Newtonschen Mechanik durch die Eigenzeit  $\tau$  parametrisiert werden kann, also durch  $x^\mu = x^\mu(\tau)$ , wobei dann in instantanen Ruhe-Inertialsystem

$$d\tau = \frac{1}{c} \sqrt{ds^2} = dt' \quad \text{mit} \quad ds^2 = dx^\mu dx_\mu$$

gilt. Sei  $\text{IS}'$  dieses besagte Ruhesystem, d.h. es gilt  $dx' = 0$ , und außerdem  $\text{IS}$  das Inertialsystem, in dem das Teilchen die Relativgeschwindigkeit  $v$  hat. Es gilt dann

$$t = \gamma(v) \left( t' - \frac{v}{c^2} x' \right) \quad \Longrightarrow \quad dt = \gamma(v) \left( dt' - \frac{v^2}{c^2} dx' \right) = \gamma(v) dt' ,$$

sodass wir  $\frac{dt}{dt'} = \gamma(v) = \frac{dt}{d\tau}$  erhalten, die Eigenzeit  $\tau$  ist also ein Lorentz-Skalar. Man definiert nun einen weiteren Vierervektor  $u^\mu$ , die sogenannte **Vierergeschwindigkeit**, durch

$$u^\mu := \frac{dx^\mu}{d\tau} .$$

Die Eigenschaft eines Vierervektors folgt dabei daraus, dass  $dx^\mu$  ein Vierervektor und  $d\tau$  ein Viererskalar ist, dieser Vektor transformiert also gemäß  $u^\mu \rightarrow u'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu u^\nu$ , wobei für die einzelnen Komponenten

$$u^0 = \frac{dx^0}{d\tau} = c \frac{dt}{d\tau} = \gamma(v)c \quad \text{und} \quad u^i = \frac{dx^i}{d\tau} = \frac{dt}{d\tau} \frac{dx^i}{dt} = \gamma(v)\vec{v}$$

gilt, also erhalten wir  $u^\mu = \gamma(v)(c, \vec{v})$  für die Komponenten der Vierergeschwindigkeit. Da im nichtrelativistischen Fall  $\gamma(v) \approx 1$  ist, folgt somit  $\vec{u} \approx \vec{v}$ , sodass  $u^\mu$  folglich die Verallgemeinerung der Newton-Geschwindigkeit darstellt.

Falls  $\text{IS}$  das instantane Ruhesystem ist, so muss  $u^\mu = \gamma(v)(c, \vec{0})$  gelten. Man betrachte dann weiter, dass für das Längenquadrat

$$u^\mu u_\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau} \frac{dx_\mu}{d\tau} = \frac{ds^2}{d\tau^2} = c^2 > 0$$

gilt, d.h. die Vierergeschwindigkeit  $u^\mu$  ist stets ein zeitartiger Vierervektor. Auch für den Impuls findet sich eine geeignete relativistische Verallgemeinerung in Form des **Viererimpulses**, der analog zum klassischen Newtonschen Impuls durch

$$p^\mu := m u^\mu = (p^0, \vec{p}) = m\gamma(v)(c, \vec{v})$$

definiert ist. Oft wird der Viererimpuls mit der geschwindigkeitsabhängigen Masse  $m(v)$  als

$$p^\mu = m(v)(c, \vec{v}) \quad \text{mit} \quad m(v) = m\gamma(v) = \frac{m}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

geschrieben, wobei  $m(v)$  genauer als **bewegte Masse** bezeichnet wird, während  $m$  die **Ruhemasse** meint. Wegen  $\gamma(v) \approx 1$  für  $v \ll c$  findet sich auch für diese Größen im nichtrelativistischen Grenzfall schnell die Korrespondenz zu den entsprechenden Größen der Newtonschen Theorie, also

$$p^\mu \approx m(c, \vec{v}) = (mc, \vec{p}_N) .$$

Außerdem findet man noch, dass auch der Viererimpuls  $p^\mu$  stets ein zeitartiger Vierervektor ist, denn es gilt

$$p^2 = p^\mu p_\mu = m^2 u^\mu u_\mu = m^2 c^2 > 0 \quad \text{und} \quad p^0 = m\gamma(v)c > 0 .$$

Die möglichen Werte der  $p^\mu$  können dabei in eine  $p^0$ - $\vec{p}$ -Diagramm verdeutlicht werden. Jedes der  $p^\mu$  liegt dabei auf der Massenscheibe  $(p^0)^2 - \vec{p}^2 = m^2 c^2$ :

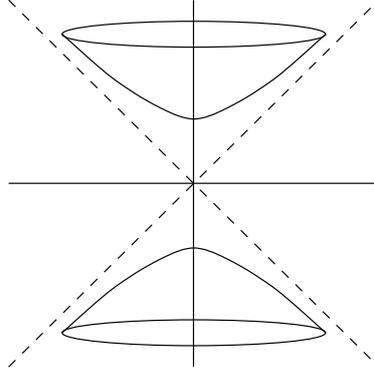


Abbildung 8.1.: Darstellung der Massenscheibe

### 8.1.3. Viererbeschleunigung, Minkowski- und Einstein-Kraft

Um letztlich das zweite Newtonsche Axiom verallgemeinern zu können, wird weiter eine vierdimensionale Form der Beschleunigung benötigt, die sogenannte **Viererbeschleunigung**

$$\begin{aligned} b^\mu &= \frac{d^2}{d\tau^2} x^\mu = \frac{d}{d\tau} u^\mu = \frac{dt}{d\tau} \frac{d}{dt} u^\mu = \gamma(v) \frac{d}{dt} (\gamma(v)c, \gamma(v)\vec{v}) \\ &= \gamma(v) \left( c \frac{d\gamma(v)}{dt}, \frac{d\gamma(v)}{dt} \vec{v} + \gamma(v) \frac{d\vec{v}}{dt} \right) , \end{aligned}$$

wobei für die zeitliche Ableitung von  $\gamma(v)$  insbesondere

$$\frac{d}{dt} \gamma(v) = \frac{d}{dt} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = -\frac{1}{2} \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-\frac{3}{2}} \frac{-2\vec{v}\dot{\vec{v}}}{c^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\vec{v}\dot{\vec{v}}}{\left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{\frac{3}{2}}}$$

gilt. Also folgt für die Viererbeschleunigung

$$b^0 = \frac{1}{c} \frac{\vec{v}\dot{\vec{v}}}{\left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^2} \quad \text{und} \quad \vec{b} = \frac{1}{1 - \frac{v^2}{c^2}} \left( \dot{\vec{v}} + \frac{(\vec{v}\dot{\vec{v}})\vec{v}}{c^2 \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)} \right) ,$$

und insbesondere gilt für das Längenquadrat des Viererbeschleunigungsvektors

$$b^2 = b^\mu b_\mu = -\frac{1}{1 - \frac{v^2}{c^2}} \left( \dot{v}^2 + \frac{(\vec{v}\dot{\vec{v}})^2}{c^2 \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)} \right) < 0 ,$$

die Viererbeschleunigung ist somit raumartig. Weiter folgt mit  $u^\mu u_\mu = c^2$  über die zeitliche Ableitung

$$\frac{d}{d\tau} (u^\mu u_\mu) = 0 = b^\mu u_\mu + u^\mu b_\mu = 2ub \quad \implies \quad ub = 0 ,$$

d.h. die Vierergeschwindigkeit und die Viererbeschleunigung stehen stets orthogonal im Sinne des indefiniten Lorentz-Skalarprodukts aufeinander. Eine naheliegende relativistische Verallgemeinerung des zweiten Newtonschen Gesetzes ist nun

$$\frac{d}{d\tau}p^\mu = f^\mu \quad \text{mit} \quad m \frac{d}{d\tau}u^\mu = f^\mu \iff m \frac{d^2}{d\tau^2}x^\mu = f^\mu ,$$

wobei  $f^\mu$  die sogenannte **Minkowski-Kraft** ist. Per Definition ist sie ein Vierervektor und hängt im nichtrelativistischen Fall mit der Newton-Kraft zusammen. Außerdem gilt für  $f^\mu$  die Gleichung  $u^\mu f_\mu = 0$ , und damit folgt

$$u^0 f^0 = \vec{u} \vec{f} \quad \implies \quad f^\mu = \left( \frac{1}{u^0} \vec{u} \vec{f}, \vec{f} \right) = \left( \frac{1}{c} \vec{v} \vec{f}, \vec{f} \right) .$$

Für einzelne räumliche Komponenten nimmt dies dann die Form

$$\frac{d}{d\tau}m u^i = f^i \iff \frac{d}{d\tau} \left( m \frac{d}{d\tau} x^i \right) = f^i \quad \text{mit} \quad \frac{d}{d\tau} = \frac{dt}{d\tau} \frac{d}{dt} = \gamma(v) \frac{d}{dt}$$

an, also folgt insbesondere das relativistische Analogon zum Newtonschen Axiom in Form von

$$\frac{d}{dt}(m(v)v^i) = \frac{1}{\gamma(v)} f^i \quad \text{bzw.} \quad \frac{d}{dt}(m(v)\vec{v}) = \frac{1}{\gamma(v)} \vec{f} = \vec{F}_E .$$

Dieses  $\vec{F}_E$  wird als **Einstein-Kraft** bezeichnet. Für  $v \ll c$  folgt  $\gamma(v) \approx 1$  und demnach dann auch  $m(v) = m\gamma(v) \approx m$ , im nichtrelativistischen Grenzfall gilt also

$$\vec{F}_E = \frac{d}{dt}m\vec{v} = \vec{F} ,$$

d.h. Newton- und Einstein-Kraft stimmen überein. Weiter folgert man dann die Identitäten

$$\vec{f} = \gamma(v)\vec{F} = \gamma(v)\vec{F} \quad \text{und} \quad f^0 = \frac{1}{c}\vec{v}\vec{f} = \frac{1}{c}\gamma(v)\vec{v}\vec{F} ,$$

also  $f^\mu = \gamma(v)\left(\frac{1}{c}\vec{v}\vec{F}, \vec{F}\right)$ . Dies ist auch insofern konsistent, dass im kräftefreien Fall (d.h. falls  $\vec{F} = 0$  und damit  $\vec{f} = 0$  ist)

$$\frac{d}{dt}m(v)\vec{v} = 0$$

gilt, d.h.  $m(v)\vec{v}$  ist dann eine Erhaltungsgröße. Also ist  $m(v)\vec{v}$  tatsächlich als relativistischer Impuls zu interpretieren, sodass allgemein

$$\frac{d}{dt}\vec{p} = \vec{F}_E = \vec{F}$$

folgt. Die Impulserhaltung gilt dann relativistisch korrekt für  $\vec{p} = m(v)\vec{v}$ .

#### 8.1.4. Relativistisches Transformationsverhalten von Kräften

Aus dem bekannten Transformationsverhalten der Minkowski-Kraft (da diese ein Lorentz-Vierervektor ist) können wir dann auf das notwendige Transformationsverhalten der Newton-Kraft unter Lorentz-Transformation schließen. Wir betrachten nur den Spezialfall der Transformation

## 8. Relativistische Punktmechanik

vom instantanen Ruhesystem  $IS'$  zum System  $IS$ , relativ zu dem das Teilchen die Newton-Geschwindigkeit  $\vec{v}$  hat, d.h.  $IS$  bewegt sich relativ zu  $IS'$  mit  $\vec{v}$ . In  $IS'$  gilt dann

$$f'^{\mu} = (f'^0, \vec{f}') \stackrel{\vec{v}'=0}{=} \gamma(0)(0, \vec{F}') = (0, \vec{F}') ,$$

d.h. einfach  $\vec{f}' = \vec{F}'$  und damit insbesondere  $\vec{f}'_{\parallel} = \vec{F}'_{\parallel}$  und  $\vec{f}'_{\perp} = \vec{F}'_{\perp}$ . Die Komponenten von  $f$  in  $IS$  seien  $f^{\mu} = (f^0, \vec{f})$ , es gilt dann

$$f^0 = \gamma(v) \left( f^0 - \frac{1}{c} \vec{v} \vec{f}_{\parallel} \right) \quad \vec{f}_{\parallel} = \gamma(v) \left( \vec{f}_{\parallel} - \frac{1}{c} \vec{v} f^0 \right) \quad \vec{f}_{\perp} = \vec{f}_{\perp} ,$$

wobei in  $IS$  das bereits bekannte  $f^{\mu} = \gamma(v) \left( \frac{1}{c} \vec{v} \vec{F}, \vec{F} \right)$  gilt, also folgt

$$f^0 = \frac{1}{c} \gamma(v) \vec{v} \vec{F} = \frac{1}{c} \gamma(v) \vec{v} \vec{F}_{\parallel} \quad \vec{f}_{\parallel} = \gamma(v) \vec{F}_{\parallel} \quad \vec{f}_{\perp} = \gamma(v) \vec{F}_{\perp} .$$

Daher ergibt sich dann folglich für den Parallelteil der Minkowski-Kraft in  $IS'$

$$\begin{aligned} \vec{f}'_{\parallel} = \vec{F}'_{\parallel} &= \gamma(v) \left( \gamma(v) \vec{F}_{\parallel} - \frac{1}{c} \vec{v} \gamma(v) \cdot \frac{1}{c} \vec{v} \vec{F}_{\parallel} \right) = \gamma(v)^2 \left( \vec{F}_{\parallel} - \frac{1}{c} \vec{v} \left( \frac{1}{c} \vec{v} \vec{F}_{\parallel} \right) \right) \\ &= \gamma(v)^2 \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right) \vec{F}_{\parallel} = \vec{F}_{\parallel} , \end{aligned}$$

weiter betrachte man dann  $\vec{f}'_{\perp} = \vec{F}'_{\perp} = \vec{f}_{\perp} = \gamma(v) \vec{F}_{\perp}$ , also folgt  $\vec{F}'_{\perp} = \gamma(v) \vec{F}_{\perp}$ . Insgesamt ist das notwendige Transformationsverhalten der Newton-Kraft unter Lorentz-Transformationen (für den Spezialfall, dass  $IS'$  das Ruhesystem darstellt) also durch

$$\vec{F}_{\parallel} = \vec{F}'_{\parallel} \quad \text{und} \quad \vec{F}_{\perp} = \frac{1}{\gamma(v)} \vec{F}'_{\perp}$$

spezifiziert. Allgemein lässt sich zeigen, dass für beliebige Relativgeschwindigkeiten  $\vec{v}$  der Inertialsysteme  $IS$  und  $IS'$  zueinander dann das Transformationsverhalten

$$f^{\mu} \rightarrow f'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu} f^{\nu}$$

und entsprechend für die Newton-Kraft  $\vec{F}$  folgt. Man betrachte nun noch die Zeitkomponente der Minkowski-Kraft, für die aus

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} m u^0 = f^0 &= \frac{\gamma(v)}{c} \vec{v} \vec{F} \quad \text{mit} \quad \frac{d}{d\tau} = \frac{dt}{d\tau} \frac{d}{dt} \quad \text{und} \quad m u^0 = m c \gamma(v) \\ \iff \gamma(v) \frac{d}{dt} (m c \gamma(v)) &= \frac{\gamma(v)}{c} \vec{v} \vec{F} \iff \frac{d}{dt} (m c^2 \gamma(v)) = \frac{d}{dt} (m(v) c^2) = \vec{v} \vec{F} \end{aligned}$$

dann  $m(v) c^2 = c p^0$  folgt. Da  $\vec{F}$  die Kraft ist, repräsentiert  $\vec{v} \vec{F}$  die dem Teilchen (mit der Geschwindigkeit  $\vec{v}$ ) zugeführte Arbeit pro Zeiteinheit. Also ist  $\frac{d}{dt} c p^0$  gleich der am Teilchen geleisteten Arbeit pro Zeit. Man interpretiert deshalb  $c p^0$  als Gesamtenergie  $E$  des Teilchens, sodass insbesondere für  $\frac{v}{c} \ll 1$  die Entwicklung

$$\begin{aligned} E = c p^0 = m(v) c^2 &= \gamma(v) m c^2 = \frac{m c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = m c^2 \left[ 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{v}{c} \right)^2 + \frac{3}{8} \left( \frac{v}{c} \right)^4 + \dots \right] \\ &\approx m c^2 + \frac{1}{2} m v^2 + \frac{3}{8} m \frac{v^4}{c^2} \end{aligned}$$

folgt. Falls also  $v = 0$  ist, so verbleibt  $E = mc^2$ , man spricht von der Ruheenergie. Im Falle von  $v \neq 0$ , aber kleinen Geschwindigkeiten verglichen mit der Lichtgeschwindigkeit  $c$ , erhält man gerade die Summanden bis zur zweiten Ordnung in  $v$ , also gilt

$$E = mc^2 + (\gamma - 1)mc^2 = mc^2 + T_{\text{rel}} = \text{Ruheenergie} + \text{rel. kinetische Energie} .$$

Man beachte dabei, dass für  $v \rightarrow c$  bei einem Teilchen der Masse  $m \neq 0$  die Energie  $E \rightarrow \infty$  geht, demnach kann ein massives Teilchen niemals Lichtgeschwindigkeit erreichen.<sup>1</sup> Mit der Wahl  $p^0 = \frac{E}{c}$  folgt, dass die Energie  $E$  und der relativistische Impuls einen Vierervektor bilden, also

$$p^\mu = (p^0, \vec{p}) = \left( \frac{E}{c}, \vec{p} \right) ,$$

und wegen  $p^2 = p^\mu p_\mu = m^2 c^2$  folgt noch  $\frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 = m^2 c^2 \iff E^2 - c^2 \vec{p}^2 = m^2 c^4$ , dies liefert, dass aus der Erhaltung von  $\vec{p}$  die Erhaltung der Gesamtenergie  $E$  folgt - daher wird dies oftmals auch als Energie-Impuls-Erhaltung bezeichnet. Aus den Formeln folgt auch

$$\vec{p} = m(v)\vec{v} = m(v)c \cdot \frac{1}{c}\vec{v} = \frac{1}{c^2}E\vec{v} \quad \vec{v} = \frac{c^2}{E}\vec{p} ,$$

insbesondere hat man dann im Fall von  $|\vec{v}| \rightarrow c$  den Impuls  $|\vec{p}| = \frac{E}{c}$ . Diese Beziehungen gelten auch im Falle masseloser Teilchen, wie z.B. Photonen

$$E^2 = \vec{p}^2 c^2 = 0 \iff |\vec{p}| = \frac{E}{c} .$$

## 8.2. Mehrteilchensysteme, Stoßprozesse und Viererimpulserhaltung

Man betrachte nun ein System von zwei oder mehr Teilchen, die miteinander in Wechselwirkung stehen. Im Fall einer Stoßwechselwirkung, also bei einer „0-Reichweite“ der Wechselwirkung, ist der Impuls eines jeden Teilches aufgrund der Kräftefreiheit immer derselbe, natürlich mit Ausnahme des Stoßprozesses. Im nichtrelativistischen Fall gilt beim elastischen Stoß bekanntlich der Impuls- und Energieerhaltungssatz

$$\begin{aligned} \text{Impuls:} \quad & \vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{p}_3 + \vec{p}_4 \iff m_1 \vec{v}_1 + m_2 \vec{v}_2 = m_3 \vec{v}_3 + m_4 \vec{v}_4 \\ \text{Energie:} \quad & \frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2 = \frac{1}{2} m_3 v_3^2 + \frac{1}{2} m_4 v_4^2 , \end{aligned}$$

es stellt sich auch hier wieder die Frage, wie die relativistische Verallgemeinerung dieser Gesetze aussieht. Dazu betrachte die Addition des Viererimpulses

$$p_1^\mu + p_2^\mu = p_3^\mu + p_4^\mu \quad \text{mit} \quad p_k^\mu = m_k u_k^\mu$$

<sup>1</sup>Man sollte diese Aussage wörtlich nehmen: Entgegen der allgemein verbreiteten Ansicht, dass aus der Relativitätstheorie die Unmöglichkeit von überlichtschnellen Bewegungen folgen würde, sagt die Relativitätstheorie lediglich aus, dass kein massives Teilchen die Lichtgeschwindigkeit erreichen kann. Mit anderen Worten kann man also definitiv nicht durch immer weiteren Zuschuss von Bewegungsenergie und immer höheren Geschwindigkeiten irgendwann die Lichtgeschwindigkeit durchbrechen - allerdings ist nicht ausgeschlossen, dass dies über völlig anderem Weg passieren kann. Hypothetische überlichtschnelle Teilchen werden als Tachyonen bezeichnet, die allerdings oftmals zu Problemen im Rahmen der Quantenfeldtheorie führen.

für  $k = 1, \dots, 4$ . Für  $\mu = i$ , also die Raumkomponenten, gilt dann

$$\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{p}_3 + \vec{p}_4 \iff m_1(v_1)\vec{v}_1 + m_2(v_2)\vec{v}_2 = m_3(v_3)\vec{v}_3 + m_4(v_4)\vec{v}_4 ,$$

während man für die  $\mu = 0$ -Komponenten analog

$$p_1^0 + p_2^0 = p_3^0 + p_4^0 \iff m_1c^2 + T_1^{\text{rel}} + m_2c^2 + T_2^{\text{rel}} = m_3c^2 + T_3^{\text{rel}} + m_4c^2 + T_4^{\text{rel}}$$

erhält. Man beachte, dass alle Gleichungen konsistent mit den nichtrelativistischen Äquivalenzen sind. Es zeigt sich also, dass im relativistischen Fall nur die Summe aus Ruhemassen und kinetischer Energie erhalten ist, es gibt somit keine separable Erhaltung der Massen oder der kinetischen Energie. Beispiele für Prozesse, in denen kinetische Energie in Ruheenergie (also Masse) umgewandelt wird, finden sich vor allem in der Elementarteilchenphysik.

Teil III.

# Theorie des elektromagnetischen Felds

# 9. Die Maxwell'schen Gleichungen

Nachdem wir uns mit der Newtonschen Mechanik und dem eleganten Lagrange- sowie Hamilton-Formalismus beschäftigt haben, sowie einen Einstieg in die spezielle Relativitätstheorie fanden, wird nun die Theorie des elektromagnetischen Felds eingeführt. Historisch gesehen stellt die von Maxwell formulierte Elektrodynamik eine interessante Entwicklung dar, denn prinzipiell ist die Elektrodynamik eine relativistische Feldtheorie - allerdings wusste Maxwell das nicht. Auf die simple Frage, wie denn eine Lichtwelle (zu Maxwells Zeit war die Beschreibung von Licht und Strahlung ausschließlich auf das Wellenbild fokussiert) aus Sicht eines ebenfalls lichtschnellen Beobachters aussähe, konterte Maxwell mit dem Grundprinzip, dass ein Lichtstrahl sich immer mit Lichtgeschwindigkeit fortbewege - egal von welchem Beobachter aus gesehen. Im Rahmen der klassischen Newtonschen Physik führt dies unweigerlich zu fundamentalen Widersprüchen, die sich erst im Rahmen der Relativitätstheorie auflösen.

In der klassischen Mechanik war das Newtonsche Kraftgesetz meist in einer Gleichung der Form

$$\underbrace{\vec{F} = \vec{F}(\vec{r}(t), \dot{\vec{r}}(t))}_{\text{Ein-Teilchen-System}} \quad \text{bzw.} \quad \underbrace{\vec{F}_i = \sum_{i \neq j} \vec{F}_{ij}(\vec{r}(t), \dot{\vec{r}}(t))}_{N\text{-Teilchen-System}}$$

vorgegeben. Im Falle von  $N = 2$  im  $N$ -Teilchen-System wirkt das Teilchen 2 am Ort  $\vec{r}_2$  auf das Teilchen 1 bei  $\vec{r}_1$  und zwar instantan - die Position des Teilchens 2 zur Zeit  $t$  bestimmt die zu 1 wirkende Kraft zur selben Zeit, dies ist das sogenannte **Fernwirkungsprinzip**. Dies führt insbesondere im Rahmen der speziellen Relativitätstheorie zu Problemen. Daher betrachtet man alternativ dazu das **Nahwirkungsprinzip**, welches auf dem Feldprinzip basiert: das Teilchen 2 erzeugt ein Kraft-Feld, dass auf jedes andere Teilchen in diesem Feld am Ort des jeweiligen Teilchens wirkt.

Im Bereich der Elektrodynamik (und allgemeiner der relativistischen Mechanik) ist das letztere Feldbild wesentlich günstiger wegen der endlichen Wirkungsausbreitungsgeschwindigkeit, d.h. eine Änderung des Ortes von 2 zur Zeit  $t$  beeinflusst das Teilchen 1 erst nach einiger Zeit, d.h. die Kraft, die 1 zur Zeit  $t$  spürt ist nicht durch den Ort von 2 zur selben Zeit bestimmt.

## 9.1. Das Coulombsche Gesetz und elektrische Feld

### 9.1.1. Ladungen und Coulomb-Gesetz

Elektrische Ladung ist eine Eigenschaft von Körpern, insbesondere von Teilchen, die die Stärke der elektromagnetischen Wechselwirkung bestimmt. Sie tritt dabei in zwei Formen (positiver und negativer Ladung) auf, wird elementar von Teilchen getragen und ist quantisiert, d.h. stets ein ganzzahliges Vielfaches einer gewissen Elementarladung. Außerdem ist Ladung eine additive Materialeigenschaft, die zudem in einem abgeschlossenen System erhalten und vom Bewegungszustand des System unabhängig ist (Lorentz-Skalar).

Empirisch manifestiert sich Ladung in Kräften. Man betrachtet die Kraft zwischen zwei punktförmigen ruhenden Ladungen  $q_1$  am Ort  $\vec{r}_1$  und  $q_2$  bei  $\vec{r}_2$ , dann gilt das **Coulomb-Gesetz**

$$\vec{F}_{12} = C \frac{q_1 q_2}{r_{12}^2} \hat{r}_{12}$$

mit der üblichen Größe  $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ . Rein äußerlich hat das Coulomb-Gesetz damit bis auf den Vorfaktor genau dieselbe Form, wie das Newtonsche Gravitationsgesetz - allerdings kennen wir von der Gravitation bisher nur eine anziehende Form. Die Konstante  $C > 0$  bestimmt dabei die Einheit und Dimension der elektrischen Ladung, in unterschiedlichen Einheitensystemen gelten verschiedene Werte:

$$\begin{aligned} \text{SI-System:} & \quad C = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \quad \text{mit} \quad \epsilon_0 = \frac{1}{4\pi c^2} \cdot 10^7 \frac{\text{A} \cdot \text{s}}{\text{V} \cdot \text{m}} = 8.8543 \cdot 10^{-12} \frac{\text{C}^2}{\text{J} \cdot \text{m}} \\ \text{Gauß-System:} & \quad C = 1 \\ \text{ese-System:} & \quad C = 1 \end{aligned}$$

Bei mehreren vorhandenen Ladungen  $q_0, \dots, q_N$  bei  $\vec{r}_0, \dots, \vec{r}_N$  gilt das **Superpositionsprinzip**

$$\vec{F}_0 = \sum_{i=1}^N \vec{F}_{0i} = C \sum_{i=1}^N \frac{q_0 q_i}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_i|^3} (\vec{r}_0 - \vec{r}_i) = q_0 C \sum_{k=1}^N \frac{q_i}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_i|^3} (\vec{r}_0 - \vec{r}_i),$$

d.h. die Coulomb-Kraftwirkung kann linear kombiniert werden. Bei makroskopischen Körpern ist es günstig eine kontinuierliche Ladungsverteilung  $\rho(\vec{r})$  zu definieren. Für ein makroskopisch kleines, mikroskopisch aber großes Volumen  $\Delta V$  sei

$$\rho(\vec{r}) \Delta V = \sum_{q_i \in \Delta V} q_i \quad \implies \quad \iiint_V \rho(\vec{r}) d^3\vec{r} = Q|_{\text{in } V}.$$

Umgekehrt kann man eine Punktladung  $q_i$  bei  $\vec{r}_i$  durch die Ladungsverteilung

$$\rho(\vec{r}) = q_i \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad \text{mit} \quad \delta(x) = \begin{cases} 0 & : x \neq 0 \\ \infty & : x = 0 \end{cases} \quad \text{sodass} \quad \int \delta(x) dx = 1$$

darstellen, wobei  $\delta(x)$  die Diracsche Delta-Distribution ist. Insbesondere gilt bei der Faltung jeder beliebigen anderen Funktion  $f$  mit ihr

$$(f * \delta)(\vec{r}_0) = \iiint f(\vec{r}) \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}_0) d^3\vec{r} = f(\vec{r}_0)$$

für  $\delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}_0) = \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(z - z_0)$ . Diese Funktion wird uns im weiteren Verlauf noch sehr häufig begegnen, eine saubere mathematische Definition erfolgt durch eine konvergente Funktionenfolge im Rahmen der Distributionentheorie.

### 9.1.2. Das elektrische Feld

Gegeben seien nun  $N + 1$  Ladungen  $q, q_1, \dots, q_N$  bei den Orten  $\vec{r}, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$ , dann ist die Kraft, welche von den Ladungen  $q_1, \dots, q_N$  auf  $q$  ausgeübt wird gleich

$$\vec{F} = qC \sum_{k=1}^N \frac{q_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^3} (\vec{r} - \vec{r}_i) =: q\vec{E}(\vec{r}),$$

## 9. Die Maxwell'schen Gleichungen

wobei  $\vec{E}(\vec{r})$  das von den (ruhenden) Ladungen  $q_1, \dots, q_N$  erzeugte Feld am Ort  $\vec{r}$  ist. Durch diese Definition des elektrischen Feldes wird jedem Raumpunkt eine vektorielle Eigenschaft  $\vec{E}(\vec{r})$  zugeordnet. Das so definierte elektrische Feld genügt ebenfalls dem Superpositionsprinzip. Das Feld, welches von den  $N$  ruhenden Ladungen erzeugt wird, ist dann gleich der vektoriellen Summe der Felder, die von den Einzelladungen erzeugt wird. Für das Feld einer einzelnen Ladung gilt dabei

$$\vec{E}(\vec{r}) = C \frac{q_1}{|\vec{r} - \vec{r}_1|^3} (\vec{r} - \vec{r}_1) \quad \text{bzw. allgemein} \quad \vec{E}(\vec{r}) = C \sum_i \frac{q_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^3} (\vec{r} - \vec{r}_i),$$

bzw. im Falle einer kontinuierlichen Ladungsverteilung  $\rho(\vec{r})$

$$\vec{E}(\vec{r}) = C \iiint \rho(\vec{r}') \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} d^3\vec{r}' .$$

Man betrachte nun weiter den Gradienten des inversen Betrags

$$\begin{aligned} \left[ \vec{\nabla}_r \left( \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) \right]_x &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\sqrt{(\vec{r} - \vec{r}')^2}} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2}} \\ &= -\frac{1}{2} \frac{2(x - x')}{[(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2]^{\frac{3}{2}}} = -\frac{x - x'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3}, \end{aligned}$$

und analog für die  $y$ - und  $z$ -Komponenten. Damit lässt sich das elektrische Feld offensichtlich auch als Gradient schreiben:

$$\begin{aligned} \text{Einzelne Ladung:} \quad \vec{E}(\vec{r}) &= -\vec{\nabla} \left( C \frac{q_1}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} \right) \\ \text{Mehrere Ladungen:} \quad \vec{E}(\vec{r}) &= -\vec{\nabla} \left( C \sum_i \frac{q_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} \right) \\ \text{kont. Verteilung:} \quad \vec{E}(\vec{r}) &= -\vec{\nabla} \iiint C \rho(\vec{r}') \frac{d^3\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \end{aligned}$$

Ganz allgemein gelangt man so zur Notation  $\vec{E}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}\Phi(\vec{r})$ , wobei

$$\Phi(\vec{r}) = C \sum_{i=1}^N \frac{q_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} = C \iiint \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}'$$

das zugehörige **Skalarpotential** des elektrischen Feldes ist.

**Bemerkung:** Es gilt  $\text{rot } \vec{E} = \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla}\Phi) = 0$  für alle elektrostatischen Felder, diese sind also allesamt wirbelfrei.

**Satz 15 (Gauß):** Man betrachte ein beliebiges Volumen  $V$  mit der Begrenzungsfläche  $S(V)$ . Dann gilt die Gleichheit:

$$\oiint_{S(V)} \vec{E} d\vec{f} = 4\pi C \iiint_V \rho(\vec{r}) d^3\vec{r} .$$

*Beweis.* Man betrachte zunächst eine einzelne Punktladung  $q$  und unterscheide dann zwei Fälle:

- Es befinde sich  $q$  innerhalb des Volumens  $V$ , wobei  $V$  beliebige Form und Größe habe. Der Anteil des Oberflächenelements am Ort  $\vec{r}$  zu  $\oiint \vec{E} d\vec{f}$  ist

$$\vec{E}(\vec{r}) d\vec{f} = |\vec{E}(\vec{r})| |d\vec{f}| \cos \vartheta = |\vec{E}(\vec{r})| r^2 d\Omega = C \frac{q}{r^2} r^2 d\Omega = Cq d\Omega ,$$

wobei  $d\Omega$  ein Raumwinkelelement bezeichne. Damit erhält man dann direkt

$$\oiint_{S(V)} \vec{E} d\vec{f} = Cq \oiint d\Omega = 4\pi Cq .$$

- Sei nun die Ladung  $q$  außerhalb des Volumens  $V$ . Der Beitrag von Vorder- und Rückseite der beiden Flächenelemente des Volumens zu  $\oiint \vec{E} d\vec{f}$  ist durch

$$\vec{E}(\vec{r}_1) d\vec{f}_1 + \vec{E}(\vec{r}_2) d\vec{f}_2 = Cq \left( \frac{1}{r_1^3} \vec{r}_1 d\vec{f}_1 + \frac{1}{r_2^3} \vec{r}_2 d\vec{f}_2 \right)$$

mit  $\vec{r}_1 d\vec{f}_1 = r_1 \cos(\vartheta_1) df_1$  und  $\vec{r}_2 d\vec{f}_2 = r_2 \cos(\vartheta_2) df_2$  gegeben, sodass man daraus weiter

$$\frac{Cq}{r_1^2} (-r_1^2 d\Omega) + \frac{Cq}{r_2^2} (r_2^2 d\Omega) = Cq(-d\Omega + d\Omega) = 0$$

erhält, also folgt  $\oiint \vec{E} d\vec{f} = 0$ .

Liegen nun mehrere Ladungen  $q_i$  innerhalb des Volumens  $V$  vor, so gilt dann folglich

$$\oiint_{S(V)} \vec{E} d\vec{f} = 4\pi C \sum_i q_i = 4\pi C \iiint_V \rho(\vec{r}) d^3\vec{r} ,$$

also erhalten wir die Aussage des Gauß-Theorems. □

**Bemerkung:** • Das Gaußsche Theorem in seiner differentiellen Form lautet durch Verwendung des Divergenz-Differentialoperators

$$\oiint_{S(V)} \vec{E} d\vec{f} = \iiint_V \operatorname{div} \vec{E} d^3\vec{r} = 4\pi C \iiint_V \rho(\vec{r}) d^3\vec{r} \implies \operatorname{div} \vec{E}(\vec{r}) = 4\pi C \rho(\vec{r}) .$$

Nach dem Zentralsatz der Vektoranalysis ist ein Vektorfeld  $\vec{V}$ , dass im Unendlichen genügend schnell verschwindet (mindestens proportional  $\frac{1}{r^2}$ ) vollständig durch Vorgabe von Divergenz und Rotation bestimmt. Also wird durch die Maxwell'schen Gleichungen der Elektrostatik das elektrische Feld ebenfalls eindeutig festgelegt. Falls die Ladungsverteilung  $\rho(\vec{r})$  bekannt ist, so erhält man das Feld bekanntlich direkt aus

$$\vec{E}(\vec{r}) = C \iiint \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} (\vec{r} - \vec{r}') d^3\vec{r}' .$$

Oft aber - insbesondere im Zusammenhang mit Leitern - ergibt sich die Ladungsverteilung  $\rho(\vec{r})$  erst gemeinsam mit dem elektrischen Feld  $\vec{E}(\vec{r})$ .

- Wegen  $\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi$  folgt aus  $\operatorname{div} \vec{E}(\vec{r}) = 4\pi C \rho(\vec{r})$  direkt die **Poisson-Gleichung**

$$\vec{\nabla}\vec{\nabla}\Phi = -4\pi C \rho \iff \Delta\Phi = -4\pi C \rho ,$$

wobei  $\Delta = \vec{\nabla}\vec{\nabla} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  den **Laplace-Operator** (in kartesischen Koordinaten) bezeichnet.

### 9.1.3. Beispiele für elektrostatische Felder

#### Homogen geladene Kugel

Wir betrachten eine ruhende homogen geladene Kugel mit Radius  $R$  um  $O$ . Es sei dann

$$\rho(\vec{r}) = A \cdot \Theta(R - r) = \rho(r) \quad \text{mit} \quad \Theta(x) = \begin{cases} 1 & : x > 0 \\ 0 & : x \leq 0 \end{cases}$$

die radial angegebene Ladungsverteilung dieser Kugel, wobei  $\Theta(x)$  die Stufenfunktion und  $A$  eine Ladungsfunktion sind. Man berechne das elektrische Feld nun mit Hilfe des zuvor gezeigten Gauß-Theorems. Dazu betrachte man als Volumen  $V$  eine konzentrische Vollkugel  $D(r)$  um  $O$  mit der schalenförmigen Oberfläche  $S(r)$ . Für  $r < R$  gilt dann

$$\oiint_{S(r)} \vec{E} d\vec{f} = 4\pi C \iiint_{D(r)} \rho(\vec{r}') d^3\vec{r}' .$$

Aus Symmetriegründen kann das elektrische Feld  $\vec{E}$  nur radial nach außen gerichtet sein, es gilt also  $\vec{E}(\vec{r}) = E(r)\hat{r}$ , sodass im Skalarprodukt mit dem Flächennormalen-Differential dann  $\vec{E} d\vec{f} = E(r) df$  folgt, und damit

$$\begin{aligned} \oiint_{S(r)} E(r) df &= 4\pi r^2 \cdot E(r) = 4\pi C \int_0^r \overbrace{\rho(r')r'^2}^A dr' \oiint d\Omega = 4\pi C A \cdot 4\pi \frac{r^3}{3} \\ \iff E(r) &= C \frac{4\pi r}{3} A R^3 \cdot \frac{1}{R^3} = C Q \frac{r}{R^3} . \end{aligned}$$

Im Falle von  $r > R$  findet man dann analog

$$\oiint_{S(r)} E(r) df = 4\pi r^2 \cdot E(r) = 4\pi C \iiint_{D(r)} \rho(\vec{r}') d^3\vec{r}' = 4\pi C A \overbrace{\frac{4\pi}{3} R^3}^Q \iff E(r) = C \frac{Q}{r^2} ,$$

sodass wird insgesamt für die Stärke des elektrischen Feldes der Kugel

$$\vec{E}(\vec{r}) = E(r)\hat{r} \quad \text{mit} \quad E(\vec{r}) = E(r) = \begin{cases} C \frac{Qr}{R^3} & : r < R \\ C \frac{Q}{r^2} & : r > R \end{cases}$$

erhalten. Somit ist das Feld außerhalb der Kugel identisch mit dem Feld einer Punktladung  $Q$  bei  $O$ , insbesondere fällt  $E(r)$  für  $r \rightarrow \infty$  quadratisch ab.

#### Elektrisch geladener Dipol

Der Abstand zweier Ladungen  $+Q$  und  $-Q$  sei durch  $|2\vec{a}|$  gegeben und klein gegenüber  $|\vec{r}|$ . Für die Potentiale der einzelnen Ladungen gilt

$$\Phi_1(\vec{r}) = C \frac{+Q}{|\vec{r}|} \quad \text{und} \quad \Phi_2(\vec{r}) = C \frac{-Q}{|\vec{r} + 2\vec{a}|} ,$$

also folgt nach dem Superpositionsprinzip dann für das Gesamtpotential  $\Phi(\vec{r}) = \Phi_1(\vec{r}) + \Phi_2(\vec{r})$ . Man führe nun eine Taylorentwicklung von  $\Phi_2$  am Ort  $\vec{a} = 0$  durch, wobei die Terme zweiter Ordnung - da wir  $|\vec{a}|$  als sehr viel kleiner als  $|\vec{r}|$  angenommen haben - vernachlässigt werden können, also

$$\frac{1}{|\vec{r} + 2\vec{a}|} = \frac{1}{|\vec{r}|} + 2\vec{a}\vec{\nabla} \frac{1}{|\vec{r}|} + \dots \quad \implies \quad \Phi_2(\vec{r}) = C \frac{-Q}{|\vec{r}|} + C(-Q) \cdot 2\vec{a}\vec{\nabla} \frac{1}{|\vec{r}|} + \dots .$$

Eine derartige Entwicklung nennt man allgemein Multipolentwicklung, allerdings soll nicht näher darauf eingegangen werden. Für das Gesamtpotential ergibt sich damit

$$\Phi(\vec{r}) = \Phi_1(\vec{r}) + \Phi_2(\vec{r}) = C \frac{+Q}{|\vec{r}|} + C \frac{-Q}{|\vec{r}|} + C(-Q)2\vec{a}\vec{\nabla} \frac{1}{|\vec{r}|} =: -\vec{d}\vec{\nabla} \frac{1}{|\vec{r}|},$$

wobei der Vektor  $\vec{d} = 2CQ\vec{a}$  das sogenannte **Dipolmoment** bezeichnet. Für das elektrostatische Feld hat man dann (in guter Näherung)

$$\vec{E}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}\Phi(\vec{r}) = \frac{3(\vec{d}\vec{r})\vec{r} - r^2\vec{d}}{r^3},$$

dieses fällt insbesondere mit  $\frac{1}{r^3}$  für  $r \rightarrow \infty$  ab.

#### 9.1.4. Physikalische Bedeutung des Potentials $\Phi$

Wir betrachten ein elektrostatisches Feld  $\vec{E}(\vec{r})$ . Um eine zusätzliche Ladung  $q$  gegen die Wirkung des Feldes vom Punkt  $B$  nach  $C$  längs eines Weges  $\gamma$  zu bewegen, muss man die Arbeit  $A(\gamma)$  verrichten, die nach den Gesetzen der Mechanik durch „Kraft mal Weg“, also

$$A_\gamma = -q \int_\gamma \vec{E} d\vec{s}$$

gegeben ist. Da die Rotation des elektrostatischen Feldes verschwindet, ist das Integral folglich nur vom Anfangs- und Endpunkt abhängig, also gilt

$$A_\gamma = A(B, C) = -q \int_B^C (-\vec{\nabla}\Phi) d\vec{s} = q[\Phi(\vec{r}_C) - \Phi(\vec{r}_B)] =: qU_{CB},$$

wobei die Größe  $U_{CB}$  als **Spannung** zwischen den Punkten  $B$  und  $C$  bezeichnet wird.

## 9.2. Ströme und das Ohmsche Gesetz

### 9.2.1. Ströme, Stromdichte und Stromstärke

Bisher wurden ausschließlich ruhende Ladungen betrachtet, daher gehen wir jetzt zu bewegten Ladungen über, den sogenannten **Strömen**. Die durch Bewegung von Ladung bewirkte Stromdichte  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  wird wie folgt definiert: Man betrachte einen Raumbereich  $V$ , dann muss wegen der Ladungserhaltung die Änderung der in  $V$  befindlichen Ladung gleich sein mit dem Fluss der Ladung durch die Oberfläche  $S(V)$  des Volumens, also

$$-\frac{d}{dt}Q|_{\text{in } V} = \oint_{S(V)} \vec{j}(\vec{r}, t) d\vec{f} = -\frac{d}{dt} \iiint_V \rho(\vec{r}, t) d^3\vec{r}.$$

Falls dann weiter das betrachtete Volumen  $V$  ruhend (also zeitunabhängig) ist, folgt

$$-\iiint_V \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = \oint_{S(V)} \vec{j}(\vec{r}, t) d\vec{f} = \iiint_V \vec{\nabla} j d^3\vec{r} \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0.$$

Letzteres ist die sogenannte **Kontinuitätsgleichung**, welche eine direkte Folgerung der Ladungserhaltung ist.  $\vec{j} d\vec{f}$  ist dabei die Ladungsmenge, die pro Zeiteinheit durch das Flächenelement  $d\vec{f}$  von  $S(V)$  hinausfließt.

Drücken wir nun die Stromdichte  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  durch die Ladungsverteilung  $\rho(\vec{r}, t)$  und ein Geschwindigkeitsfeld  $\vec{v}(\vec{r}, t)$  aus. Dazu betrachte man ein beliebiges Flächenelement  $d\vec{f}$  bei  $\vec{r}$ , wobei die momentane Geschwindigkeit der Ladungsträger dort gleich  $\vec{v} = \vec{v}(\vec{r}, t)$  sei. Dann fließt im Zeitintervall  $\Delta t$  durch dieses Flächenelement die Ladungsmenge  $\Delta q$ , für die

$$\Delta q = \rho(\vec{r}, t) |\vec{v}(\vec{r}, t)| \cos \vartheta |d\vec{f}| \cdot \Delta t$$

gilt, also erhält wir für den Quotienten „Ladung pro Zeit“ direkt

$$\frac{\Delta q}{\Delta t} = \rho(\vec{r}, t) \vec{v}(\vec{r}, t) d\vec{f} = \vec{j}(\vec{r}, t) d\vec{f} \quad \Longrightarrow \quad \vec{j}(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t) \vec{v}(\vec{r}, t)$$

erhalten. Im Spezialfall eines räumlich abgegrenzten Leiters, sodass  $\vec{j} \neq 0$  nur im Inneren des Leiters gelten kann, ist dann

$$J := \iint_A \vec{j} d\vec{f}$$

die pro Zeit durch die Leiterfläche  $A$  fließende Ladung, genannt **Stromstärke**.

### 9.2.2. Stationäre Ströme

Betrachten wir den stationären Fall, d.h. sowohl Stromdichte wie auch Ladungsdichte sind zeitunabhängig. In diesem Fall gilt  $\text{div } \vec{j} = \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$ , d.h. es gibt keine Stromquellen.

**Bemerkung:** • Man betrachte einen beliebigen Leiter, der durch ein ebenfalls beliebiges Volumen  $V$  gelegt ist. Die Schnittflächen von Leiter und Volumen seien  $A_1$  und  $A_2$ , sodass aufgrund der Stationarität dann

$$\iiint_V \vec{\nabla} \cdot \vec{j} d^3\vec{r} = 0 = \oiint_{S(V)} \vec{j} d\vec{f} = \iint_{A_1} \vec{j} d\vec{f} + \iint_{A_2} \vec{j} d\vec{f} = -J_1 + J_2 \iff J_1 = J_2$$

gilt, d.h. die Stromstärke im Leiter ist im stationären Fall unabhängig vom Leiterquerschnitt.

- Man betrachte eine Leiterverzweigung (drei Wege), die innerhalb eines beliebigen Volumens  $V$  liegen, dass die Verzweigung in den drei Leiterflächen  $A_1$ ,  $A_2$  und  $A_3$  schneide. Im stationären Fall ist dann

$$\iiint_V \vec{\nabla} \cdot \vec{j} d^3\vec{r} = 0 = \iint_{A_1} \vec{j} d\vec{f} + \iint_{A_2} \vec{j} d\vec{f} + \iint_{A_3} \vec{j} d\vec{f} = J_1 + J_2 + J_3,$$

d.h. die Summe aller Ströme muss verschwinden. Diese Aussage ist gerade die **Kirchhoffsche Knotenregel**, welche effektiv die Stromerhaltung an Leitungsknotenpunkten gewährleistet.

Man approximiert oftmals einen endlich starken Leiter durch einen infinitesimal dicken Leiter (Stromfaden) längs der eindimensionalen Kurve  $\gamma$ . Im Grenzfall ist dann

$$J = \iint_A \vec{j} d\vec{f} = \int \vec{j} d\vec{f} = \int j df$$

die Stromstärke. Ein Ausdruck  $\vec{j} d^3\vec{r}$ , der im Falle eine endlich dicken Leiters auftritt, wird im Grenzfall dann zu

$$\vec{j} d^3\vec{r} = j \hat{t} d\vec{f} d\vec{s} = j \hat{t} df ds = j df d\vec{s} = J d\vec{s} =: J d\vec{l}.$$

**Bemerkung:** Im elektrostatischen Fall kann im Inneren eines Leiters kein elektrisches Feld existieren. Demnach kann ein stationärer Strom im Leiter nur dann existieren, wenn ein nicht elektrostatisches (nicht rotationsfreies Feld) im Leiter vorliegt, welches die Ladungsträger bewegt. Diese werden von sogenannten **elektromotorischen Kräften** erzeugt, z.B. Transformatoren, elektrolytischen Konzentrationsdifferenzen, etc.

Man bezeichnet oft das über ein solches elektrisches Feld  $\vec{E}$  genommene Wegintegral  $\oint_{\gamma} \vec{E} d\vec{s}$  als elektromotorische Kraft. Da im Allgemeinen die Ladungsträger bei ihrer Bewegung Reibung erfahren, müssen diese elektromotorischen Kräfte ständig Energie zuführen, damit der Strom stationär bleibt. Diese **Dissipationsenergie** äußert sich als **Joulesche Wärme**. Die pro Zeit- und Volumeneinheit zu leistende Energie ist dabei durch

$$\frac{\vec{v}\vec{F}}{V} = \vec{v}\rho\vec{E} = \vec{j}\vec{E}$$

gegeben. Da die Bewegung der Ladungsträger durch dieses elektrische Feld  $\vec{E}$  bewirkt wird, muss ein Zusammenhang zwischen diesem  $\vec{E}$  und der stationären Stromdichte  $\vec{j}$  existieren, die im allgemeinen von der Dynamik der Ladungsträger im Leiter abhängt, also materialabhängig ist. Im Falle von metallischen (oder elektrolytischen) Leitern bei moderatem  $\vec{E}$ -Feld gilt das **Ohmsche Gesetz**

$$\vec{j} = \sigma\vec{E} ,$$

wobei die Konstante  $\sigma$  die **Leitfähigkeit** angibt. Andererseits hat man aber auch

$$\iint_A \vec{j} d\vec{f} = J = A|\vec{j}| = A\sigma|\vec{E}| \quad \text{und} \quad \int_{\gamma} \vec{E} d\vec{s} = |\vec{E}|l = U ,$$

also folgt  $J = A\sigma|\vec{E}| = \sigma \frac{A}{l} U = \frac{U}{R}$  für die Stromstärke.

### 9.3. Ampère-Gesetz und das magnetische Feld, Lorentz-Kraft

Neben der elektrostatischen bzw. elektrischen existiert noch eine weitere elektromagnetische Kraftwirkung, nämlich dann, wenn sich geladene Körper bewegen - man spricht von **magnetischen Kräften**. Empirisch betrachtet man zwei (unendlich lange) parallele Leiter 1 und 2 in  $z$ -Richtung, in denen die stationären Ströme  $J_1$  bzw.  $J_2$  fließen. Der Abstand der Leiter sei durch  $d$  gegeben. Dann entspricht die vom Leiter 2 auf den Leiter 1 ausgeübte Kraft pro Längeneinheit

$$\frac{d}{dl} \vec{F}_{12} = \kappa \cdot J_1 J_2 \frac{2}{d} \hat{x} ,$$

dies ist das **erste Ampèresche Gesetz**. Wenn also  $J_1$  und  $J_2$  das gleiche Vorzeichen (gleiche Flussrichtung) haben, so ziehen sich die Leiter folglich an, die wirken Kraft kann deshalb also nicht in Zusammenhang mit elektrostatischen Kräften stehen. Die Dimension der Konstanten  $\kappa$  ist bereits durch die Dimensionen der anderen Größen festgelegt. Dazu betrachten wir unter Verwendung von  $[J] = [q] \frac{1}{s}$  die beiden Kraftwirkungen

$$\begin{array}{ll} \text{Coulomb-Kraft:} & F_{12} = C \frac{q_1 q_2}{r^2} \\ \text{Ampère-Kraft:} & \frac{F_{12}}{l} = \kappa \frac{J_1 J_2}{r} \\ \implies [F_{12}] = \frac{[C] \cdot [q^2]}{\text{m}^2} & \implies [F_{12}] = \frac{[\kappa] \cdot [q^2]}{\text{s}^2} \end{array}$$

und durch Gleichsetzen der beiden Einheiten gilt dann

$$[\kappa] = \frac{[C] \cdot \text{s}^2}{\text{m}^2} \iff [\kappa/C] = \frac{\text{s}^2}{\text{m}^2} .$$

Eine Messung bei gegebener Ladung bzw. Strömen liefert dann die Beziehung  $\kappa = \frac{C}{c^2}$ , sodass  $\kappa$  folglich alleine durch die Konstante  $C$  bestimmt ist. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} \text{SI-System:} \quad C &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \implies \kappa = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{c^2} = \frac{\mu_0}{4\pi} \\ \text{Gauß-System:} \quad C &= 1 \implies \kappa = \frac{1}{c^2} \end{aligned}$$

mit der Konstante  $\mu_0 = \frac{1}{\epsilon_0 c^2} = 4\pi \cdot 10^{-7} \frac{\text{V}\cdot\text{s}}{\text{A}\cdot\text{m}}$  für  $\kappa$  in verschiedenen Einheitensystemen.

### 9.3.1. Detailliertere Messung der Kräfte zwischen stationären Stromkreisen

Man betrachte zwei Stromschleifen  $\gamma_1$  und  $\gamma_2$  in denen die stationären Ströme  $J_1$  und  $J_2$  fließen. Man bezeichne mit  $d\vec{l}_i$  ein Leiterelement am Ort  $\vec{r}_i$  für  $i = 1, 2$  sowie mit  $\vec{r}_{12} := \vec{r}_1 - \vec{r}_2$  wie üblich den Relativvektor. Die Kraft, welche die Stromschleife  $\gamma_2$  dann auf die Schleife  $\gamma_1$  ausübt, ist durch das **zweite Ampèresche Gesetz**

$$\vec{F}_{12} = \kappa \cdot J_1 J_2 \oint_{\gamma_1} \oint_{\gamma_2} \left[ d\vec{l}_1 \times \left( d\vec{l}_2 \times \frac{\vec{r}_{12}}{r_{12}^3} \right) \right]$$

gegeben. Um die Bedeutung dieses Doppelkurvenintegrals zu verstehen, forme man zunächst in Komponenten

$$(\vec{F}_{12})_i = \kappa \cdot J_1 J_2 \oint_{\gamma_1} \oint_{\gamma_2} \left[ \epsilon_{imn} dl_{1,m} \left( d\vec{l}_2 \times \frac{r_{12}}{r_{12}^3} \right)_n \right]$$

um, und da sich der rund geklammerte Teil als  $\epsilon_{nst} dl_{2,s} \frac{r_{12,t}}{r_{12}^3}$  schreiben lässt, folgt

$$(\vec{F}_{12})_i = \kappa \cdot J_1 J_2 \epsilon_{imn} \epsilon_{nst} \oint_{\gamma_1} dl_{1,m} \oint_{\gamma_2} dl_{2,s} \frac{r_{12,t}}{r_{12}^3} .$$

Unter Verwendung der allgemeinen Beziehung  $\epsilon_{imn} \epsilon_{nst} = \delta_{is} \delta_{mt} - \delta_{it} \delta_{ms}$  und der Identität

$$\delta_{is} \delta_{mt} \oint_{\gamma_1} dl_{1,m} \oint_{\gamma_2} dl_{2,s} \frac{r_{12,t}}{r_{12}^3} = \oint_{\gamma_2} dl_{2,i} \oint_{\gamma_1} d\vec{l}_1 \cdot \frac{\vec{r}_{12}}{r_{12}^3} = \oint_{\gamma_2} dl_{2,i} \oint_{\gamma_1} d\vec{l}_1 \cdot \vec{\nabla} \left( -\frac{1}{r_{12}} \right) = 0$$

folgt dann für die  $i$ -te Kraftkomponente des magnetischen Ampère-Gesetzes

$$(\vec{F}_{12})_i = -\kappa \cdot J_1 J_2 \delta_{ms} \oint_{\gamma_1} dl_{1,m} \oint_{\gamma_2} dl_{2,s} \frac{r_{12,i}}{r_{12}^3} =: -\kappa \cdot J_1 J_2 \delta_{ms} I$$

und damit in vektorieller Form

$$\vec{F}_{12} = -\kappa \cdot J_1 J_2 \oint_{\gamma_1} \oint_{\gamma_2} d\vec{l}_1 d\vec{l}_2 \cdot \frac{\vec{r}_{12}}{r_{12}^3} .$$

Man beachte, dass das zweite Ampèresche Gesetz damit insbesondere antisymmetrisch unter Vertauschung von 1 und 2 ist. Es stellt sich aber noch die Frage, wie die Größe  $I$  in der vorletzten Gleichung aussieht, wozu wir explizit nachrechnen müssen.

Sei die Stromschleife  $\gamma_1$  durch  $\vec{r}_1 = \vec{r}_1(\sigma)$  für  $\sigma \in [\sigma_a, \sigma_b]$  parametrisiert und die Stromschleife  $\gamma_2$  analog durch  $\vec{r}_2 = \vec{r}_2(\tau)$  für  $\tau \in [\tau_a, \tau_b]$ . Folglich gilt dann

$$\oint_{\gamma_2} dl_{2,i} \frac{r_{12,i}}{r_{12}^3} = \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau \frac{r_{1,i} - r_{2,i}(\tau)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2(\tau)|^3} \frac{d}{d\tau} r_{2,s}(\tau) =: f_{is}(\vec{r}_1),$$

sodass für die Größe  $I$  dann

$$I = \oint_{\gamma_1} dl_{1,m} \cdot f_{is}(\vec{r}_1) = \int_{\sigma_a}^{\sigma_b} d\sigma f_{is}(\vec{r}_1(\sigma)) \frac{d}{d\sigma} r_{1,m}(\sigma)$$

folgt.

### 9.3.2. Das magnetische Feld und Biot-Savart-Gesetz

In Analogie zur Elektrostatik beschreibt man das Zustandekommen der Kraft zwischen stationären Strömen so, dass man ein neues Feld, das magnetische Feld  $\vec{B}(\vec{r}, t)$  einführt, welches durch den stationären Strom  $J_2$  in  $\gamma_2$  erzeugt wird, und dessen vektorieller Wert an einem beliebigen Punkt  $\vec{r}$  durch das **Biot-Savart-Gesetz**

$$\vec{B}(\vec{r}) = \vec{B}_2(\vec{r}) = \alpha \kappa J_2 \oint_{\gamma_2} d\vec{l}_2 \times \frac{\vec{r} - \vec{r}_2}{|\vec{r} - \vec{r}_2|^3}$$

bestimmt ist. Die Kraft, welche die stationäre Stromschleife  $\gamma_1$  mit stationärem Strom  $J_1$  in diesem Magnetfeld spürt, ist dann gleich

$$\vec{F}_{12} = \frac{1}{\alpha} J_1 \oint_{\gamma_1} d\vec{l}_1 \times \vec{B}_2(\vec{r}).$$

Die Freiheit der Konstanten  $\alpha$  erlaubt es, das so definierte neue Feld mit beliebiger Dimension und beliebiger Größe zu versehen. Man setzt

$$\begin{aligned} \text{SI-System:} \quad \alpha = 1 &\implies \alpha \kappa = \kappa = \frac{\mu_0}{4\pi} \\ \text{Gauß-System:} \quad \alpha = c &\implies \alpha \kappa = c \frac{1}{c^2} = \frac{1}{c}. \end{aligned}$$

Man beachte, dass dadurch im Gaußsystem  $\vec{E}$ - und  $\vec{B}$ -Feld gleiche Einheiten haben. Das Gesetz von Biot-Savart lässt sich auf beliebige, nicht notwendig fadenförmige, stationäre Stromdichten  $\vec{j}(\vec{r})$  verallgemeinern. Es gilt dann

$$\vec{B}(\vec{r}) = \vec{B}_2(\vec{r}) = \alpha \kappa \iiint \vec{j}_2(\vec{r}') \times \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} d^3\vec{r}'$$

und in diesem magnetischen Feld spürt eine andere Stromdichte  $\vec{j}_1(\vec{r})$  dann die Kraft

$$\vec{F}_{12} = \iiint \vec{j}_1(\vec{r}) \times \frac{1}{\alpha} \vec{B}(\vec{r}) d^3\vec{r}.$$

### 9.3.3. Lorentz-Kraft

Betrachtet man nun speziell jede Stromdichte  $\vec{j}_1(\vec{r})$ , die von der Bewegung einer einzelnen Punktladung  $q$  mit der Bewegung  $t \mapsto \vec{r}_0(t)$  und der Geschwindigkeit  $\vec{v} = \frac{d}{dt}\vec{r}_0(t)$  herrührt, so gilt für diese mit  $\vec{j} = \rho\vec{v}$  und  $\rho = q\delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}_0)$  für eine Punktladung

$$\vec{j}(\vec{r}) = q\delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}_0(t)) \cdot \vec{v}(\vec{r})$$

mit der Ladungsverteilung  $\rho(\vec{r}) = q\delta(\vec{r} - \vec{r}_0(t))$ . Die im äußeren Magnetfeld  $\vec{B}$  auf diese Ladung ausübte Kraft ist dann durch

$$\begin{aligned} \vec{F}_{\text{mag}} &= \iiint \vec{j}_1(\vec{r}) \times \frac{1}{\alpha} \vec{B}(\vec{r}) d^3\vec{r} = \frac{q}{\alpha} \iiint \delta(\vec{r} - \vec{r}_0(t)) \vec{v}(\vec{r}) \times \vec{B}(\vec{r}) d^3\vec{r} \\ &= \frac{q}{\alpha} \vec{v}(\vec{r}_0(t)) \times \vec{B}(\vec{r}_0(t)) \end{aligned}$$

gegeben. Die bewegte Punktladung  $q$  spürt also im elektrischen Feld  $\vec{E}$  und dem magnetischen Feld  $\vec{B}$  die **Lorentz-Kraft**

$$\vec{F} = \vec{F}_L = \vec{F}_{\text{el}} + \vec{F}_{\text{mag}} = q\vec{E}(\vec{r}) + \frac{q}{\alpha} \vec{v} \times \vec{B}(\vec{r}) = q \left( \vec{E} + \frac{1}{\alpha} \vec{v} \times \vec{B} \right) .$$

Diese Formel gilt allgemein und ist eigentlich die operationale Definition von  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$ . Für die Verallgemeinerung auf Ladungsdichten hat man ähnlich

$$\vec{F}(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t)\vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{1}{\alpha} \vec{j}(\vec{r}, t) \times \vec{B}(\vec{r}, t) .$$

### 9.3.4. Eigenvektoren des magnetischen Felds

Um die Divergenz und Rotation des magnetischen Felds, welches von stationären Strömen erzeugt wird (magnetostatisches Feld), zu bestimmen, betrachte man unter Verwendung von

$$\frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} = -\vec{\nabla}_r \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad \implies \quad \vec{j}(\vec{r}') \times \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} = \vec{\nabla}_r \times \frac{\vec{j}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

wobei das Vorzeichen im antisymmetrischen Vorzeichen aufgeht, das Biot-Savart-Gesetz

$$\begin{aligned} \vec{B}(\vec{r}) &= \alpha\kappa \iiint \vec{j}(\vec{r}') \times \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} d^3\vec{r}' = \vec{\nabla}_r \times \alpha\kappa \iiint \frac{\vec{j}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}' \\ &=: \vec{\nabla}_r \times \vec{A}(\vec{r}) = \text{rot } \vec{A}(\vec{r}) . \end{aligned}$$

Somit können wir das magnetostatische  $\vec{B}$ -Feld als Rotation  $\vec{B} = \text{rot } \vec{A}$  eines Vektorpotentials darstellen. Insbesondere folgt damit

$$\text{div } \vec{B} = \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = 0 ,$$

d.h. das magnetostatische Feld ist quellfrei bzw. ein reines Wirbelfeld. Man beachte dabei, dass das Vektorpotential  $\vec{A}$  nicht eindeutig bestimmt ist. Mit  $\vec{A}$  folgt auch für

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} f(\vec{r}, t) \quad \implies \quad \vec{B} \rightarrow \vec{B}' = \vec{\nabla} \times \vec{A}' + \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} f = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B} .$$

Man berechne dann mit Hilfe der allgemeinen Identität  $\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{b}) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{b}) - \Delta \vec{b}$  sowie

$$\vec{\nabla}_r \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = -\vec{\nabla}_{r'} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad \text{und} \quad \Delta_r \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = -4\pi\delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}')$$

als nächstes die Rotation des  $\vec{B}$ -Feldes, hier gilt

$$\begin{aligned}
 \operatorname{rot} \vec{B}(\vec{r}) &= \vec{\nabla}_r \times \vec{B} = \alpha\kappa \vec{\nabla}_r \times \left( \vec{\nabla}_r \times \iiint \frac{\vec{j}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}' \right) \\
 &= \alpha\kappa \vec{\nabla}_r \iiint \vec{j}(\vec{r}') \vec{\nabla}_r \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}' - \alpha\kappa \iiint \vec{j}(\vec{r}') \Delta_r \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}' \\
 &= \alpha\kappa \vec{\nabla}_r \iiint \left[ -\vec{j}(\vec{r}') \vec{\nabla}_{r'} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] d^3\vec{r}' + 4\pi\alpha\kappa \iiint \vec{j}(\vec{r}') \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') d^3\vec{r}' \\
 &\stackrel{\text{P.I.}}{=} \alpha\kappa \vec{\nabla}_r \iiint \underbrace{\vec{\nabla}_{r'} \vec{j}(\vec{r}')}_{0, \text{ da stationär}} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}' + \underbrace{\text{Randterme}}_{0, \text{ da } |\vec{j}| = 0 \text{ in } \infty} + 4\pi\alpha\kappa \vec{j}(\vec{r}) = 4\pi\alpha\kappa \vec{j}(\vec{r}) .
 \end{aligned}$$

Somit erhält man in Abhängigkeit des verwendeten Einheitensystem für die Rotation

$$\operatorname{rot} \vec{B}(\vec{r}) = 4\pi\alpha\kappa \cdot \vec{j}(\vec{r}) = \begin{cases} \mu_0 \vec{j}(\vec{r}) & : \text{ SI-System} \\ \frac{4\pi}{c} \vec{j}(\vec{r}) & : \text{ Gauß-System} \end{cases} .$$

Damit ergeben sich die Maxwell'schen Gleichungen der Magnetostatik zu

$$\operatorname{div} \vec{B}(\vec{r}) = 0 \quad \operatorname{rot} \vec{B}(\vec{r}) = 4\pi\alpha\kappa \cdot \vec{j}(\vec{r}) ,$$

die entsprechende Umwandlung in die zugehörige Integralform liefert dann das **Ampèresche Durchflutungsgesetz**

$$\iint_F \operatorname{rot} \vec{B} d\vec{f} = 4\pi\alpha\kappa \iint_F \vec{j} d\vec{f} = 4\pi\alpha\kappa \cdot J_F .$$

Unter Verwendung eines Vektorpotential  $\vec{A}$  findet sich für die Rotation

$$\operatorname{rot} \vec{B} = \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - \Delta \vec{A} = 4\pi\alpha\kappa \cdot \vec{j}(\vec{r}) ,$$

wobei man durch eine entsprechende Eichung (darauf gehen wir später genauer ein) das Vektorpotential  $\vec{A}$  so wählen kann, dass  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$  gilt. Bei dieser Wahl vereinfacht sich die Gleichung dann zu  $\Delta \vec{A} = 4\pi\alpha\kappa \cdot \vec{j}(\vec{r})$ .

### 9.3.5. Anwendungsbeispiele

#### Magnetfeld eines unendlichen Leiterfadens und stationären Stroms

Das Magnetfeld von geraden unendlich langen Leiterfäden entlang der  $z$ -Achse, die von einem stationären Strom  $J$  durchflossen werden, ist durch das Biot-Savart-Gesetz

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{J}{c} \int_C d\vec{l}' \times \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3}$$

Man verwende auf Grund der vorliegenden Symmetrie Zylinderkoordinaten  $(\rho, \phi, z)$ , dann läuft die Integration einfach  $\vec{r}' = z' \hat{z}$  entlang. Ist  $\vec{r}$  nun in der  $x$ - $z$ -Ebene gewählt, so gilt

$$\vec{r} - \vec{r}' = \rho \hat{\rho} + (z - z') \hat{z} \quad \implies \quad |\vec{r} - \vec{r}'| = \sqrt{\rho^2 + (z - z')^2}$$

und zusammen mit  $d\vec{l}' = \hat{z} dz'$  sowie

$$d\vec{l}' \times (\vec{r} - \vec{r}') = dz' \cdot \hat{z} \times (\rho \hat{\rho} + (z - z') \hat{z}) = dz' \cdot \rho (\hat{z} \times \hat{\rho}) + dz' \cdot (z - z') (\hat{z} \times \hat{z}) = \rho \hat{\phi} dz'$$

folgt dann nach dem Biot-Savart-Gesetz für das Magnetfeld des Leiterfadens

$$\begin{aligned}\vec{B}(\vec{r}) &= \frac{J}{c} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \rho \hat{\phi} \frac{1}{[\rho^2 + (z - z')^2]^{\frac{3}{2}}} \stackrel{z-z'=\bar{z}}{=} \hat{\phi} \frac{J}{c} \rho \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{z} \frac{1}{[\rho^2 + \bar{z}^2]^{\frac{3}{2}}} \\ &\approx \hat{\phi} \frac{J}{c} \rho \cdot \frac{1}{\rho^2} \frac{\bar{z}}{[\rho^2 + \bar{z}^2]^{\frac{3}{2}}} \Big|_{-\infty}^{\infty} = \hat{\phi} \frac{J}{c} \rho \cdot \frac{1}{\rho} (1 - (-1)) = \frac{2}{c} \frac{1}{\rho} J \hat{\phi} .\end{aligned}$$

Die Feldlinien entsprechen somit konzentrischen Kreisen um den Leiterdraht, wobei die Stärke des Magnetfelds  $\vec{B}$  proportional der Strömstärke  $J$  und des inversen Abstands  $\frac{1}{\rho}$  ist.

### Magnetfeld und Vektorpotential einer beliebigen Stromschleife

Als Verallgemeinerung des vorigen Beispiels betrachte man nun eine beliebige Stromschleife  $C$ , wobei wir das Potential  $\vec{A}$  gemäß

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{c} \iiint \frac{\vec{j}(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' = \frac{1}{c} \oint_C \frac{J d\vec{l}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

berechnen wollen. Es sei dabei  $|\vec{r}| \gg |\vec{r}'|$ , dann entwickeln wir zunächst

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \frac{1}{\sqrt{r^2}} \frac{1}{\sqrt{1 - 2\frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2} + \frac{r'^2}{r^2}}} \approx \frac{1}{|\vec{r}|} \left(1 - 2\frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \approx \frac{1}{|\vec{r}|} \left(1 + \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2}\right) = \frac{1}{|\vec{r}|} + \frac{\vec{r}\vec{r}'}{|\vec{r}|^3} ,$$

sodass in der vorigen Gleichung für das Potential

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{J}{c} \oint_C \frac{d\vec{l}'}{|\vec{r}|} + \frac{J}{c} \frac{1}{|\vec{r}|^3} \oint_C d\vec{l}' (\vec{r}\vec{r}') = \frac{J}{c} \frac{1}{r^3} \oint_C d\vec{l}' (\vec{r}\vec{r}')$$

folgt. Sei nun  $\hat{n}$  weiter ein beliebiger Richtungsvektor, dann gilt für die Projektion des Vektorpotentials in diese Richtung mit Stokes

$$\vec{A}\hat{n} = \frac{J}{c} \frac{1}{r^3} \oint_C dl' \hat{n}(\vec{r}\vec{r}') = \frac{J}{c} \frac{1}{r^3} \iint_{F(C)} df' \vec{\nabla}_{r'} \times (\hat{n}(\vec{r}\vec{r}')) .$$

Verwendet man dann die Identität

$$[\vec{\nabla}_{r'} \times (\hat{n}(\vec{r}\vec{r}'))]_i = \epsilon_{imn} \nabla_{r',m} n_n(\vec{r}\vec{r}') = -\epsilon_{imn} n_n \overbrace{\nabla_{r',m} (r_i r'_i)}^{r_i \delta_{im} = r_m} = -\epsilon_{imn} n_n r_m = -(\hat{n} \times \vec{r})_i$$

für den Kreuzprodukt-Term der vorigen Potentialprojektion, so folgt für diesen schließlich

$$\vec{A}\hat{n} = -\frac{J}{c} \frac{1}{r^3} \iint_F df' (\hat{n} \times \vec{r}) = -\frac{J}{c} \frac{1}{r^3} (\hat{n} \times \vec{r}) \iint_F df' = -\frac{J}{c} \frac{1}{r^3} (\hat{n} \times \vec{r}) \cdot \vec{F} .$$

Weiter hat man allgemein die Gleichheit  $(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c} = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})$ , sodass sich obiger Term in

$$\vec{A}\hat{n} = -\frac{J}{c} \frac{1}{r^3} \hat{n}(\vec{r} \times \vec{F}) = \left( \frac{J}{c} \frac{1}{r^3} (\vec{F} \times \vec{r}) \right) \cdot \hat{n}$$

umformen lässt. Man beachte, dass bei einer ebenen Stromschleife das Gesamtflächennormal  $\vec{F}$  orthogonal zur Ebene steht, weiter gilt dann

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{r^3} \left( \frac{J}{c} \vec{F} \times \vec{r} \right) = \vec{m} \times \frac{\vec{r}}{r^3} \quad \text{mit} \quad \vec{m} = \frac{J}{c} \vec{F} ,$$

wobei man mit  $\vec{m}$  das **magnetische Moment** der Schleife bezeichnet. Das  $\vec{B}$ -Feld dieser betrachteten Stromschleife ergibt sich dann direkt aus dem ermittelten Potential zu

$$\begin{aligned}\vec{B} &= \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{\nabla} \times \left( \vec{m} \times \frac{\vec{r}}{r^3} \right) = -\vec{\nabla} \times \left( \vec{m} \times \vec{\nabla} \frac{1}{r} \right) = \vec{\nabla} \times \left( \vec{\nabla} \times \frac{\vec{m}}{r} \right) \\ &= \vec{\nabla} \left( \vec{\nabla} \frac{\vec{m}}{r} \right) - \vec{m} \Delta \frac{1}{r} = \vec{\nabla} \left( \vec{\nabla} \frac{\vec{m}}{r} \right) = -\vec{\nabla} \frac{\vec{m} \vec{r}}{r^3},\end{aligned}$$

wobei verwendet wurde, dass  $\Delta \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\vec{r}) = 0$  für  $\vec{r} \neq 0$  gilt. Die geometrische Form des Magnetfelds der Schleife ist in größerer Entfernung gleich der Form des elektrischen Feldes eines elektrischen Dipols, was man sich anhand der anfänglich Taylorentwicklung veranschaulichen kann. Ampère folgerte, dass jeder Magnetismus von einem elektrischen Kreisstrom stamme.

### Kreisende Ladung

Man betrachte nun speziell ein Teilchen mit der Ladung  $q$ , welches sich mit der Frequenz  $\nu$  auf einem Kreis mit dem Radius  $R$  bewegt. Es gilt dann  $J = qv$  und  $F = \pi R^2$ , also folgt für das magnetische Moment

$$\vec{m} = \frac{J}{c} \vec{F} = \frac{qvR^2\pi}{c} \hat{F}.$$

Andererseits ist der Bahndrehimpuls der kreisenden Ladung auch gleich  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = |\vec{r}| \cdot |\vec{p}| \hat{F} = Rm_q |\vec{v}| \hat{F}$ . Mit der Geschwindigkeit  $|\vec{v}| = 2\pi R\nu$  aus der Umlauffrequenz folgt nun sofort

$$\vec{L} = Rm_q \cdot 2\pi R\nu \hat{F} = 2R^2\pi\nu m_q \hat{F}$$

sodass sich umgekehrt gleichgesetzt mit der vorigen Gleichung für das magnetische Moment

$$\vec{m} = \frac{q}{2m_q c} \vec{L}$$

ergibt. Betrachtet man insbesondere ein einzelnes Elektron auf seiner Kreisbahn (beispielsweise als Näherung des Wasserstoffatoms im Rahmen des Bohrschen Atommodells), so ist sein magnetisches Moment durch  $\vec{m} = \frac{e}{2m_e c} \vec{L}$  gegeben, wobei der Vorfaktor  $\mu_e := \frac{e}{2m_e c}$  das **Bohrsche Magneton** ist. Der Drehimpuls eines Elektrons im Atom lässt sich mit dieser Größe kurz als  $L = \hbar\ell$  mit  $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$  ausdrücken, das zugehörige magnetische Moment lässt sich dann in Abhängigkeit des Drehimpulses als

$$m_e(\ell) = \frac{e\hbar}{2m_e c} \ell$$

schreiben. Das Elektron besitzt einen zusätzlichen Eigendrehimpuls (Spin), der ebenfalls ein magnetisches Moment

$$m_s = 2 \frac{e\hbar}{2mc} s$$

erzeugt - allerdings entsteht diese Größe erst im Rahmen der Quantenmechanik.

**Bemerkung:** Die Kraft, die ein Leiterkreis mit dem magnetischen Moment  $\vec{m}$  in einem äußeren magnetischen Feld  $\vec{B}_C$  spürt, ist durch  $\vec{F} = -\vec{\nabla}(-\vec{m}\vec{B}_C) = -\vec{\nabla}C_m(\vec{r})$  gegeben.

## 9.4. Faradaysches Induktionsgesetz und die Maxwell-Gleichungen

Zur Beschreibung der elektromagnetischen Wechselwirkung mussten bisher zwei verschiedene Arten von Feldern eingeführt werden:

- das elektrische Feld  $\vec{E}(\vec{r})$  mit  $\vec{F}_{\text{el}} = q\vec{E}(\vec{r})$  (Kraft auf ruhende Probeladung)
- das magnetische Feld  $\vec{B}(\vec{r})$  mit  $\vec{F}_{\text{mag}} = \frac{q}{c}\vec{v} \times \vec{B}(\vec{r})$  (Kraft auf bewegte Probeladung)

Umgekehrt wird durch ruhende Ladungen ein elektrisches Feld erzeugt, während magnetische Felder durch bewegte Ladungen erzeugt werden. Im statischen Falle gelten die vier Gleichungen

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \vec{E} = \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi\rho & \quad \operatorname{rot} \vec{E} = \vec{\nabla} \times \vec{E} = 0 & \quad \text{Maxwell-Gl. der Elektrostatik} \\ \operatorname{div} \vec{B} = \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 & \quad \operatorname{rot} \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c}\vec{j} & \quad \text{Maxwell-Gl. der Magnetostatik} \end{aligned}$$

Es stellt sich die Frage, wie diese Feldgleichungen im allgemeinen Fall aussehen, d.h. wenn die Ladungsverteilung  $\rho = \rho(\vec{r}, t)$  und die Stromdichte  $\vec{j} = \vec{j}(\vec{r}, t)$  zeitabhängig sind.

- Mit einer zeitabhängigen Verteilung  $\rho(\vec{r}, t)$  erhalten wir ein zeitabhängiges Feld  $\vec{E}(\vec{r}, t)$ . Weiter lässt sich aus der Zeitabhängigkeit von  $\rho(\vec{r}, t)$  auf eine zeitabhängige Stromdichte  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  schließen, woraus sich wiederum auf ein zeitabhängiges magnetisches Feld  $\vec{B}(\vec{r}, t)$  schließen lässt. Aber wie lässt sich von der Zeitabhängigkeit von  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  auf die von  $\vec{B}(\vec{r}, t)$  schließen?
- Eine Ladung  $q$  ruhe im Inertialsystem  $\text{IS}'$  und spürt dort in einem Feld  $\vec{E}'$  bzw.  $\vec{B}'$  die Kraft  $\vec{F}' = q\vec{E}'$ . Man betrachte dann weiter die Ladung  $q$  aus einem relativ zu  $\text{IS}'$  mit der Geschwindigkeit  $\vec{v}$  bewegten System  $\text{IS}$ . Die Ladung  $q$  spürt im Feld  $\vec{E}$  bzw.  $\vec{B}$  dann die Lorentz-Kraft  $\vec{F}_{\text{L}} = q(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B})$ . Bei kleinen Geschwindigkeiten  $\vec{v}$  erwartet man eine Kraftwirkung  $\vec{F} \approx \vec{F}'$ , also für das Feld  $\vec{E} = \vec{E}' + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}$ .
- Mit Hilfe des Biot-Savart-Gesetzes lässt sich von der Stromdichte  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  auf das magnetische Feld  $\vec{B}(\vec{r}, t)$  schließen. Die Frage ist nun, ob sich auch umgekehrt von  $\vec{B}(\vec{r}, t)$  auf  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  schließen lässt.

### 9.4.1. Das Induktionsgesetz

Faraday fand 1831 dass ein veränderliches magnetisches Feld einen Strom in einen Leiter induziert. Man betrachte dazu einen Leiterkreis in einem beliebigen äußeren magnetischen Feld  $\vec{B}(\vec{r}, t)$ . Der **magnetische Fluss** durch diese Leiterschleife ist durch

$$\phi_{\text{mag}} = \iint_{F(C)} \vec{B} \cdot d\vec{f}$$

definiert. Empirisch stellt man fest, dass wenn sich dieser Fluss zeitlich ändert, so wird in der Schleife  $C$  ein zusätzlicher Strom erzeugt, d.h. ein zusätzliches (nicht wirbelfreies) elektrisches Feld  $\vec{E}$  und somit eine elektromotorische Kraft

$$\oint_C \vec{E} \cdot d\vec{l} = -\delta \frac{d}{dt} \phi_{\text{mag}} = -\delta \frac{d}{dt} \iint_{F(C)} \vec{B} \cdot d\vec{f}.$$

Die Verallgemeinerung sieht dann wie folgt aus: Die Tangentialkomponenten eines Feldes sind an der Oberfläche von Leitern stetig, also existiert  $\vec{E}$  auch außerhalb des Leiterkreises, folglich erzeugt ein variierendes Magnetfeld auch ein elektrisches Wirbelfeld.

**Bemerkung:** • Der magnetische Fluss  $\phi_{\text{mag}}$  ist unabhängig von der Gestalt der Fläche  $F$ , sondern hängt nur von der Randlinie  $C$  ab. Den Grund dafür findet man in der empirischen Feststellung  $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$ , woraus die Darstellbarkeit  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$  folgt, die dann wegen

$$\phi_{\text{mag}} = \iint_{F(C)} \vec{B} \cdot d\vec{f} = \iint_{F(C)} \text{rot } \vec{A} \cdot d\vec{f} = \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{s}$$

unabhängig von  $F$  ist.

- Das negative Vorzeichen des Induktionsgesetzes folgt aus der **Lenzschen Regel**, nach der die Wirkung stets der Ursache entgegengesetzt sein muss (sonst würde aus einer minimalen Ursache eine stetig wachsende Wirkung hervorgehen, da eine Wirkung wieder Ursache eine neuen Wirkung ist).
- Die zuvor noch unbestimmte Proportionalitätskonstante  $\delta$  ist experimentell zu  $\delta = \frac{1}{\alpha}$  bestimmt. Dieses wird auch theoretisch aus der Forderung der Galilei-Invarianz des Induktionsgesetzes erzwungen, also gilt  $\delta = 1$  im SI-System und  $\delta = \frac{1}{c}$  im Gauß-System.

Das Induktionsgesetz lässt sich wieder in einer differentiellen Form darstellen. Im Bezugssystem, wo die Leiterschleife  $C$  ruht, gilt

$$-\delta \frac{d}{dt} \iint_{F(C)} \vec{B} \cdot d\vec{f} = -\delta \iint_{F(C)} \frac{\partial}{\partial t} \vec{B}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{f} \stackrel{!}{=} \oint_C \vec{E} \cdot d\vec{l} = \iint_{F(C)} \text{rot } \vec{E} \cdot d\vec{f},$$

also lautet das differentielle Induktionsgesetz

$$\text{rot } \vec{E} = -\delta \frac{\partial}{\partial t} \vec{B}.$$

### 9.4.2. Die vollständigen Maxwellschen Gleichungen der Elektrodynamik

Mit der Elektro- und Magnetostatik, dem Ampèreschen Durchflutungsgesetz und dem Faradayschen Induktionsgesetz kennen wir nun prinzipiell die ganze Dynamik des Elektromagnetismus. Bisher wurden dabei die folgenden Relationen für das  $\vec{E}$ - und  $\vec{B}$ -Feld gezeigt:

1.  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi C \rho(\vec{r})$  in der Elektrostatik,
2.  $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$  in der Magnetostatik,
3.  $\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\delta \frac{\partial}{\partial t} \vec{B}$  allgemein und
4.  $\vec{\nabla} \times \vec{B} = 4\pi \alpha \kappa \cdot \vec{j}(\vec{r}, t)$  in der Magnetostatik.

Wir stellen uns jetzt noch einmal die Frage, wie sich diese Gleichungen so verallgemeinern lassen, dass sie für beliebige zeitabhängige Verteilungen  $\rho(\vec{r}, t)$  und Stromdichten  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  die zugehörigen Felder  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  und  $\vec{B}(\vec{r}, t)$  bestimmen. Betrachten wir dazu die einzelnen Gleichungen noch einmal:

1. Das Gesetz  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) = 4\pi C \rho(\vec{r}, t)$  gilt auch allgemein, denn die Kraft auf eine ruhende Probeladung ist per Definition gleich  $\vec{F} = q\vec{E}(\vec{r}, t)$  und wird zu jedem Zeitpunkt  $t$  von einer Quellladung  $\rho(\vec{r}, t)$  erzeugt. Zu jedem Zeitpunkt gilt außerdem das Gauß-Theorem, also folgt  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi C \rho(\vec{r}, t)$ .

## 9. Die Maxwell'schen Gleichungen

2. Empirisch zeigt sich, dass dieses Gesetz auch allgemein gilt, da es keine magnetischen Monopole gibt, also  $\vec{\nabla} \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0$ .
3. Die dritte Gleichung  $\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\delta \frac{\partial}{\partial t} \vec{B}$  ist bereits allgemein gültig.
4. Die Gleichung  $\vec{\nabla} \times \vec{B} = 4\pi\alpha\kappa \cdot \vec{j}(\vec{r}, t)$  kann allgemein nicht gültig sein, denn durch

$$\operatorname{div} \operatorname{rot} \vec{B} = \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = 0$$

impliziert sie  $\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$ . Nach der bereits bekannten Kontinuitätsgleichung gilt aber allgemein  $\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = \frac{\partial}{\partial t} \rho = 0$ , und da uns ja gerade  $\frac{\partial}{\partial t} \rho \neq 0$  interessiert, sollte auch  $\vec{\nabla} \cdot \vec{j} \neq 0$  sein.

Um dies zu korrigieren, tätigen wir die folgenden Überlegungen: Da  $\operatorname{div} \operatorname{rot} \vec{B} = 0$  ist, muss auf der rechten Seite der Gleichung folglich ein Ausdruck stehen, dessen Divergenz verschwindet und im Fall der Stationarität zu  $\vec{j}(\vec{r})$  wird. Man betrachte dazu

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} + \frac{\partial}{\partial t} \rho = \vec{\nabla} \cdot \vec{j} + \frac{1}{4\pi C} \frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \vec{\nabla} \cdot \left( \vec{j} + \frac{1}{4\pi C} \frac{\partial}{\partial t} \vec{E} \right) = 0,$$

es liegt dann nahe das Gesetz  $\vec{\nabla} \times \vec{B} = 4\pi\alpha\kappa \cdot \vec{j}(\vec{r}, t)$  in der Form

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = 4\pi\alpha\kappa \left( \vec{j} + \frac{1}{4\pi C} \frac{\partial}{\partial t} \vec{E} \right) = 4\pi\alpha\kappa \cdot \vec{j} + \frac{\alpha\kappa}{C} \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}$$

zu verallgemeinern. Dabei bezeichnet man  $\frac{\alpha\kappa}{C} \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}$  auch als **Maxwell'schen Verschiebungsstrom**.

Man beachte, dass eine vollständige Ableitung der Maxwell'schen Gleichungen, d.h. ohne die oben verwendeten heuristischen Argumente im Rahmen des Relativitätsprinzips geschehen kann, dies werden wir im letzten Kapitel dieses Abschnitts nachholen. Die **vollständigen Maxwell'schen Gleichungen** lauten nun

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \vec{E} &= 4\pi C \rho & \operatorname{div} \vec{B} &= 0 \\ \operatorname{rot} \vec{E} &= -\delta \frac{\partial}{\partial t} \vec{B} & \operatorname{rot} \vec{B} &= 4\pi\alpha\kappa \cdot \vec{j} + \frac{\alpha\kappa}{C} \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}. \end{aligned}$$

Die vier auftretenden Konstanten  $C$ ,  $\alpha$ ,  $\kappa$  und  $\delta$  nehmen in den unterschiedlichen Einheitensystemen die in der folgenden Tabelle zusammengetragenen Werte an:

	$C$	$\alpha$	$\kappa = \frac{C}{c^2}$	$\delta = \frac{1}{\alpha}$
SI-System:	$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}$	1	$\frac{\mu_0}{4\pi}$	1
Gauß-System:	1	$c$	$\frac{1}{c^2}$	$\frac{1}{c}$
ese-System:	1	1	$\frac{1}{c^2}$	1
Lorentz-System:	$\frac{1}{4\pi}$	$c$	$\frac{1}{4\pi c^2}$	$\frac{1}{c}$

**Tabelle 9.1.:** Konstanten der Maxwell-Gleichungen in unterschiedlichen Einheitensystemen.

Man beachte, dass davon nur die Konstanten  $C$  und  $\alpha$  wirklich frei wählbar sind, die übrigen beiden sind durch diese Wahl denn bereits festgelegt. Folglich nehmen im SI- und Gauß-System

	SI-System	Gauß-System
(M1)	$\vec{\nabla} \vec{E} = \frac{1}{\epsilon_0} \rho$	$\vec{\nabla} \vec{E} = 4\pi \rho$
(M2)	$\vec{\nabla} \vec{B} = 0$	$\vec{\nabla} \vec{B} = 0$
(M3)	$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{B}$	$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{B}$
(M4)	$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{j} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}$	$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}$

**Tabelle 9.2.:** Die vollständigen Maxwell-Gleichungen

die vollständigen Maxwell'schen Gleichungen damit die bekannte Form in der folgenden Tabelle an.

Die vollständigen Maxwell'schen Gleichungen stellen somit (komponentenweise betrachtet) acht partielle Differentialgleichungen für  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  dar, die linear und gekoppelt sind. Dazu kommt als Konsistenzgleichung noch die Kontinuitätsgleichung

$$\vec{\nabla} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial t} \rho = 0 ,$$

denn aus  $\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (4\pi \rho - \vec{\nabla} \vec{E}) + \vec{\nabla} (\frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{E} - \vec{\nabla} \times \vec{B}) = 0$  nach (M1) und (M4) folgt bereits

$$\frac{4\pi}{c} (\vec{\nabla} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial t} \rho) = 0 .$$

Man beachte, dass die operative Definition der Felder  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  sich aus der Lorentz-Kraft  $\vec{F}_L = \rho \vec{E} + \frac{1}{c} \vec{j} \times \vec{B}$  ergibt. Direkt aus den Maxwell'schen Gleichungen ergeben sich noch die folgenden Merksätze:

- Die zeitliche Änderung eines magnetischen Feldes erzeugt ein (linksgerichtetes) elektrisches Wirbelfeld nach (M3).
- Die zeitliche Änderung eines elektrischen Feldes erzeugt ein (rechtsgerichtetes) magnetisches Wirbelfeld nach (M4).

Von nun an werden wir mit den Einheiten des Gauß-Systems weiterarbeiten.

## 9.5. Energie und Impuls des elektromagnetischen Feldes

Wir haben allein aus der empirischen Existenz einer Kraftwirkung zwischen unbewegten und bewegten Ladungen auf ein magnetisches und elektrisches Feld geschlossen, wir werden nun sehen, dass diese noch weitere aus der Mechanik bekannte Eigenschaften tragen. Man betrachte dazu zuerst den Spezialfall eines elektrischen Feldes, welches von den ruhenden Ladungen  $q_1, \dots, q_N$  bei  $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$  erzeugt wird. Dieses Feld wirkt eine Kraft auf eine zusätzliche Probeladung aus und beschleunigt diese. Es verrichtet also Arbeit, d.h. es führt insbesondere der Probeladung Energie zu - folglich muss das Feld selbst einen Energiegehalt haben.

### 9.5.1. Der Energiegehalt des elektrischen Feldes

Der Energiegehalt einer Ladungskonfiguration ist durch die Arbeit  $A$ , die aufgebracht werden muss um diese Ladungskonfiguration aufzubauen, definiert. Für eine diskrete Ladungsverteilung berechnet man die Arbeit  $A$  wie folgt:

Es seien zunächst alle Ladungen im Unendlichen und unendlich voneinander entfernt. Um nun die Ladung  $q_1$  an ihre Endposition  $\vec{r}_1$  zu bringen muss keine Arbeit verrichtet werden. Die Ladung  $q_1$  erzeugt jedoch selbst ein Potential

$$\Phi_1(\vec{r}) = \frac{q_1}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} .$$

Wird nun die Ladung  $q_2$  nach  $\vec{r}_2$  gebracht, so muss die Arbeit  $A_2$  gegen das Potential  $\Phi_1$  der ersten Ladung verrichtet werden. Das neue Potential  $\Phi_2$  ergibt sich dann aus der Summe der Einzelpotentiale, die von den Ladungen  $q_1$  und  $q_2$  erzeugt werden, gemäß dem Superpositionsprinzip. Es gilt

$$\Phi_2(\vec{r}) = \frac{q_1}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} + \frac{q_2}{|\vec{r} - \vec{r}_2|} \quad \Longrightarrow \quad A_2 = q_2 \Phi_1 = \frac{q_1 q_2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} ,$$

und fährt man iterativ mit diesem Prinzip fort, so erhält man schließlich allgemein

$$\Phi(\vec{r}) = \sum_{j=1}^N \frac{q_j}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} \quad \Longrightarrow \quad A_N = q_N \Phi_{N-1} = \sum_{j=1}^{N-1} \frac{q_N q_j}{|\vec{r}_N - \vec{r}_j|} .$$

Die Gesamtarbeit  $A$  ergibt sich dann folglich aus der Summe der einzelnen Arbeitsteile  $A_i$  für  $i = 1, \dots, N$ , sodass wir

$$A = \sum_{i=2}^N A_i = \sum_{i=2}^N \sum_{j<i} \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

erhalten. Allgemeiner ersetzt man die Summationen dann durch Integrale, und erhält so den analogen Ausdruck für die kontinuierlichen Ladungsverteilungen

$$A = \frac{1}{2} \iiint \rho(\vec{r}) \left( \iiint \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 \vec{r}' \right) d^3 \vec{r} = \frac{1}{2} \iiint \rho(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) d^3 \vec{r} .$$

Unter Verwendung der Poisson-Gleichung  $\Delta \Phi = -4\pi \rho$  erhält man dann daraus weiter

$$A = -\frac{1}{8\pi} \iiint (\Delta \Phi) \Phi d^3 \vec{r} = -\frac{1}{8\pi} \iiint \phi \vec{\nabla} \vec{\nabla} \Phi d^3 \vec{r} \stackrel{\text{P.I.}}{=} \frac{1}{8\pi} \iiint (\vec{\nabla} \Phi) (\vec{\nabla} \Phi) d^3 \vec{r} ,$$

und mit  $\vec{E} = -\vec{\nabla} \Phi$  folgt daraus dann der Term

$$A = \iiint \frac{1}{8\pi} \vec{E}^2 d^3 \vec{r} = \iiint w^{\text{el}}(\vec{r}) d^3 \vec{r}$$

für die Arbeit, wobei der Teil  $w^{\text{el}}$  als **elektrische Energiedichte** bezeichnet wird.

### 9.5.2. Die elektromagnetische Energiedichte

Man betrachte nun allgemein ein beliebiges  $\vec{E}$ - und  $\vec{B}$ -Feld, dass von  $\rho$  und  $\vec{j}$  erzeugt wird. Die Kraftdichte auf andere geladene Materie im Feld dann durch

$$\vec{F}_L = \rho(\vec{r}, t) \vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{1}{c} \vec{j}(\vec{r}, t) \times \vec{B}(\vec{r}, t)$$

gegeben. Durch diese Kraft wird Materie bewegt, z.B. in einem Volumenelement  $d^3\vec{r}$  bei  $\vec{r}$  werde diese um  $d\vec{r}$  bewegt. Dabei leistet das Feld die Arbeit pro Volumen  $dw^{\text{mat}} = \vec{F}_L(\vec{r}, t) d\vec{r}$ , woraus sich die Leistungsdichte

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}w^{\text{mat}} &= \vec{F}_L(\vec{r}, t) \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}(\vec{r}, t) \left( \rho(\vec{r}, t)\vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{1}{c}\vec{j}(\vec{r}, t) \times \vec{B}(\vec{r}, t) \right) \\ &= (\rho(\vec{r}, t)\vec{v}(\vec{r}, t))\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{j}(\vec{r}, t)\vec{E}(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

ergibt. Man betrachte nun ein beliebiges Volumen  $V$ . Die Arbeit, die das Feld auf die im Volumen  $V$  befindliche Materie leistet, ist dann gleich

$$\frac{d}{dt}w_V^{\text{mat}} = \frac{d}{dt} \iiint_V w^{\text{mat}}(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = \iiint_V \vec{j}\vec{E} d^3\vec{r}.$$

Nach der dritten und vierten Maxwell'schen Gleichung gilt

$$\vec{B} \cdot \text{rot } \vec{E} + \frac{1}{c}\vec{B} \frac{\partial}{\partial t}\vec{B} = 0 \quad \text{und} \quad \vec{E} \cdot \text{rot } \vec{B} - \frac{4\pi}{c}\vec{j}\vec{E} - \frac{1}{c}\vec{E} \frac{\partial}{\partial t}\vec{E} = 0$$

aus denen sich insbesondere die Identität

$$\frac{1}{c} \left( \vec{E}\dot{\vec{E}} + \vec{B}\dot{\vec{B}} \right) + \vec{B} \text{rot } \vec{E} - \vec{E} \text{rot } \vec{B} + \frac{4\pi}{c}\vec{j}\vec{E} = 0$$

ergibt. Allgemein gilt  $\vec{\nabla}(\vec{E} \times \vec{B}) = \vec{B} \text{rot } \vec{E} - \vec{E} \text{rot } \vec{B}$ , denn komponentenweise betrachtet gilt die Gleichheit

$$\vec{\nabla}(\vec{E} \times \vec{B})_i = \nabla_i \epsilon_{ijk} E_j B_k = \epsilon_{ijk} (\nabla_i E_j) B_k + \epsilon_{ijk} E_j \nabla_i B_k = \epsilon_{kij} B_k \nabla_i E_j - \epsilon_{jik} E_j \nabla_i B_k,$$

sodass Einsetzen dann die Gleichheit

$$\begin{aligned} \frac{1}{2c} \frac{d}{dt} (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) + \vec{\nabla}(\vec{E} \times \vec{B}) + \frac{4\pi}{c}\vec{j}\vec{E} &= 0 \\ \iff \frac{d}{dt} \frac{1}{8\pi} (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) &= -\vec{\nabla} \frac{c}{4\pi} (\vec{E} \times \vec{B}) - \vec{j}\vec{E} \end{aligned}$$

ergibt. Über die ursprüngliche Leistungsdichte erhalten wir damit dann die am Volumen  $V$  verrichtete Arbeit

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \iiint_V \frac{1}{8\pi} (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) d^3\vec{r} &= - \iiint_V \vec{\nabla} \frac{c}{4\pi} (\vec{E} \times \vec{B}) d^3\vec{r} - \iiint_V \vec{j}\vec{E} d^3\vec{r} \\ &= - \oint_{S(V)} \frac{c}{4\pi} (\vec{E} \times \vec{B}) d\vec{f} - \iiint_V \vec{j}\vec{E} d^3\vec{r}. \end{aligned}$$

Im Falle eines unendlich großen Volumens  $V \rightarrow \mathbb{R}^3$  und dem mindestens quadratischen Abfall  $\vec{E}, \vec{B} \propto \frac{1}{r^2}$  für  $r \rightarrow \infty$  geht dieser Ausdruck dann über in

$$\frac{d}{dt} \iiint_V \frac{1}{8\pi} (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) d^3\vec{r} = - \iiint_V \vec{j}\vec{E} d^3\vec{r} = - \frac{d}{dt} w_V^{\text{mat}}$$

sodass für wir damit als Integranden schließlich den Ausdruck

$$\iiint_V \frac{1}{8\pi} (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) d^3\vec{r} + w_V^{\text{mat}} = \text{konst}$$

erhalten, somit ist  $w^{\text{em}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{8\pi}(\vec{E}^2 + \vec{B}^2)$  die **Energiedichte des elektromagnetischen Feldes**.

### 9.5.3. Poynting-Vektor des Energieflusses

Nachdem wir den elektromagnetischen Feldern auch einen Energiebegriff zugeordnet haben, stellt sich die Frage, wie sich diese Energie im Lauf der Zeit verändern kann. Dazu definieren wir den sogenannten **Poynting-Vektor**

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi} (\vec{E} \times \vec{B}) ,$$

den man als Vektor des Energieflusses interpretieren kann. Er beschreibt also die Energie, welche pro Zeiteinheit durch eine Randfläche fließt. Folglich gilt das **Poynting-Theorem**

$$\frac{d}{dt} (w_V^{\text{mat}} + w_V^{\text{em}}) = - \iiint_V \vec{\nabla} \cdot \vec{S} d^3\vec{r} ,$$

wobei für die Energie in der Materie und die elektromagnetische Energie

$$\frac{d}{dt} w_V^{\text{mat}} = \iiint_V \vec{j} \cdot \vec{E} d^3\vec{r} \quad \text{und} \quad w_V^{\text{em}} = \frac{1}{8\pi} \iiint_V (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) d^3\vec{r}$$

gilt. Das Poynting-Theorem lässt sich auch über die Umformung

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (w_V^{\text{mat}} + w_V^{\text{em}}) &= - \iiint_V \vec{\nabla} \cdot \vec{S} d^3\vec{r} = - \oint_{S(V)} \vec{S} d\vec{f} \\ &\iff \iiint_V \vec{j} \cdot \vec{E} d^3\vec{r} + \iiint_V \frac{dw_V^{\text{em}}}{dt} d^3\vec{r} = - \oint_{S(V)} \vec{S} d\vec{f} \end{aligned}$$

in einer einfacher zu verwendenden differentiellen Form

$$\vec{j} \cdot \vec{E} + \frac{dw_V^{\text{em}}}{dt} + \text{div} \vec{S} = 0$$

formulieren. Wenn nun wieder das Volumen  $V$  beliebig groß wird und  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  quadratisch abfallen, so gilt

$$\oint_{S(V)} \vec{S} d\vec{f} = 0 \quad \implies \quad \frac{d}{dt} (w_V^{\text{mat}} + w_V^{\text{em}}) = 0 .$$

### 9.5.4. Elektromagnetischer Impuls und Maxwell'scher Spannungstensor

Als vorläufig letzten Aspekt der Elektrodynamik betrachten wir den elektromagnetischen Impuls, wofür man die Newton'sche Gleichung  $\vec{F} = \frac{d\vec{p}^{\text{mat}}}{dt}$  und  $\vec{F} = \rho\vec{E} + \frac{1}{c}\vec{j} \times \vec{B}$  gleichsetzt. Es gilt dann durch Umformung der ersten und vierten Maxwell-Gleichung

$$\begin{aligned} \vec{F} &= \vec{E} \frac{\text{div} \vec{E}}{4\pi} + \frac{1}{4\pi} \left( \text{rot} \vec{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right) \times \vec{B} \\ &= \frac{1}{4\pi} \left[ \vec{E} \cdot \vec{\nabla} \vec{E} + (\vec{\nabla} \times \vec{B}) \times \vec{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\vec{E} \times \vec{B}) - \vec{E} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) \right] \\ &= \frac{1}{4\pi} \left[ \vec{E} \cdot \vec{\nabla} \vec{E} - \vec{E} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) - \vec{B} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) - \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial \vec{S}}{\partial t} \right] \end{aligned}$$

Für das mittlere Doppelkreuzprodukt  $\vec{E} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E})$  gilt dann komponentenweise

$$\begin{aligned} \left[ \vec{E} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) \right]_i &= \epsilon_{ijk} E_j \epsilon_{kst} \nabla_s E_t = \epsilon_{ijk} \epsilon_{kst} E_j \nabla_s E_t = (\delta_{is} \delta_{jt} - \delta_{it} \delta_{js}) E_j \nabla_s E_t \\ &= \delta_{jt} E_j \nabla_i E_t - \delta_{js} E_j \nabla_s E_t = E_j \nabla_i E_j - E_j \nabla_j E_i = \frac{1}{2} \nabla_i (\vec{E}^2) - E_j \nabla_j E_i . \end{aligned}$$

Differenziert man nun auf der anderen Seite den elektromagnetischen Impuls nach der Zeit, so ergibt sich

$$\frac{dp_i^{\text{mat}}}{dt} = \frac{1}{4\pi} \nabla_j \left( E_i E_j + B_i B_j - \frac{1}{2} \delta_{ij} (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) \right) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial S_i}{\partial t} .$$

Zur Verkürzung dieses Terms definiert man den **Maxwellschen Spannungstensor** durch

$$T_{ij} = \frac{1}{4\pi} \left( E_i E_j + B_i B_j - \frac{1}{2} \delta_{ij} (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) \right) .$$

Setzt man dann weiter  $\vec{p}^{\text{em}} = \frac{1}{c^2} \vec{S}$ , so gilt der Impulserhaltungssatz

$$\frac{\partial}{\partial t} (p_i^{\text{mat}} + p_i^{\text{em}}) = \nabla_j T_{ij}$$

des elektromagnetischen Impulses. Es folgt sofort die integrale Darstellungsform

$$\frac{d}{dt} \iiint_V (p_i^{\text{mat}} + p_i^{\text{em}}) d^3\vec{r} = \iiint_V \nabla_j T_{ij} d^3\vec{r} = \oint_{S(V)} T_{ij} df_j ,$$

folglich gibt der Maxwellsche Spannungstensor den Impulsfluss durch den Rand  $S(V)$  des Volumens an, und  $T_{ij} df_j$  ist die  $i$ -te Flächenkomponente der Kraft, die auf  $df_i$  wirkt.

## 9.6. Interpretation des elektromagnetischen Felds

In den vorangegangenen Abschnitten haben wir sehr viele Eigenschaften der elektromagnetischen Felder  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  gesammelt, aber bisher noch nicht betrachtet, wie dieses völlig immaterielle Objekt „Feld“ überhaupt zu verstehen ist. Das elektromagnetische Feld stellt eigene Freiheitsgrade in sich dar. Die Koordinaten dieses Freiheitsgrades sind die Werte des Feldes  $(\vec{E}(\vec{r}, t), \vec{B}(\vec{r}, t))$  an den verschiedenen Raum- und Zeitpunkten, d.h. das Feld ist ein System mit kontinuierlich vielen Freiheitsgraden.

Man kann sich dieses aber auch anschaulich als den Limes von Feldwerten an diskreten Raumpunkten vorstellen. Der Lagrange-/Hamilton-Formalismus für die Freiheitsgrade und das Noether-Theorem liefern dann die Feldenergie, den Feldimpuls und den Felddrehimpuls als Erhaltungsgrößen.

# 10. Lösungen der Maxwell-Gleichungen

## 10.1. Entkopplung der Maxwell-Gleichungen mittels Potentialen

### 10.1.1. Potentialformulierung

Nachdem wir im vorangegangenen Kapitel die vollständigen Maxwell-Gleichungen aufgestellt haben, sollen sie nun gelöst werden. Dazu ist es zunächst einmal nötig, diese partiellen Differentialgleichungen zu entkoppeln, was durch die Verwendung von Potentialen geschieht. Aus dem zweiten Gesetz  $\text{div } \vec{B} = 0$  folgt, dass man  $\vec{B}$  als  $\vec{B} = \text{rot } \vec{A}$  für ein geeignetes Vektorpotential  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  darstellen kann, denn mit  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$  folgt

$$\vec{\nabla} \vec{B} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \times \vec{A}) = 0 .$$

Dabei ist das Vektorpotential  $\vec{A}$  nicht eindeutig, sondern nur bis auf Eichtransformationen der Form  $\vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} f$  für eine beliebige Funktion  $f$  bestimmt, denn Einsetzen zeigt

$$\vec{B}' = \vec{\nabla} \times \vec{A}' = \vec{\nabla} \times \vec{A} + \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} f = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B} .$$

Man betrachte dann das elektrische Feld  $\vec{E}$ . Aus der dritten Maxwell-Gleichung (M3) folgt

$$\text{rot } \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{B} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \text{rot } \vec{A} = -\frac{1}{c} \text{rot} \left( \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} \right) \iff \text{rot} \left( \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} \right) = 0 ,$$

sodass sich das Vektorfeld  $\vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}$  als Gradientenfeld

$$\vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} = -\vec{\nabla} \Phi \iff \vec{E} = -\vec{\nabla} \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}$$

für ein geeignetes Skalarpotential  $\Phi(\vec{r}, t)$  darstellen lässt. Damit sind die beiden elektromagnetischen Felder  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  mittels der Potentiale  $\vec{A}$  und  $\Phi$  dargestellt.

Man beachte aber, dass die Eichtransformation des Vektorpotentials  $\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla} f$  alleine das elektrische Feld  $\vec{E}$  um  $\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} f$  ändern würde. Damit auch  $\vec{E}$  invariant bleibt, muss man bei der obigen Eichtransformation zusätzlich auch das Skalarpotential  $\Phi$  durch  $\Phi \rightarrow \Phi' = \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} f$  mittransformieren, denn es gilt dann

$$\vec{E} \rightarrow \vec{E}' = -\vec{\nabla} \Phi' - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}' = -\vec{\nabla} \Phi + \frac{1}{c} \vec{\nabla} \frac{\partial}{\partial t} f - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} f = -\vec{\nabla} \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} = \vec{E} .$$

Folglich bleiben also für ein beliebiges  $f(\vec{r}, t)$  unter der **gemeinsamen Eichtransformation der Potentiale**

$$\Phi \rightarrow \Phi' = \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} f \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} f$$

die elektromagnetischen Felder  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  ungeändert. Folglich müssen auch die Maxwell-Gleichungen für die Potentiale  $\Phi$  und  $\vec{A}$  unter dieser Eichtransformation invariant sein.

Die Maxwell-Gleichungen (M2) und (M3) sind bereits alleine durch den Potentialansatz erfüllt. Für (M1) hat man  $\vec{\nabla} \vec{E} = 4\pi\rho$ , sodass in Potentialform das Gesetz (M1')

$$\vec{\nabla} \left( -\vec{\nabla}\Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} \right) = -\Delta\Phi - \frac{1}{c} \vec{\nabla} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} = 4\pi\rho$$

folgt. Für (M4) erhält man aus  $\vec{\nabla} \times \vec{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{E} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}$  durch Einsetzen

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left( -\vec{\nabla}\Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A} \right) &= \vec{\nabla}(\vec{\nabla}\vec{A}) - \Delta\vec{A} + \frac{1}{c} \vec{\nabla} \frac{\partial}{\partial t} \Phi + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{A} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} \\ \iff \left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \vec{A} + \vec{\nabla} \left( \vec{\nabla}\vec{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Phi \right) &= \frac{4\pi}{c} \vec{j} \\ \iff \square \vec{A} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} - \vec{\nabla} \left( \vec{\nabla}\vec{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Phi \right) \end{aligned}$$

die entsprechende Potentialgleichung (M4'), wobei der Differentialoperator  $\square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$  als **Quabla** oder **D'Alembert-Operator** bezeichnet wird.

### 10.1.2. Entkopplung

Aus den Maxwell-Gleichungen (M1) und (M4) für die Felder  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  haben wir jetzt zwei Gleichungen (M1') und (M4') für die Potentiale  $\Phi$  und  $\vec{A}$  erhalten - diese sind aber noch immer nicht entkoppelt. Wir können nun aber die Eichfreiheit der Potentiale verwenden, d.h. man wähle die Eichung der Potentiale so, dass für die umgezeichneten Potentiale  $\Phi'$  und  $\vec{A}'$  die Bedingung

$$\vec{\nabla} \vec{A}' + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Phi' = 0 \quad (10.1)$$

erfüllt ist. Die Frage, ist dann welche Bedingungen die Eichfunktion  $f(\vec{r}, t)$  erfüllen muss, damit die geeichten Potentiale der vorigen Bedingung genügen. Einsetzen liefert die Bedingung

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} \vec{\nabla} \vec{A}' + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Phi' = \vec{\nabla}(\vec{A} + \vec{\nabla}f) + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left( \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} f \right) = \vec{\nabla} \vec{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Phi + \Delta f - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} f \\ \iff \square f &= \vec{\nabla} \vec{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Phi, \end{aligned}$$

jede Lösung dieser inhomogenen Differentialgleichung zweiter Ordnung ist somit eine mögliche Eichung. Nachdem eine solche Eichung gewählt ist - beispielsweise die Lorentz-Eichung mit  $\vec{\nabla} \vec{A}^L = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Phi^L$ , nehmen die Potential-Maxwell-Gleichungen (M1') und (M2') die Form

$$(M1') \quad \square \Phi^L = 4\pi\rho \quad (M4') \quad \square \vec{A}^L = \frac{4\pi}{c} \vec{j}$$

an. Das System ist jetzt entkoppelt und besitzt die Struktur der inhomogenen Wellengleichung. Es sei dabei noch einmal ausdrücklich darauf hingewiesen, dass diese beiden entkoppelten Gleichungen äquivalent zu den vier im letzten Kapitel hergeleiteten Maxwell-Gleichungen sind - aber nur in der Lorentz-Eichung, d.h. nur jede Lösungen, welche auch die Eichbedingung (10.1) erfüllen, sind physikalisch richtig.

Manchmal wird aber statt der Lorentz-Eichung auch eine andere Eichung gewählt, etwa die Coulomb-Eichung mit  $\vec{\nabla} \vec{A}^C = 0$ . In dieser Eichung erhält man dann

$$\Delta \Phi^C = -4\pi\rho \quad \square \vec{A}^C = \frac{4\pi}{C} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}_{\text{tr}} \quad \text{mit} \quad \vec{j}_{\text{tr}} = \vec{j} - \frac{1}{4\pi} \vec{\nabla} \frac{\partial}{\partial t} \Phi,$$

wie schnell nachzurechnen ist. Für  $\Delta\Phi^C = -4\pi\rho$  ist uns die Lösung bereits durch

$$\Phi^C = \iiint \frac{\rho(\vec{r}', t)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}'$$

bekannt. Unabhängig von der Eichung gelten für die Felder  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  die Gleichungen

$$\square\vec{E} = -4\pi\left(\vec{\nabla}\rho + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\vec{j}}{\partial t}\right) \quad \square\vec{B} = \frac{4\pi}{c}\text{rot}\vec{j},$$

denn aus der Maxwell-Gleichung  $\text{rot}\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}$  folgt  $\text{rot}\text{rot}\vec{E} = -\frac{1}{c}\text{rot}\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}$ . Die Rotation der Rotation lässt sich über  $\vec{\nabla}\times(\vec{\nabla}\times\vec{E}) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla}\cdot\vec{E}) - (\vec{\nabla}\vec{\nabla})\vec{E}$  dann in

$$\begin{aligned} \text{grad}\text{div}\vec{E} - \Delta\vec{E} &= -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\text{rot}\vec{B} \iff 4\pi\vec{\nabla}\rho - \Delta\vec{E} = -\frac{4\pi}{c^2}\frac{\partial\vec{j}}{\partial t} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\vec{E} \\ \iff \square\vec{E} &= -4\pi\vec{\nabla}\rho - \frac{4\pi}{c^2}\frac{\partial\vec{j}}{\partial t} \end{aligned}$$

umformen. Für die allgemeine Lösung einer inhomogenen Wellengleichung  $\square\varphi(\vec{r}, t) = 4\pi g(\vec{r}, t)$  gilt die Zerlegung

$$\varphi(\vec{r}, t) = \varphi_{\text{hom}} + \varphi_{\text{ih}},$$

d.h. die Summe aus einer allgemeinen homogenen und einer speziellen inhomogenen Lösung. In den folgenden Abschnitten werden wir nun diese homogenen und inhomogenen Lösungen finden.

## 10.2. Die freie Wellengleichung und ebene Wellen als Lösungen

### 10.2.1. Allgemeine Lösung von Wellengleichungen

Durch  $\square\varphi = 0$  sind die Maxwell-Gleichungen im Vakuum gegeben, bzw. in jedem Teil des Raums, wo keine Ladungen oder Stromdichten zu finden sind. Diese homogenen Differentialgleichungen wollen wir nun lösen.

- *Räumlich eindimensional:* Für eine Raumdimension erhalten wir  $\varphi = \varphi(x, t)$ , also die Differentialgleichung

$$\square\varphi = \left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\varphi(x, t) = 0.$$

Für jede beliebige eindimensionale Funktion  $f$  und  $g$  ist sind dann die Funktionen

$$\varphi(x, t) = f(\xi) \quad \text{mit} \quad \xi = x - ct \quad \quad \varphi(x, t) = g(\eta) \quad \text{mit} \quad \eta = x + ct$$

Lösungen, denn es gilt unter Verwendung der Kettenregel der Differentiation

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}f(\xi) &= \frac{\partial}{\partial\xi}f(\xi)\frac{\partial\xi}{\partial t} = \frac{d}{d\xi}f(\xi)(-c) = -cf' \implies \frac{\partial^2}{\partial t^2}f(\xi) = c^2f'' \\ \frac{\partial}{\partial x}f(\xi) &= \frac{\partial}{\partial\xi}f(\xi)\frac{\partial\xi}{\partial x} = \frac{d}{d\xi}f(\xi) = f' \implies \frac{\partial^2}{\partial x^2}f(\xi) = f'' \end{aligned}$$

für die einzelnen Teile, also folgt

$$\square\varphi = \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t^2}f - \frac{\partial}{\partial x^2}f = f'' - f'' = 0.$$

Wie lässt sich die Form dieser Lösung nun physikalisch interpretieren? Es handelt sich dabei um eine durch die frei wählbare Funktion  $f$  bestimmte (eindimensionale) Feldverteilung, die zum Zeitpunkt  $t = 0$  durch  $\varphi(x, 0) = f(x)$  gegeben ist. Im Laufe der Zeit wandert diese Verteilung mit der Geschwindigkeit  $c$  in positive  $x$ -Richtung, ohne ihre Gestalt zu verändern. Dies ist daran zu erkennen, dass ein zur Zeit  $t = 0$  festgelegter Feldwert  $f_0$  bei  $x_0$  nach einer Zeit  $t > 0$  bei  $x = x_0 + ct$  angelangt ist, denn für dieses  $x$  und dieses  $t$  gilt

$$f(x - ct) = f(x_0 + ct - ct) = f(x_0) = f_0 .$$

Im Fall von  $\varphi(x, t) = g(\eta)$  handelt es sich daher um eine mit der Geschwindigkeit  $c$  nach links laufende Feldverteilung. Eine allgemeine Lösung der homogenen eindimensionalen Wellengleichung ist dann durch das Superpositionsprinzip  $\varphi(x, t) = f(\xi) + g(\eta)$  gegeben, wobei Linearfaktoren direkt in die Funktionen  $f$  und  $g$  aufgehen.

- *Räumlich dreidimensional:* Für drei Raumdimensionen wird die Differentialgleichung für  $\varphi = \varphi(\vec{r}, t)$  zu der (aus mathematischer Sicht) ungleich komplizierteren Variante

$$\square\varphi = \left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi(\vec{r}, t) = 0 .$$

Auch hier können wir einen ähnlichen Ansatz wie im Eindimensionalen verwenden. Für jede beliebige Funktion  $f(\vec{r})$  und  $g(\vec{r})$  ist dann

$$\varphi(\vec{r}, t) = f(\xi) \quad \text{mit} \quad \xi = \hat{n}\vec{r} - ct \quad \varphi(\vec{r}, t) = g(\eta) \quad \text{mit} \quad \eta = \hat{n}\vec{r} + ct$$

für einen beliebigen Einheitsvektor  $\hat{n}$  eine Lösung, die sogenannte **ebene Wellen-Lösung**. Die Fläche konstanter Phase  $C$  ist durch die Gleichung  $\hat{n}\vec{r} - ct = C \iff \hat{n}\vec{r} = C + ct$  gegeben, dieses ist eine Ebene orthogonal zu  $\hat{n}$ , die sich mit der Geschwindigkeit  $c$  in Richtung  $\hat{n}$  bewegt.

Eine andere Klasse von Lösungen sind die **Kugelwellen**, bei denen die Flächen konstanter Phase gerade konzentrische Sphären um einen Ursprungspunkt sind. Man erhält sie, indem man Lösungen der Form  $\varphi(\vec{r}, t) = h(|\vec{r}|, t) = h(r, t)$  sucht. Für den Gradienten von  $h = h(r, t)$  gilt

$$\vec{\nabla}h(r, t) = \frac{\partial}{\partial r}h(r, t)\vec{\nabla}r = h' \frac{\vec{r}}{r} = h' \hat{r} ,$$

wobei eine genaue Herleitung des Gradienten in den verwendeten Kugelkoordinaten im mathematischen Anhang zu finden ist. Der Laplace-Operator angewendet auf  $h$  liefert dann

$$\Delta h = \vec{\nabla}\vec{\nabla}h = \vec{\nabla}(h'\hat{r}) = (\vec{\nabla}h')\hat{r} + h'\vec{\nabla}\frac{\vec{r}}{r} = h''\hat{r}\hat{r} + 2h'\frac{1}{r} = h'' + 2h'\frac{1}{r} = \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) h ,$$

also ergibt sich für die homogene Wellengleichung für  $h$  dann

$$\begin{aligned} \square h(r, t) &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} h - \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) h = \frac{1}{r} \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} (rh) - \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rh) \\ &= \frac{1}{r} \left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) (rh(r, t)) \stackrel{!}{=} 0 \end{aligned}$$

Somit ist  $h(r, t)$  eine Lösung der dreidimensionalen Wellengleichung, wenn  $rh(r, t)$  eine Lösung der eindimensionalen Wellengleichung ist, also von der allgemeinen Gestalt

$$rh(r, t) = f(r - ct) + g(r + ct) \quad \text{bzw.} \quad h(r, t) = \underbrace{\frac{1}{r}f(r - ct)}_{\text{auslaufende Kugelwelle}} + \underbrace{\frac{1}{r}g(r + ct)}_{\text{einlaufende Kugelwelle}} .$$

### 10.2.2. Ebene harmonische Wellen

Spezielle ebene Wellen oder Kugelwellen sind die sogenannten harmonischen (also monochromatischen und periodischen) ebenen Wellen bzw. Kugelwellen. Dazu sei  $k$  eine beliebige reelle Größe. Man definiere dann

$$k\xi = k\hat{n}\vec{r} - kct =: \vec{k}\vec{r} - \omega t \quad \text{mit} \quad \vec{k} = k\hat{n}, \quad \omega = kc$$

und wählen als  $f(\xi)$  die Funktion  $f(\xi) = e^{\pm ik\xi} = \varphi(\vec{r}, t) = \exp(\pm i(\vec{k}\vec{r} - \omega t))$ . Die Wellengleichung ist eine Differentialgleichung mit reellen Koeffizienten, also ist mit jeder komplexen Lösung auch die komplex konjugierte davon wieder eine Lösung. Aufgrund der Linearität der homogenen Gleichung sind dann auch wieder Real- und Imaginärteil eine komplexen Lösung einzelne Lösungen der Differentialgleichung. Wie wir bereits in der Mechanik erwähnt haben, wählt man dann von komplexen Lösungen folglich den Realteil als die zugehörige physikalische Lösung aus.

Es bleibt die Frage zu klären, wie die Lösung  $\varphi(\vec{r}, t) = \exp(\pm i(\vec{k}\vec{r} - \omega t))$  physikalisch zu interpretieren ist. Für einen festen Zeitpunkt, etwa  $t = 0$ , erhält man aus  $\exp(i\vec{k}\vec{r}) \rightarrow \cos(\vec{k}\vec{r})$  eine räumliche Verteilung. Sei beispielsweise  $\vec{k} = (0, 0, k)$ , dann hat  $\cos(kz)$  eine räumliche Periodizität von  $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ , denn

$$\cos(k(z + \lambda)) = \cos(kz + 2\pi) = \cos(kz) .$$

Andererseits erhält man für festes  $r$ , etwa  $r = 0$ , also  $\exp(i\omega t) \rightarrow \cos(\omega t)$  einen periodischen zeitlichen Ablauf mit einer Periode  $T = \frac{2\pi}{\omega}$ .

Somit beschreibt  $\varphi(\vec{r}, t) = \exp(\pm i(\vec{k}\vec{r} - \omega t))$  ein räumlich und zeitlich unendlich ausgedehntes periodisches Wellenfeld mit der räumlichen Periode  $\lambda = \frac{2\pi}{k}$  und zeitlicher Periode  $T = \frac{2\pi}{\omega}$ , welches sich in Richtung  $\hat{n}$  mit der Geschwindigkeit  $c$  weiterbewegt. Analoges gilt auch für harmonische Kugelwellen mit  $h(r, t) = \frac{1}{r}f(\xi) = \frac{1}{r}\exp(i(kr - \omega t))$ .

Es soll nicht unerwähnt bleiben, dass man die Lösungsmannigfaltigkeit der harmonischen ebenen Wellen auch durch einen ganz anderen Ansatz erhalten kann. Dazu betrachte man noch einmal die zugehörige partielle Differentialgleichung

$$\square\varphi = \left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \varphi = 0 ,$$

und verwende dann den Separations-Ansatz  $\varphi(\vec{r}, t) = \varphi(x, y, z, t) = X(x)Y(y)Z(z)T(t)$ , d.h. man erhält die Gleichung

$$\frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} + \frac{Z''}{Z} - \frac{1}{c^2} \frac{T''}{T} = -k_x^2 - k_y^2 - k_z^2 - \omega^2 = 0 .$$

Damit erhält man dann für jede der räumlichen Koordinatenfunktionen eine eigene, einfach zu lösende Differentialgleichung, etwa im Falle der  $x$ -Koordinate

$$\frac{X''}{X} = -k_x^2 \quad \implies \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} X = -k_x^2 X(x) .$$

Als alternativen Lösungsansatz für die Differentialgleichung wähle man nun den Ansatz

$$\varphi(\vec{r}, t) = \exp(i(\vec{k}\vec{r} \mp \omega t)) \quad \text{mit} \quad \omega = c|\vec{k}|$$

für den Vektor  $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ . Bei gegebenem  $\vec{k}$  ist die komplexe Lösung dann durch

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = A_{\vec{k}} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} + B_{\vec{k}} e^{i(\vec{k}\vec{r} + \omega t)}$$

gegeben, sodass wir schließlich als physikalische Lösung einer einzelnen harmonischen ebenen Welle

$$\begin{aligned} \varphi_{\vec{k}}^{\text{phy}}(\vec{r}, t) = & \Re [(\Re A_{\vec{k}} + i \Im A_{\vec{k}})(\cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t) + i \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t)) \\ & + (\Re B_{\vec{k}} + i \Im B_{\vec{k}})(\cos(\vec{k}\vec{r} + \omega t) + i \sin(\vec{k}\vec{r} + \omega t))] \end{aligned}$$

erhalten. Die allgemeinste Lösung ist dann durch eine (kontinuierliche) Linearkombination ebener Wellen durch ein Wellenpaket in folgender Form gegeben:

$$\varphi(\vec{r}, t) = \iiint d^3\vec{k} A(\vec{k})e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} + B(\vec{k})e^{i(\vec{k}\vec{r}+\omega t)} .$$

### 10.2.3. Freie Wellengleichungen der Felder, elektromagnetische Wellen

Natürlich lässt sich die Wellengleichung auch auf die Felder  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  anwenden, d.h. wir betrachten die Gleichungen  $\square\vec{E} = 0$  und  $\square\vec{B} = 0$ . Als Lösungsansatz wählen wir dann wieder ebene harmonische Wellen, also

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} \quad \text{und} \quad \vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{B}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} ,$$

wobei zunächst  $\vec{E}_0, \vec{B}_0 \in \mathbb{R}^3$  frei wählbare Amplitudenfaktoren sind. Eingesetzt in die Wellengleichungen ergeben sich dann aus (M3) und (M4) die Beziehungen

$$\omega = \omega(k) = c|\vec{k}| \quad \text{und} \quad \bar{\omega} = \bar{\omega}(\bar{k}) = c|\bar{k}| .$$

Weitere Informationen über  $\vec{E}_0, \vec{B}_0, \vec{k}$  und  $\bar{k}$  folgen ebenfalls aus den homogenen Maxwellgleichungen:

- (M1): Aus  $\vec{\nabla}\vec{E} = 0$  folgt durch Einsetzen  $i\vec{k}\vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} = 0$ , also  $\vec{k}\vec{E}_0 = 0$ . Folglich stehen also  $\vec{k} \perp \vec{E}_0$  senkrecht aufeinander.
- (M2): Völlig analog folgert man aus  $\vec{\nabla}\vec{B} = 0$ , dass  $\vec{k} \perp \vec{B}_0$  gilt.
- (M3): Aus der dritten homogenen Maxwell-Gleichung ergibt sich nach Einsetzen

$$\begin{aligned} \text{rot } \vec{E} = \vec{\nabla} \times [\vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}] &= i(\vec{k} \times \vec{E}_0) e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} \\ &= -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{B}_0 \left( -i\omega e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} \right) , \end{aligned}$$

also folgt  $\vec{k} = \bar{k}$  und  $\omega = \bar{\omega}$  und  $\vec{k} \times \vec{E}_0 = \frac{\omega}{c} \vec{B}_0$ . Somit haben  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  die gleiche Phase und die Ausrichtungsvektoren stehen  $\vec{E}_0 \perp \vec{B}_0$  zueinander.

Wegen  $|\vec{k}| = \frac{\omega}{c}$ , wie wir schon oben festgestellt haben, folgt außerdem  $|\vec{E}_0| = |\vec{B}_0|$ , insgesamt erhalten wir also bei einem gegebenen Vektor  $\vec{k}$  die Eigenschaften

$$|\vec{E}| = |\vec{B}| \quad \vec{E}_0 \perp \vec{B}_0 \quad \vec{E}_0 \perp \vec{k} \quad \vec{B}_0 \perp \vec{k} .$$

Wählen wir nun  $\vec{k}$  beispielsweise in  $z$ -Richtung, so erhalten wir folglich für die beiden Wellen

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(kz-\omega(k)t)} \quad \vec{B} = \vec{B}_0 e^{i(kz-\omega(k)t)} .$$

Wegen der Orthogonalität  $\vec{E}_0 \perp \vec{k} = \hat{z}$  gilt dann

$$\vec{E}_0 = E_{0x}\hat{x} + E_{0y}\hat{y} = \varepsilon_x e^{i\varphi}\hat{x} + \varepsilon_y e^{i(\varphi+\delta)}\hat{y}$$

mit  $\varepsilon_x = |E_{0x}|$  und  $\varepsilon_y = |E_{0y}|$ . Durch analoge Überlegungen findet man dann für den magnetischen Vorfaktor  $\vec{B}_0$  die Beziehung

$$\vec{B}_0 = B_{0x}\hat{x} + B_{0y}\hat{y} = (-E_{0y})\hat{x} + (E_{0x})\hat{y} .$$

Man beachte nun, dass wir bisher mit komplexen Feldern gearbeitet haben, bisher sind  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  also keine physikalischen Felder. Durch komplexe Konjugation und das Superpositionsprinzip ist aber wieder der Realteil eine gültige physikalische Lösung, sodass wir

$$\begin{aligned} \vec{E}^{\text{phy}} &= \Re \left[ \vec{E}_0 e^{i(kz - \omega t)} \right] = \Re \left[ (\varepsilon_x e^{i\varphi}\hat{x} + \varepsilon_y e^{i(\varphi+\delta)}\hat{y}) e^{i(kz - \omega t)} \right] \\ &= \varepsilon_x \cos(kz - \omega t + \varphi)\hat{x} + \varepsilon_y \cos(kz - \omega t + \varphi + \delta)\hat{y} = E_x^{\text{phy}}\hat{x} + E_y^{\text{phy}}\hat{y} \\ \vec{B}^{\text{phy}} &= B_x^{\text{phy}}\hat{x} + B_y^{\text{phy}}\hat{y} = (-E_y^{\text{phy}})\hat{x} + E_x^{\text{phy}}\hat{y} \end{aligned}$$

für die physikalischen ebenen Wellen-Felder erhalten. Betrachten wir dann die zugehörige Energiedichte

$$\begin{aligned} w(\vec{r}, t) &= \frac{1}{8\pi} \left( \vec{E}_{\text{phy}}^2 + \vec{B}_{\text{phy}}^2 \right) = \frac{1}{8\pi} \left[ (E_x^{\text{phy}})^2 + (E_y^{\text{phy}})^2 + (-E_y^{\text{phy}})^2 + (E_x^{\text{phy}})^2 \right] \\ &= \frac{1}{4\pi} \left[ (E_x^{\text{phy}})^2 + (E_y^{\text{phy}})^2 \right] = \frac{1}{4\pi} \left[ \varepsilon_x^2 \cos^2(kz - \omega t + \varphi) + \varepsilon_y^2 \cos^2(kz - \omega t + \varphi + \delta) \right] , \end{aligned}$$

so ergibt sich nach einer Mittelung über eine Zeitperiode  $w(\vec{r}, t) = \frac{1}{8\pi}(\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2)$ . Für den zugehörigen Poynting-Vektor der physikalischen Felder gilt

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi} \left( \vec{E}^{\text{phy}} \times \vec{B}^{\text{phy}} \right) = \hat{k} \frac{c}{4\pi} \left[ (E_x^{\text{phy}})^2 + (E_y^{\text{phy}})^2 \right] = \hat{k} c w(\vec{r}, t) ,$$

sodass sich für den elektromagnetischen Impuls  $\vec{p}_{\text{em}} = \frac{1}{c^2} \vec{S} = \hat{k} \frac{1}{c} w(\vec{r}, t)$  ergibt. Beide Größen sind also direkt mit der Energiedichte verknüpft.

#### 10.2.4. Polarisation

Als nächsten Aspekt untersuchen wir die Polarisation einer ebenen monochromatischen Welle. Diese ist per Definition durch das Richtungsverhalten des  $\vec{E}^{\text{phy}}$ -Vektors bestimmt, also das Verhalten von  $\vec{E}_0^{\text{phy}}$  in Abhängigkeit von Raum und Zeit. Dazu verwenden wir wieder die bereits bekannte physikalische Darstellung

$$\vec{E}^{\text{phy}}(\vec{r}, t) = \hat{x}\varepsilon_x \cos(kz - \omega t + \varphi) + \hat{y}\varepsilon_y \cos(kz - \omega t + \varphi + \delta)$$

des elektrischen Feldes. Die Polarisation wird dann offensichtlich durch die Phasenverschiebung  $\delta$  und das Amplitudenverhältnis  $\frac{\varepsilon_x}{\varepsilon_y}$  bestimmt. Durch Kombination dieser Größen erhält man so folgende mögliche Polarisationen:

- **Lineare Polarisation:** Hier ist  $\delta = 0$  und  $\varepsilon_x$  sowie  $\varepsilon_y$  beliebig, also gilt

$$\vec{E}^{\text{phy}}(\vec{r}, t) = (\varepsilon_x \hat{x} \pm \varepsilon_y \hat{y}) \cos(kz - \omega t + \varphi) .$$

Das elektrische Feld schwingt dabei in der festen Richtung  $\tan \alpha = \pm \frac{\varepsilon_x}{\varepsilon_y}$ .

- **Elliptische Polarisation:** Für  $\delta = \pm \frac{\pi}{2}$  und  $\varepsilon_x \neq \varepsilon_y$  folgt dann

$$\left. \begin{aligned} E_x^{\text{phy}} &= \varepsilon_x \cos(kz - \omega t + \varphi) \\ E_y^{\text{phy}} &= \mp \varepsilon_y \sin(kz - \omega t + \varphi) \end{aligned} \right\} \implies \left( \frac{E_x^{\text{phy}}}{\varepsilon_x} \right)^2 + \left( \frac{E_y^{\text{phy}}}{\varepsilon_y} \right)^2 = 1 .$$

- **Zirkuläre Polarisation:** Im Spezialfall  $\delta = \pm \frac{\pi}{2}$  und  $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon$  ist

$$E_x^{\text{phy}} = \varepsilon \cos(kz - \omega t + \varphi) \quad \text{und} \quad E_y^{\text{phy}} = \mp \varepsilon \sin(kz - \omega t + \varphi) .$$

Betrachtet man einen festen Raumpunkt, so kreist hier das elektrische Feld  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  im positiven bzw. negativen Umlaufsinn mit der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  in die Richtung  $\vec{k} = \hat{z}$ .

- **Elliptische Polarisation mit Hauptachse:** Hier ist  $\delta \neq 0$  und  $\delta \neq \pm \frac{\pi}{2}$  sowie  $\varepsilon_x \neq \varepsilon_y$ .

Die allgemeine monochromatische ebene Welle in  $z$ -Richtung mit beliebiger elliptischer Polarisation ist dabei durch

$$\vec{E} = (\hat{x}E_{0x} + \hat{y}E_{0y})e^{i(kz - \omega t)}$$

gegeben, genauer gesagt durch den Realteil davon. Sie ist entweder als Superposition zweier orthogonaler linear polarisierter Wellen, oder als Superposition einer rechts- und einer linksdrehenden zirkulär polarisierten Welle anzusehen. Dies sieht man durch

$$\Re(\vec{E}) = \underbrace{\hat{x}\varepsilon_x \cos(kz - \omega t + \varphi)}_{x\text{-lineare Polarisation}} + \underbrace{\hat{y}\varepsilon_y \cos(kz - \omega t + \varphi)}_{y\text{-lineare Polarisation}}$$

für eine Linearkombination linearer Polarisationen oder als Linearkombination links/rechts-zirkulärer Polarisation durch

$$\Re(\vec{E}) = \overbrace{\frac{1}{2}\varepsilon_- (\hat{x} \cos(kz - \omega t + \gamma_-) - \hat{y} \sin(kz - \omega t + \gamma_-))}^{\text{linkszirkuläre Polarisation}} + \underbrace{\frac{1}{2}\varepsilon_+ (\hat{x} \cos(kz - \omega t + \gamma_+) + \hat{y} \sin(kz - \omega t + \gamma_+))}_{\text{rechtszirkuläre Polarisation}} .$$

## 10.3. Lösung der inhomogenen Wellengleichung

### 10.3.1. Allgemeine inhomogene Wellengleichung und Lösungsverfahren

Im Anschluß an die Untersuchung der homogenen Wellengleichung betrachten wir nun die inhomogene Wellengleichung, zunächst wieder in der allgemeinen Form  $\square\varphi = 4\pi g$ . Um diese zu lösen, betrachtet man das ganze Problem zunächst Fourier-transformiert, also

$$\varphi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \tilde{\varphi}(\vec{r}, \omega) \quad \text{und} \quad g(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \tilde{g}(\vec{r}, \omega) .$$

Aus der inhomogenen Wellengleichung  $\square\varphi = 4\pi g$  erhält man dann

$$\begin{aligned} \int d\omega \left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) e^{-i\omega t} \tilde{\varphi}(\vec{r}, \omega) &= 4\pi \int d\omega e^{-i\omega t} \tilde{g}(\vec{r}, \omega) \\ \implies \left( \frac{\omega^2}{c^2} + \Delta \right) \tilde{\varphi}(\vec{r}, \omega) &= -4\pi \tilde{g}(\vec{r}, \omega) , \end{aligned}$$

diese letzte Gleichung ist also zu lösen, wozu man die Methode der Greenschen Funktionen nutzt. Dabei ist eine Green-Funktion allgemein die Lösung der **Green-Gleichung**

$$\left(\Delta + \frac{\omega^2}{c^2}\right) G(\vec{r}, \omega) = -4\pi\delta^{(3)}(\vec{r}) ,$$

sodass  $\tilde{\varphi}(\vec{r}, t) = \iiint G(\vec{r} - \vec{r}') \tilde{g}(\vec{r}', \omega) d^3\vec{r}'$  eine Lösung der Fourier-transformierten Wellengleichung ist, denn es gilt

$$\begin{aligned} \square\tilde{\varphi} &= \left(\Delta + \frac{\omega^2}{c^2}\right) \tilde{\varphi}(\vec{r}, \omega) = \iiint \left(\Delta + \frac{\omega^2}{c^2}\right) G(\vec{r} - \vec{r}') \tilde{g}(\vec{r}', \omega) d^3\vec{r}' \\ &= -4\pi \iiint \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') \tilde{g}(\vec{r}', \omega) d^3\vec{r}' = -4\pi\tilde{g}(\vec{r}, \omega) . \end{aligned}$$

Es ist somit eine Lösung der zugehörigen Green-Gleichung  $(\Delta + k^2)G(\vec{r}, t) = -4\pi\delta^{(3)}(\vec{r})$  zu ermitteln. Man weiß, dass  $\Delta\frac{1}{r} = -4\pi\delta^{(3)}(\vec{r})$  gilt, also vermutet man

$$G(\vec{r}) = G(r) = \frac{1}{r}e^{\pm ikr}$$

als Green-Funktion. Um zu zeigen, dass diese denn dann auch tatsächlich eine richtige Lösung ist, betrachte man die beiden Fälle  $r \neq 0$  und  $r = 0$ . Im ersteren Fall gilt

$$(\Delta + k^2)\frac{e^{\pm ikr}}{r} = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}e^{\pm ikr} + k^2\frac{e^{\pm ikr}}{r} = \left(\frac{1}{r}(\pm ik)^2 + \frac{k^2}{r}\right)e^{\pm ikr} = 0 ,$$

für den Fall  $r = 0$  folgt dagegen etwas umfangreicher

$$\begin{aligned} \iiint d^3\vec{r}(\Delta + k^2)\frac{e^{\pm ikr}}{r} &= \iiint_{r < \varepsilon} d^3\vec{r}(\Delta + k^2)\frac{1}{r} \left[1 \pm ikr + \frac{1}{2}(\pm ikr)^2 + \dots\right] \\ &= \iiint_{r < \varepsilon} d^3\vec{r}(\Delta + k^2) \left(\frac{1}{r} \pm ik - \frac{1}{2}k^2r + \dots\right) \\ &= \iiint_{r < \varepsilon} d^3\vec{r}\Delta\frac{1}{r} + \iiint_{r < \varepsilon} d^3\vec{r}\frac{k^2}{r} \pm \Delta ik \pm ik^3 - \frac{1}{2}k^2\Delta r + \dots \end{aligned}$$

Verwendet man dann weiter die Gleichheit  $\Delta\frac{1}{r} = -4\pi\delta^{(3)}(\vec{r})$  und  $d^3\vec{r} = d\Omega r^2 dr$  für das Volumenelement, so ergibt sich daraus

$$\begin{aligned} -4\pi \iiint_{r < \varepsilon} d^3\vec{r}\delta^{(3)}(\vec{r}) + 4\pi \int_{r < \varepsilon} dr \left(k^2r \pm ik^3r - \frac{1}{2}k^2r^2\Delta r + \dots\right) \\ = -4\pi \iiint_{r < \varepsilon} d^3\vec{r}\delta^{(3)}(\vec{r}) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} -4\pi , \end{aligned}$$

und damit ist die Gültigkeit der Green-Funktion gezeigt. Aus physikalischen Gründen der Kausalität ist allerdings nur eine auslaufende Kugelwelle, d.h.  $G(\vec{r}) = G(r) = \frac{1}{r}e^{ikr}$ , von den beiden Möglichkeiten denkbar. Man wählt diese dann als Green-Funktion, und es folgt für die Fourier-Transformierte

$$\tilde{\varphi}(\vec{r}, \omega) = \iiint d^3\vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') \tilde{g}(\vec{r}', \omega) = \iiint d^3\vec{r}' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|} \tilde{g}(\vec{r}', \omega) .$$

Für die eigentlich gesuchte rücktransformierte Funktion ergibt sich damit dann schließlich

$$\begin{aligned}\varphi(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\omega e^{-i\omega t} \tilde{\varphi}(\vec{r}, \omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\omega \iiint d^3\vec{r}' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} e^{i\frac{\omega}{c}|\vec{r} - \vec{r}'|} e^{-i\omega t} \tilde{g}(\vec{r}', \omega) \\ &= \iiint \frac{d^3\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\omega e^{-i\omega(t - \frac{1}{c}|\vec{r} - \vec{r}'|)} \tilde{g}(\vec{r}', \omega) \\ &= \iiint \frac{d^3\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} g\left(\vec{r}', t - \frac{1}{c}|\vec{r} - \vec{r}'|\right) .\end{aligned}$$

### 10.3.2. Anwendung auf die elektromagnetischen Potentiale

Wendet man diese Lösungsstrategie nun auf die eingangs hergeleiteten Maxwell-Gleichungen  $\square\Phi = 4\pi\rho$  und  $\square\vec{A} = \frac{4\pi}{c}\vec{j}$  an, so erhält man als Ergebnis für diese Potentiale

$$\begin{aligned}\Phi(\vec{r}, t) &= \iiint d^3\vec{r}' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \rho\left(\vec{r}', t - \frac{1}{c}|\vec{r} - \vec{r}'|\right) \quad \text{und} \\ \vec{A}(\vec{r}, t) &= \iiint d^3\vec{r}' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \frac{1}{c} \vec{j}\left(\vec{r}', t - \frac{1}{c}|\vec{r} - \vec{r}'|\right) .\end{aligned}$$

Unmittelbar schließt sich die Frage an, wie man diese Potentiale interpretieren kann. Dazu beachte man, dass sich das gemessene Feld am Ort  $\vec{r}$  und zur Zeit  $t$  aus den Beiträgen, die von den verschiedenen Quellen an den verschiedenen Orten  $\vec{r}'$  stammen, zusammensetzt. Dabei wirkt zur Zeit  $t$  die Quelle bei  $\vec{r}'$  mit einer Stärke, die sie dort zum früheren Zeitpunkt

$$t_{\text{ret}} = t - \frac{1}{c}|\vec{r} - \vec{r}'|$$

hatte, wobei  $\frac{1}{c}|\vec{r} - \vec{r}'|$  gerade der Ausbreitungsdauer von  $\vec{r}'$  nach  $\vec{r}$  mit Lichtgeschwindigkeit  $c$  entspricht. Man kann nun leicht nachrechnen, dass das oben erhaltene Vektorpotential  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  zudem der Lorentz-Bedingung

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Phi + \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$$

genügt. Im Falle von zeitunabhängigen  $\rho = \rho(\vec{r})$  und  $\vec{j} = \vec{j}(\vec{r})$  geht die beiden Potentiale dann in die Potentiale der Elektro- und Magnetostatik über. Die beiden Potentiale lassen sich mit Hilfe der Diracschen Delta-Funktion auch als

$$\begin{aligned}\Phi(\vec{r}, t) &= \iiint d^3\vec{r}' \int dt' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \delta\left(t' - t + \frac{1}{c}|\vec{r} - \vec{r}'|\right) \rho(\vec{r}', t') \\ \vec{A}(\vec{r}, t) &= \iiint d^3\vec{r}' \int dt' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \delta\left(t' - t + \frac{1}{c}|\vec{r} - \vec{r}'|\right) \frac{1}{c} \vec{j}(\vec{r}', t')\end{aligned}$$

darstellen. Alternativ zum verwendeten Lösungsweg hätte man  $\square\Phi = 4\pi\rho$  auch über eine vierdimensionale Fourier-Transformation mit

$$\varphi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\omega \iiint d^3\vec{k} e^{-i\omega t} e^{i\vec{k}\vec{r}} \tilde{\varphi}(\vec{k}, \omega)$$

auf die einfach zu lösende algebraische Gleichung

$$\left(\frac{\omega^2}{c^2} - k^2\right) \tilde{\varphi}(\vec{k}, \omega) = -4\pi \tilde{g}(\vec{k}, \omega) \iff \tilde{\varphi}(\vec{k}, \omega) = -4\pi \frac{1}{\frac{\omega^2}{c^2} - k^2}$$

zurückführen können. Eine Lösung des Potentials ist dann entsprechend gegeben durch

$$\varphi(\vec{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d\omega \iiint d^3\vec{k} e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} (-4\pi) \frac{1}{\frac{\omega^2}{c^2} - k^2} .$$

## 10.4. Bewegte Punktladungen und Liénard-Wiechert-Potentiale

### 10.4.1. Strahlungsfelder

Mit den inhomogenen Lösungen werden nun bewegte und beschleunigte Punktladungen näher untersucht, und wie sich diese Bewegungen auf die Form des elektrischen und magnetischen Feldes auswirken. Man betrachte den Spezialfall, wo Ladungsverteilung  $\rho$  und Stromdichte  $\vec{j}$  durch eine beliebige bewegte Punktladung  $q$  mit der Bewegung  $t \mapsto \vec{R}(t)$  erzeugt werden, also

$$\rho(\vec{r}, t) = q\delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{R}(t)) \quad \text{und} \quad \vec{j}(\vec{r}, t) = \vec{v}\rho(\vec{r}, t) = q\vec{v}(t)\delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{R}(t))$$

mit  $\vec{v} = \dot{\vec{R}}$ . Die davon erzeugten Potentiale haben nach dem vorigen Abschnitt die Form

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{r}, t) &= q \iiint d^3\vec{r}' \int dt \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \delta^{(3)}(\vec{r}' - \vec{R}(t')) \delta\left(t' - t + \frac{1}{c}|\vec{r} - \vec{r}'|\right) \\ \vec{A}(\vec{r}, t) &= q \iiint d^3\vec{r}' \int dt' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \delta^{(3)}(\vec{r}' - \vec{R}(t')) \delta\left(t' - t + \frac{1}{c}|\vec{r} - \vec{r}'|\right) \frac{1}{c}\vec{v}(t'). \end{aligned}$$

Betrachten wir dann weiter das Skalarpotential  $\Phi$ , die Überlegungen für  $\vec{A}$  verlaufen völlig analog. Wenn wir die räumliche Integration nach  $\vec{r}'$  explizit ausführen, so liefert das

$$\Phi(\vec{r}, t) = q \int dt' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}(t')|} \delta\left(t' - t + \frac{1}{c}|\vec{r} - \vec{R}(t')|\right) = q \int dt' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}(t')|} \delta(f(t'))$$

mit  $f(t') = t' - t + \frac{1}{c}|\vec{r} - \vec{R}(t')|$ . Betrachtet man die Ableitung der Funktion  $f$ , so findet sich

$$\frac{df}{dt'} = 1 + \frac{1}{c} \frac{d}{dt'} |\vec{r} - \vec{R}(t')| = 1 - \frac{\vec{v}(t') \cdot \vec{r} - \vec{R}(t')}{c |\vec{r} - \vec{R}(t')|} = 1 - \frac{\vec{v}(t')}{c} \hat{D}(t') > 0,$$

demnach besitzt  $f$  nur eine Nullstelle  $t_{\text{ret}} = t - \frac{1}{c}|\vec{r} - \vec{R}(t_{\text{ret}})|$ . Mit der Darstellungformel der Delta-Funktion durch die Nullstellen des Arguments,

$$\delta(f(x)) = \sum_{f(\alpha)=0} \frac{1}{\left|\frac{df}{dx}\right|_{\alpha}} \delta(x - \alpha),$$

nimmt das Skalarpotential dann die Form

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{r}, t) &= q \int dt' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}(t')|} \frac{1}{\left|\frac{df}{dt'}\right|_{t_{\text{ret}}}} \delta(t' - t_{\text{ret}}) \\ &= q \int dt' \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}(t')|} \frac{1}{\left|1 - \frac{1}{c}\hat{D}(t')\vec{v}(t')\right|} \delta(t' - t_{\text{ret}}) \\ &= q \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}(t_{\text{ret}})|} \frac{1}{\left|1 - \frac{1}{c}\hat{D}(t_{\text{ret}})\vec{v}(t_{\text{ret}})\right|} = q \frac{1}{|\vec{D}(t_{\text{ret}})|} \frac{1}{\left|1 - \frac{1}{c}\hat{D}\vec{v}\right|_{t_{\text{ret}}}} = \left(\frac{q}{D - \frac{1}{c}\vec{D}\vec{v}}\right)_{t_{\text{ret}}} \end{aligned}$$

an. Führt man analoge Überlegungen auch für das Vektorpotential  $\vec{A}$  durch, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{r}, t) &= \left(\frac{q}{D - \frac{1}{c}\vec{D}\vec{v}}\right)_{t_{\text{ret}}} = \frac{1}{D_{\text{ret}}} \frac{q}{1 - \frac{1}{c}\hat{D}_{\text{ret}}\vec{v}_{\text{ret}}} \quad \text{und} \\ \vec{A}(\vec{r}, t) &= \left(\frac{\frac{q}{c}\vec{v}}{D - \frac{1}{c}\vec{D}\vec{v}}\right)_{t_{\text{ret}}} = \frac{1}{D_{\text{ret}}} \frac{\frac{q}{c}\vec{v}}{1 - \frac{1}{c}\hat{D}_{\text{ret}}\vec{v}_{\text{ret}}}. \end{aligned}$$

Da für die Felder dann bekanntlich  $\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{A}$  und  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$  gilt, so findet sich unter Verwendung von

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial t_{\text{ret}}}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t_{\text{ret}}} = \frac{1}{1 - \frac{1}{c}\hat{D}_{\text{ret}}\vec{v}_{\text{ret}}}$$

dann für das elektrische Feld dieser Potentiale

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \left( q \frac{1}{D^2} \frac{\hat{D} - \frac{1}{c}\vec{v}}{\gamma^2(v)(1 - \frac{1}{c}\hat{D}\vec{v})^3} + q \frac{1}{D} \frac{\hat{D} \times ((\hat{D} - \frac{1}{c}\vec{v}) \times \frac{1}{c}\dot{\vec{v}})}{c(1 - \frac{1}{c}\hat{D}\vec{v})^3} \right)_{t_{\text{ret}}}.$$

Das Verhalten bei sehr großen Abständen, also für  $|\vec{r} - \vec{R}(t)| \gg 0$  führt dann zu einem sehr großen Wert von  $D$ , also domiert das „ $\frac{1}{D}$ -Feld“, das sogenannte **Stahlungsfeld** im Unendlichen. Insgesamt lässt sich also kurz zusammengefasst sagen, dass beschleunigte Ladungen ein sogenanntes Strahlungsfeld erzeugen.

Was lässt sich nun analog über das Magnetfeld feststellen? Hier gilt  $\vec{B}(\vec{r}, t) = \hat{D}_{\text{ret}} \times \vec{E}(\vec{r}, t)$ , demnach ist die fundamentale Eigenschaft  $\vec{E} \perp \vec{B}$  wieder erfüllt. Der Poynting-Vektor des Energieflusses ist

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi} (\vec{E} \times \vec{B}) = \frac{c}{4\pi} (\vec{E} \times (\hat{D}_{\text{ret}} \times \vec{E}))$$

und somit proportional zu  $\vec{E}^2$ . Damit folgt  $|\vec{S}| \propto \frac{1}{r^4}$ , der Energiestrom ist also proportional zu  $\frac{1}{r^4} \cdot r^2 = \frac{1}{r^2}$ . Im Falle eines Strahlungsfeldes  $\vec{E}_{\text{Str}}$  hat man dann wegen  $E_{\text{Str}} \propto \frac{1}{r}$  folglich  $\vec{E}_{\text{Str}}^2 \propto \frac{1}{r^2}$  ebenfalls  $\vec{S} \propto \frac{1}{r^2}$ , also gilt

$$\oiint \vec{S} d\vec{f} \propto \frac{1}{r^2} \cdot r^2 = \mathcal{O}(1).$$

### 10.4.2. Abstrahlungsenergie

Nach den bisherigen Überlegungen domiert also das Strahlungsfeld in großen Entfernungen. Für den Poynting-Vektor in Abhängigkeit von Ort und Zeit findet man nun weiter

$$\begin{aligned} \vec{S}(\vec{r}, t) &= \frac{c}{4\pi} (\vec{E}_{\text{Str}} \times \vec{B}_{\text{Str}}) = \frac{c}{4\pi} (\vec{E}_{\text{Str}} \times (\hat{D}_{\text{ret}} \times \vec{E}_{\text{Str}})) \\ &= \frac{c}{4\pi} (\hat{D}_{\text{Str}}(\vec{E}_{\text{Str}}^2) - \vec{E}_{\text{Str}}(\hat{D}_{\text{ret}} \vec{E}_{\text{Str}})) = \frac{c}{4\pi} \hat{D}_{\text{ret}} \vec{E}_{\text{Str}}^2, \end{aligned}$$

sodass für die Projektion des Energiefluss-Vektors auf die Richtung  $\hat{D}_{\text{ret}}$  dann

$$\vec{S}(\vec{r}, t) \hat{D}_{\text{ret}} = \frac{c}{4\pi} \vec{E}_{\text{Str}}^2 = \frac{c}{4\pi} \frac{q^2}{c^2} \cdot \frac{1}{D_{\text{ret}}^2} \left( \frac{[\hat{D} \times ((\hat{D} - \frac{1}{c}\vec{v}) \times \frac{1}{c}\dot{\vec{v}})]^2}{(1 - \frac{1}{c}\hat{D}\vec{v})^6} \right)_{t_{\text{ret}}}$$

folgt. Die gesamte pro Zeit  $dt$  durch die Fläche  $\Delta F$  abgestrahlte Energie, also Leistung, berechnet sich dann durch

$$\begin{aligned} \Delta P &= \frac{c}{4\pi} \vec{E}_{\text{Str}}^2 \vec{D}_{\text{ret}}^2 \Delta\Omega \\ \iff \frac{\Delta P}{\Delta\Omega} &\approx \frac{dP}{d\Omega} = \frac{c}{4\pi} \vec{E}_{\text{Str}}^2 \vec{D}_{\text{ret}}^2 = \frac{q^2}{4\pi c} \frac{[\hat{D} \times ((\hat{D} - \frac{1}{c}\vec{v}) \times \frac{1}{c}\dot{\vec{v}})]^2}{(1 - \frac{1}{c}\hat{D}\vec{v})^6} \Big|_{t_{\text{ret}}}. \end{aligned}$$

Somit ist die gesamte pro Zeiteinheit  $dt_{\text{ret}}$  durch diese Fläche abgestrahlte Energie, die sogenannte **Abstrahlungsenergie**, gleich

$$\frac{dP'}{d\Omega} = \frac{dP}{d\Omega} \frac{\partial t}{\partial t_{\text{ret}}} = \frac{q^2}{4\pi c} \frac{[\hat{D} \times ((\hat{D} - \frac{1}{c}\dot{\vec{v}}) \times \frac{1}{c}\dot{\vec{v}})]^2}{(1 - \frac{1}{c}\hat{D}\dot{\vec{v}})^5} \Big|_{t_{\text{ret}}} \quad \text{wegen} \quad \frac{\partial t}{\partial t_{\text{ret}}} = \left(1 - \frac{1}{c}\hat{D}\dot{\vec{v}}\right)_{t_{\text{ret}}}.$$

Man betrachte nun einige Spezialfälle um ein besseres Verständnis der Auswirkung der Geschwindigkeit und Beschleunigung auf die äußere Form und Stärke des elektromagnetischen Strahlungsfeldes zu erhalten.

### 10.4.3. Nichtrelativistischer Fall

Im nichtrelativistischen Fall gilt wegen  $\frac{|\dot{\vec{v}}|}{c} \ll 1$  sicherlich die Näherung  $1 - \frac{1}{c}\hat{D}\dot{\vec{v}} \approx 1$ , also gilt auch  $\frac{\partial t_{\text{ret}}}{\partial t} \approx 1$  und  $\hat{D} - \frac{1}{c}\dot{\vec{v}} \approx \hat{D}$ . Mittels dieser Näherungen ergibt sich dann weiter

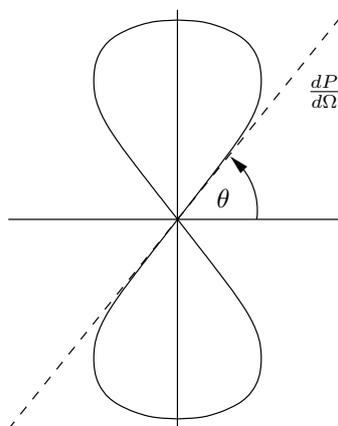
$$\begin{aligned} \frac{dP'}{d\Omega} &= \frac{dP}{d\Omega} = \frac{q^2}{4\pi c} (\hat{D} \times (\hat{D} \times \frac{1}{c}\dot{\vec{v}}))^2 \Big|_{t_{\text{ret}}} = \frac{q^2}{4\pi c} (\hat{D}(\frac{1}{c}\dot{\vec{v}}\hat{D}) - \frac{1}{c}\dot{\vec{v}}(\hat{D}\hat{D}))^2 \Big|_{t_{\text{ret}}} \\ &= \frac{q^2}{4\pi c^3} (\hat{D}(\dot{\vec{v}}\hat{D}) - \dot{\vec{v}})^2 \Big|_{t_{\text{ret}}} = \frac{q^2}{4\pi c^3} (\hat{D}^2(\dot{\vec{v}}\hat{D})^2 - 2\dot{\vec{v}}\hat{D}(\dot{\vec{v}}\hat{D}) + \dot{\vec{v}}^2) \Big|_{t_{\text{ret}}} \\ &= \frac{q^2}{4\pi c^3} (\dot{\vec{v}}^2 - (\hat{D}\dot{\vec{v}})^2) \Big|_{t_{\text{ret}}} = \frac{q^2}{4\pi c^3} \dot{\vec{v}}^2 (1 - \cos^2 \theta), \end{aligned}$$

wobei hier  $\theta = \theta(\dot{\vec{v}}, \hat{D})$  gilt. Man hat also insgesamt als Abstrahlungsenergie

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{q^2}{4\pi c^3} \dot{\vec{v}}^2 \sin^2 \theta,$$

die in dieser Näherung somit nicht von der Geschwindigkeit, sondern nur von der Beschleunigung abhängig ist. Es folgt somit für die Leistung

$$\begin{aligned} P &= \oint \frac{dP}{d\Omega} d\Omega = \iint \frac{dP}{d\Omega} d\varphi d(\cos \theta) = 2\pi \frac{q^2}{4\pi c^3} \dot{\vec{v}}^2 \int \sin^2 \theta d(\cos \theta) \\ &= \frac{q^2}{2c^3} \dot{\vec{v}}^2 \int (1 - x^2) dx = \frac{2}{3} \frac{q^2}{c^3} \dot{\vec{v}}^2. \end{aligned}$$



**Abbildung 10.1.:** Strahlungscharakteristik einer nichtrelativistischen Ladung.

Die zugehörige Abstrahlungscharakteristik lässt sich dem nachfolgenden Bild entnehmen. Ein Beispiel für diesen Spezialfall wäre die Röntgenstrahlung, die durch die spontane Beschleunigung von Elektronen in einer Röntgenröhre bei Annäherung an eine positiv geladene Platte stattfindet.

#### 10.4.4. Der extremrelativistische Fall

Betrachten wir nun Geschwindigkeiten nahe der Lichtgeschwindigkeit  $c$ , also den extremrelativistischen Fall. Hier gilt die Näherung  $\frac{|\vec{v}|}{c} \approx 1$ . Der Einfachheit wegen sei außerdem angenommen, das Geschwindigkeit  $\vec{v}$  und Beschleunigung  $\dot{\vec{v}}$  parallel zueinander sind, sodass

$$[\hat{D} \times ((\hat{D} - \frac{1}{c}\vec{v})\gamma\dot{\vec{v}})]^2 \approx \frac{1}{c^2}\dot{v}^2$$

gilt. Außerdem gilt  $1 - \frac{1}{c}\hat{D}_{\text{ret}}\vec{v}_{\text{ret}} = 1 - \frac{1}{c}|\vec{v}_{\text{ret}}|\cos\theta$ , wobei  $\theta = \theta(\vec{v}_{\text{ret}}, \hat{D}_{\text{ret}})$  ist. Setzt man nun noch  $\beta_{\text{ret}} = \frac{1}{c}|\vec{v}_{\text{ret}}|$  als Abkürzung ein, so ergibt sich die Gleichung

$$\frac{dP'}{d\Omega} = \frac{q^2}{4\pi c^3} \dot{v} \frac{\sin^2\theta}{(1 - \beta_{\text{ret}}\cos\theta)^5}.$$

Es lässt sich nun fragen, bei welchem  $\theta = \theta_{\text{max}}$  die abgestrahlte Energie  $\frac{dP}{d\Omega}$  maximal wird. Entsprechende Umformungen ergeben

$$\cos\theta_{\text{max}} = \frac{1}{3\beta_{\text{ret}}} \left( \sqrt{1 + 15\beta_{\text{ret}}^2} - 1 \right),$$

demnach gilt also für  $\beta_{\text{ret}} \rightarrow 1$ , dass  $\cos\theta_{\text{max}} \rightarrow 1$ , also  $\theta_{\text{max}} \rightarrow 0$  geht. Die Strahlungscharakteristik einer nach rechts beschleunigten Ladung sieht dann wie folgt aus:

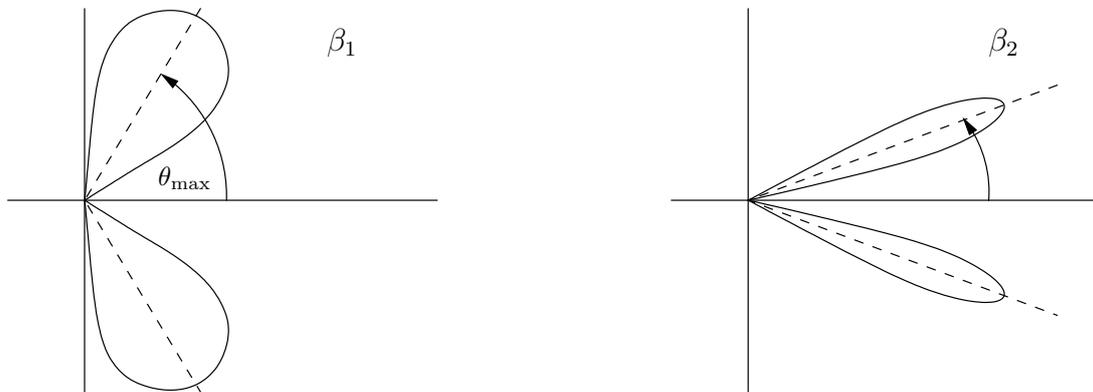


Abbildung 10.2.: Strahlungscharakteristik für  $\beta_1 < \beta_2$ .

#### 10.4.5. Gleichförmig geradlinig bewegtes Teilchen

Als letzten Spezialfall betrachten wir noch den Fall konstanter Geschwindigkeit  $\vec{v}$ . Wegen der gleichförmigen Bewegung gilt  $\vec{R}(t) = \vec{R}_0 + \vec{v}_0 t$ , also gilt insbesondere  $\dot{\vec{v}} = 0$ , und damit

$$E = \frac{q}{D_{\text{ret}}^2} \frac{D - \frac{1}{c}\vec{v}_0}{\gamma^2(1 - \frac{1}{c}\hat{D}\vec{v}_0)^3} \Big|_{t_{\text{ret}}}.$$

Man bestimme nun den retardierten Zeitpunkt  $t_{\text{ret}}$ , es gilt dabei

$$\begin{aligned} c(t - t_{\text{ret}}) &= |\vec{r} - \vec{R}(t_{\text{ret}})| = |\vec{r} - \vec{R}(t) + \vec{R}(t) - \vec{v}_0 t_{\text{ret}}| = |\vec{D}(t) + \vec{v}_0(t - t_{\text{ret}})| \\ \iff t - t_{\text{ret}} &= \frac{D(t)}{c^2 - v_0^2} \left( \vec{D}\vec{v}_0 + \sqrt{(\vec{D}\vec{v}_0)^2 + \vec{D}^2(c^2 - v_0^2)} \right) \\ &= \frac{D(t)}{c^2 - v_0^2} \left( v_0 \cos \vartheta + \sqrt{c^2 - v_0^2 \sin^2 \vartheta} \right) \end{aligned}$$

für  $\vartheta = \vartheta(\vec{v}_0, \vec{D})$ . Mit  $D_{\text{ret}} = c(t - t_{\text{ret}})$  und  $\vec{D}_{\text{ret}} = \vec{r} - \vec{R}(t_{\text{ret}}) = \vec{D}(t) + \vec{v}_0(t - t_{\text{ret}})$  folgt dann

$$D_{\text{ret}} - \frac{1}{c} \vec{v}_{\text{ret}} \vec{D}_{\text{ret}} = |\vec{r} - \vec{R}(t)| \sqrt{1 - \frac{v_0^2}{c^2} \sin^2 \vartheta}$$

und erhalten somit letztlich für das elektrische Feld die Gleichung

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{q}{\gamma^2(v_0)} \frac{\vec{r} - \vec{R}(t)}{|\vec{r} - \vec{R}(t)|^3} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v_0^2}{c^2} \sin^2 \vartheta}} .$$

Das Feld verhält sich also zu jedem Zeitpunkt radial und entspricht bis auf einige Vorfaktoren dem Feld einer bei  $\vec{R}(t)$  ruhenden Ladungen.

## 10.5. Wellenabstahlung einer Dipolnäherung

Man kann sich nun Fragen, wie es um das Strahlungsfeld einer Dipolnäherung steht. Seien dazu  $\rho(\vec{r}, t)$  und  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  eine beliebig gewählte Ladungsverteilung und Stromdichte, allerdings in einer kleinen Kugel um  $O$  konzentriert. Man berechne dann das Vektorpotential  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  weitab zu

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{c} \iiint \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \vec{j} \left( \vec{r}', t - \frac{1}{c} |\vec{r} - \vec{r}'| \right) d^3 \vec{r}' .$$

Wegen der großen Entfernung gilt  $\frac{|\vec{r}'|}{|\vec{r}|} \ll 1$ , sodass die Entwicklung

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2\vec{r}\vec{r}'} = r \left( 1 - 2\frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2} + \frac{r'^2}{r^2} \right) \approx r \left( 1 - 2\frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2} \right) = r - \hat{r}\vec{r}'$$

folgt. Mit ihrer Hilfe ergibt sich dann wieder die zugehörige Entwicklung

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \frac{1}{r} \frac{1}{1 - \frac{\vec{r}\vec{r}'}{r^2}} \approx \frac{1}{r} \frac{1}{1 + \frac{\hat{r}\vec{r}'}{r}} = \frac{1}{r} + \frac{\hat{r}\vec{r}'}{r^2} \approx \frac{1}{r}$$

des Inversen, sodass wir wiederum mit dieser Näherung für die Stromdichte

$$\vec{j}(\vec{r}', t - \frac{1}{c} |\vec{r} - \vec{r}'|) \approx \vec{j}(\vec{r}', t - \frac{1}{c} r + \frac{1}{c} \hat{r}\vec{r}') \approx \vec{j}(\vec{r}', t - \frac{1}{c} r)$$

zum retardierten Zeitpunkt  $t_{\text{ret}}$  erhalten. Für das Vektorpotential folgt damit

$$\begin{aligned} \vec{A}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{c} \iiint \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \vec{j}(\vec{r}', t - \frac{1}{c} |\vec{r} - \vec{r}'|) d^3 \vec{r}' \approx \frac{1}{c} \iiint d^3 \vec{r}' \frac{\vec{j}(\vec{r}', t - \frac{1}{c} r)}{r} \\ &= \frac{1}{rc} \iiint d^3 \vec{r}' \vec{j}(\vec{r}', t - \frac{r}{c}) . \end{aligned}$$

Betrachtet man dazu noch die Identität

$$\begin{aligned} \iiint d^3\vec{r}' r'_i \vec{\nabla}_{\vec{r}'} \cdot \vec{j}(\vec{r}', t') &= \iiint d^3\vec{r}' r'_i \frac{\partial}{\partial r'_k} j_k(\vec{r}', t') \\ &= - \iiint d^3\vec{r}' \left( \frac{\partial}{\partial r'_k} r'_i \right) j_k(\vec{r}', t') + r'_i j_k \Big|_{|\vec{r}'|=-\infty}^{|\vec{r}'|=\infty} = - \iiint d^3\vec{r}' j_i(\vec{r}', t') \end{aligned}$$

so folgt  $\iiint d^3\vec{r}' \vec{r}' \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}'} \vec{j}(\vec{r}', t') = - \iiint d^3\vec{r}' \vec{j}(\vec{r}', t')$ . Andererseits gilt aber auch  $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}$ , also hat man die Gleichheit

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint d^3\vec{r}' \vec{r}' \rho(\vec{r}', t') = - \iiint d^3\vec{r}' \vec{r}' \operatorname{div} \vec{j}(\vec{r}', t') = \iiint d^3\vec{r}' \vec{j}(\vec{r}', t') ,$$

wobei  $\vec{d}(t') = \iiint d^3\vec{r}' \vec{r}' \rho(\vec{r}', t')$  das Dipolmoment ist. Für  $r$  deutlich größer als der Kugelradius gilt also für das Vektorpotential

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \frac{1}{r} \frac{1}{c} \dot{\vec{d}}\left(t - \frac{1}{c}r\right) .$$

Wie üblich ist das magnetische  $\vec{B}$ -Feld daraus dann über die Rotation bestimmt, also

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \frac{1}{c} \left( \frac{1}{r} \frac{1}{c} \ddot{\vec{d}} \times \hat{r} \right) + \frac{1}{r^2} (\dot{\vec{d}} \times \hat{r}) \approx \frac{1}{rc^2} (\ddot{\vec{d}} \times \hat{r}) .$$

Das elektrische Feld lässt sich nun aus der vierten Maxwell'schen Gleichung herleiten, die wegen  $\vec{j}(\vec{r}, t) = 0$  im betrachteten Bereich die Gestalt

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}$$

annimmt, womit für die zeitliche Änderung des  $\vec{E}$ -Feld

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{B} &= \operatorname{rot} \operatorname{rot} \vec{A} = \frac{1}{rc^3} (-\ddot{\vec{d}} + \hat{r}(\hat{r} \cdot \ddot{\vec{d}})) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right) = \frac{1}{rc^3} \frac{\partial}{\partial t} (-\dot{\vec{d}} + \hat{r}(\hat{r} \cdot \dot{\vec{d}})) \\ &= \frac{1}{rc^3} \frac{\partial}{\partial t} ((\ddot{\vec{d}} \times \hat{r}) \times \hat{r}) = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{E} \end{aligned}$$

folgt. Das elektrische Feld ist mit dem magnetischen Feld wieder über  $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{B}(\vec{r}, t) \times \hat{r}$  verknüpft, sodass wir die Felder

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{rc^2} ((\ddot{\vec{d}}_{\text{ret}} \times \hat{r}) \times \hat{r}) = \vec{B}(\vec{r}, t) \times \hat{r} \quad \text{und} \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{rc^2} (\ddot{\vec{d}}_{\text{ret}} \times \hat{r}) \quad \text{mit} \quad \ddot{\vec{d}}_{\text{ret}} = \ddot{\vec{d}}\left(t - \frac{1}{c}r\right) \end{aligned}$$

erhalten. Welche Eigenschaften hat dieses Dipolfeld nun? Es ist nur wenn  $\ddot{\vec{d}} \neq 0$  ist, also der Dipol beschleunigt ist, ungleich Null. Weiter gilt dann immer  $\vec{E} \perp \vec{B}$  und  $\vec{E} \perp \hat{r} \perp \vec{B}$ . Außerdem hat man  $|\vec{E}| = |\vec{B}|$  und das Feld fällt proportional zu  $\frac{1}{r}$  ab. Somit erhält man folglich ein Schwingungsfeld, dass mit  $\frac{1}{r}$  abfällt und nur bei Beschleunigungen entsteht.

# 11. Elektromagnetische Felder und das Relativitätsprinzip

## 11.1. Lorentz-Kraft und Feld-Transformationsverhalten

Bekanntlich ist die Kraft, die auf eine bewegte Punktladung wirkt, gerade durch die Lorentz-Kraft  $\vec{F}_L$  gegeben, für die

$$\vec{F} = \vec{F}_L = q \left( \vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B} \right)$$

gilt. Im nichtrelativistischen Fall gilt in einem Inertialsystem IS, in dem die Probeladung eine (kleine) Geschwindigkeit  $\vec{v}$  hat

$$\vec{F}_L = \frac{d}{dt} m \vec{v}$$

für die Lorentz-Kraft, es stellt sich also die Frage, wie das  $\vec{E}$ - und  $\vec{B}$ -Feld beim Übergang von IS zu IS' transformieren. Seien dazu die jeweils zugehörigen Felder durch  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  bzw. durch  $\vec{E}'$  und  $\vec{B}'$  bezeichnet. Im nichtrelativistischen Fall gilt dann zunächst einmal

$$\frac{d}{dt} m \vec{v} = \vec{F}_L = q \left( \vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B} \right) \quad \text{und} \quad \frac{d}{dt'} m \vec{v}' = \vec{F}'_L = q \left( \vec{E}' + \frac{1}{c} \vec{v}' \times \vec{B}' \right) .$$

Allgemein lautet das relativistische Bewegungsgesetz dann

$$\frac{d}{d\tau} m u^\mu = f^\mu \quad \frac{d}{d\tau} m u'^\mu = f'^\mu \quad \text{mit} \quad f'^\mu = \Lambda^\mu_\nu f^\nu, \quad u'^\mu = \Lambda^\mu_\nu u^\nu .$$

Aus dem Transformationsgesetz für die Minkowski-Kraft  $f^\mu$  folgt nun das Transformationsgesetz für die Lorentz-Kraft, und damit dann auch jenes für das  $\vec{E}$ - und  $\vec{B}$ -Feld. Für die zur Lorentz-Kraft gehörende Minkowski-Kraft gilt dabei

$$\begin{aligned} f_L^\mu &= \gamma(v) \left( \frac{1}{c} \vec{v} \vec{F}_L, \vec{F}_L \right) = \gamma(v) \left( \frac{1}{c} \vec{v} q \left[ \vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B} \right], q \left[ \vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B} \right] \right) \\ &= \gamma(v) \left( \frac{1}{c} q \vec{v} \vec{E}, q \vec{E} + \frac{1}{c} q \vec{v} \times \vec{B} \right) = \left( \frac{q}{c} \gamma(v) \vec{v} \vec{E}, \frac{q}{c} \gamma(v) c \vec{E} + \frac{q}{c} \gamma(v) \vec{v} \times \vec{B} \right) \\ &= \frac{q}{c} \left( \vec{u} \vec{E}, u^0 \vec{E} + \vec{u} \times \vec{B} \right) . \end{aligned}$$

Insbesondere muss  $f_L^0 = \frac{q}{c} \vec{u} \vec{E}$  wie die 0-Komponente eines Vierervektors transformieren. Um dies zu gewährleisten, setzt man  $E^k = F^{k0}$ , wobei  $F^{k0}$  die  $(k, 0)$ -Komponenten eines Lorentztensors vom Typ  $(2, 0)$  sind. Außerdem setzt man  $F^{00} = 0$ , dann ist

$$\vec{u} \vec{E} = \sum_k u^k E^k = \sum_k u^k F^{k0} - u^0 F^{00} = -u_\mu F^{\mu 0}$$

wegen  $u_\mu F^{\mu 0} = u_0 F^{00} + u_1 F^{10} + u_2 F^{20} + u_3 F^{30}$  und  $u_i = -u^i$ . Definiere nun weiter  $F^{0k} = -F^{k0}$  und betrachte die Kraft

$$\vec{f} = \frac{q}{c} \left( u^0 \vec{E} + \vec{u} \times \vec{B} \right) .$$

Für die  $k$ -te Komponente des zweiten Terms gilt dabei  $\sum_{s,t} \epsilon^{kst} u^s B^t = -\sum_{s,t} \epsilon^{kst} B^s u^t$ , dies muss also wie die Raumkomponente eines Vierervektors transformieren. Um dies zu gewährleisten, setzt man

$$-\epsilon^{kst} B^s = F^{kt} = -F^{tk} \quad \Longrightarrow \quad f^k = \frac{q}{c} (u^0 F^{k0} + F^{kt} u_t) = \frac{q}{c} F^{\mu\nu} u_\nu .$$

Damit sind nun prinzipiell alle Komponenten des Tensors  $F^{\mu\nu}$  in Matrixschreibweise bestimmt, und es ergibt sich die Form

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E^1 & -E^2 & -E^3 \\ E^1 & 0 & -B^3 & B^2 \\ E^2 & B^3 & 0 & -B^1 \\ E^3 & -B^2 & B^1 & 0 \end{pmatrix} .$$

Wenn  $F^{\mu\nu}$  nun wie ein  $(2,0)$ -Tensor transformiert, was an dieser Stelle postuliert sei, so transformiert die Minkowski-Kraft  $f^\mu$  wie ein Vierervektor. Eine Transformation von IS nach IS' ist dann durch

$$F^{\mu\nu} \rightarrow F'^{\mu\nu} = \Lambda^\mu{}_\rho \Lambda^\nu{}_\sigma F^{\rho\sigma} = L_{\mu\rho} F_{\rho\sigma} (L^t)_{\sigma\nu} = (LFL^t)_{\mu\nu}$$

gegeben. Betrachtet man den Relativgeschwindigkeitsvektor  $\vec{v} = (v, 0, 0)$ , so findet man explizit

$$\begin{aligned} F'^{\mu\nu} &= \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -E^1 & -E^2 & -E^3 \\ E^1 & 0 & -B^3 & B^2 \\ E^2 & B^3 & 0 & -B^1 \\ E^3 & -B^2 & B^1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma & -\beta\gamma & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -E_x & -\gamma(E_y - \frac{v}{c}B_z) & -\gamma(E_z + \frac{v}{c}B_y) \\ E_x & 0 & -\gamma(B_z - \frac{v}{c}B_y) & \gamma(B_y + \frac{v}{c}E_z) \\ \gamma(E_y - \frac{v}{c}B_z) & \gamma(B_z - \frac{v}{c}B_y) & 0 & -B_x \\ \gamma(E_z + \frac{v}{c}B_y) & -\gamma(B_y + \frac{v}{c}E_z) & B_x & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

mit  $E_x = E^1$ ,  $E_y = E^2$ , usw. Andererseits gilt natürlich gemäß der Definition auch

$$F'^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E'_x & -E'_y & -E'_z \\ E'_x & 0 & -B'_z & B'_y \\ E'_y & B'_z & 0 & -B'_x \\ E'_z & -B'_y & B'_x & 0 \end{pmatrix} ,$$

woraus sich die nachstehenden Beziehungen

$$\begin{aligned} E'_x &= E_x & E'_y &= \gamma \left( E_y - \frac{v}{c} B_z \right) & E'_z &= \gamma \left( E_z + \frac{v}{c} B_y \right) \\ B'_x &= B_x & B'_y &= \gamma \left( B_y + \frac{v}{c} E_z \right) & B'_z &= \gamma \left( B_z - \frac{v}{c} E_y \right) \end{aligned}$$

ergeben. Man sieht, dass  $\vec{E}'_{\parallel} = \vec{E}_{\parallel}$  und  $\vec{B}'_{\parallel} = \vec{B}_{\parallel}$  für die Parallelteile der elektromagnetischen Felder gilt. Für eine beliebige Relativgeschwindigkeit  $\vec{v}$  erhält man allgemein

$$\begin{aligned} \vec{E}'_{\parallel} &= \vec{E}_{\parallel} & \vec{E}'_{\perp} &= \gamma(v) \left( \vec{E}_{\perp} + \frac{1}{c} (\vec{v} \times \vec{B}_{\perp}) \right) \\ \vec{B}'_{\parallel} &= \vec{B}_{\parallel} & \vec{B}'_{\perp} &= \gamma(v) \left( \vec{B}_{\perp} - \frac{1}{c} (\vec{v} \times \vec{E}_{\perp}) \right) . \end{aligned}$$

**Beispiel:** Man betrachte speziell die Situation, in der in IS kein Magnetfeld spürbar ist, also  $\vec{B} = 0$ . Man berechne nun die transformierten Felder

$$\vec{E}'_{\parallel} = \vec{E}_{\parallel} \quad \vec{E}'_{\perp} = \gamma(v)\vec{E}_{\perp} \quad \text{und} \quad \vec{B}'_{\parallel} = \vec{B}_{\parallel} = 0 \quad \vec{B}'_{\perp} = -\frac{1}{c}\gamma(v)(\vec{v} \times \vec{E}_{\perp})$$

Es lässt sich somit sicherlich fragen, bis zu welchem Grade sich ein  $\vec{E}$ -Feld in ein  $\vec{B}$ -Feld transformieren lässt und entsprechend umgekehrt. Dazu bilde man mit Hilfe von  $F^{\mu\nu}$  und einem zusätzlichen Tensor, der durch

$$\tilde{F}^{\mu\nu} := \frac{1}{2}\epsilon^{\mu\nu\alpha\beta}F_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & -B^1 & -B^2 & -B^3 \\ B^1 & 0 & E^3 & -E^2 \\ B^2 & -E^3 & 0 & E^1 \\ B^3 & E^2 & -E^1 & 0 \end{pmatrix}$$

erklärt ist, die Lorentz-Skalare

$$S := -\frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} = \frac{1}{4}\tilde{F}^{\mu\nu}\tilde{F}_{\mu\nu} = \frac{1}{2}(\vec{E}^2 - \vec{B}^2) \quad \text{und} \quad P := -\frac{1}{4}F^{\mu\nu}\tilde{F}_{\mu\nu} = \vec{E} \cdot \vec{B}.$$

Mit diesen Größen ergeben sich dann folgende Eigenschaften:

- Wenn im Inertialsystem IS für die Feldstärke  $|\vec{E}| < |\vec{B}|$  gilt, dann ist  $S < 0$  und folglich  $|\vec{E}'| < |\vec{B}'|$  in allen Systemen. Analoges gilt natürlich auch für die umgekehrte Relation.
- Ist in einem System  $\vec{E} = 0$  oder  $\vec{B} = 0$ , so gilt  $P = 0$  und es ist stets  $\vec{E}' \perp \vec{B}'$ .
- Ist in einem System  $\vec{E} \perp \vec{B}$  und  $\vec{E} \neq 0 \neq \vec{B}$ , dann gibt es
  - für  $S > 0$  ein Inertialsystem, in dem  $\vec{B} = 0$  gilt,
  - für  $S < 0$  ein Inertialsystem, in dem  $\vec{E} = 0$  gilt.
- Ist  $S = 0$  und  $P = 0$ , so ist in allen Inertialsystemen  $\vec{E} \perp \vec{B}$  und  $|\vec{E}| = |\vec{B}|$ .

## 11.2. Die kovarianten Maxwell-Gleichungen

### 11.2.1. Transformationsverhalten von Ladungsverteilungen und Stromdichten

Die nächste Frage, die es zu klären gilt, ist das Verhalten von Ladungsverteilung  $\rho(\vec{r}, t)$  und Stromdichte  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  unter Lorentz-Transformation. Man weiß, dass die Gesamtladung eines abgeschlossenen Systems eine Lorentz-Invariante ist. Sei nun in IS die Ladungsdichte zeitunabhängig, d.h. man betrachte ruhende Ladungen, dann gilt

$$Q_V = \iiint_V \rho(\vec{r}, t) d^3\vec{r} \quad \rightarrow \quad Q_{\Delta V} = \rho(\vec{r}, t)\Delta x\Delta y\Delta z.$$

Dann betrachte man eine Lorentz-Transformation von IS nach IS' mit der Relativgeschwindigkeit  $\vec{v} = (v, 0, 0)$ , dann gilt

$$Q_{\Delta V} = Q_{\Delta V'} \iff \rho(\vec{r})\Delta x\Delta y\Delta z = \rho(\vec{r}')\Delta x'\Delta y'\Delta z',$$

wobei gemäß der Längenkontraktion in Bewegungsrichtung

$$\Delta x' = \frac{1}{\gamma(v)}\Delta x \quad \Delta y' = \Delta y \quad \Delta z' = \Delta z$$

gilt, also  $\rho(\vec{r})\Delta x\Delta y\Delta z = \frac{1}{\gamma(v)}\rho(\vec{r}')\Delta x\Delta y\Delta z$ , es gilt also  $\rho(\vec{r}') = \gamma(v)\rho(\vec{r}) > \rho(\vec{r})$ . Für den Beobachter in  $\text{IS}'$  bewegen sich die Ladungen umgekehrt mit einer Geschwindigkeit  $-\vec{v}$ , es gibt demnach in  $\text{IS}'$  eine zu beobachtende nichtverschwindende Stromdichte

$$\vec{j}'(\vec{r}', t) = \rho'(\vec{r}')(-\vec{v}) = -\rho(\vec{r})\gamma(v)\vec{v},$$

wobei  $\vec{j}'_{\parallel}(\vec{r}', t) = -\gamma(v)\rho(\vec{r})\vec{v}$  und  $\vec{j}'_{\perp}(\vec{r}', t) = 0$  bei Aufspaltung in Parallel- und Orthogonalteil gilt. Andererseits war aber  $\vec{j} = 0$  bzw.  $\vec{j}_{\parallel} = 0$  und  $\vec{j}_{\perp} = 0$  im Inertialsystem  $\text{IS}$ , sodass offenbar das Transformationsverhalten

$$\begin{aligned}\rho' &= \gamma(v)\rho = \gamma(v)\left(c\rho - \frac{1}{c^2}\vec{v}\vec{j}_{\parallel}\right) \\ \vec{j}'_{\parallel} &= \gamma(v)(-\rho\vec{v}) = \gamma(v)\left(\vec{j}_{\parallel} - \frac{1}{c}\vec{v}\rho c\right) \quad \vec{j}'_{\perp} = 0 = \vec{j}_{\perp}\end{aligned}$$

folgt. Bezeichnet man nun  $c\rho' = j^0$ , so ergeben sich die Ausdrücke

$$j^0 = \gamma(v)\left(j^0 - \frac{1}{c^2}\vec{c}\vec{j}_{\parallel}\right) \quad \vec{j}'_{\parallel} = \gamma(v)\left(\vec{j}_{\parallel} - \frac{1}{c}\vec{v}j^0\right) \quad \vec{j}'_{\perp} = \vec{j}_{\perp}.$$

Es transformiert dann  $j^{\mu} = (j^0, \vec{j}) = (c\rho, \vec{j})$  wie ein Vierervektor gemäß  $j^{\mu} \rightarrow j'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\nu}j^{\nu}$ . Weiter gelten nun die Beziehungen

$$\square\Phi = \frac{4\pi}{c}\rho c \quad \square\vec{A} = \frac{4\pi}{c}\vec{j}$$

mit dem Lorentz-Skalar  $\square := \partial^{\mu}\partial_{\mu}$ . Es muss dann  $A^{\mu} = (\Phi, \vec{A})$  ein Lorentz-Vierervektor sein, und somit gilt

$$\square A^{\mu} = \frac{4\pi}{c}j^{\mu}.$$

### 11.2.2. Herleitung der Maxwell-Gleichungen aus dem Relativitätsprinzip

Wir wollen jetzt die vollständigen Maxwell'schen Gleichungen aus dem Relativitätsprinzip ableiten, d.h. es werden lediglich die folgenden Annahmen gemacht:

1. Es gelte das Relativitätsprinzip.
2. Die Gesamtladung in einem abgeschlossenen Volumen ist unabhängig vom Inertialsystem.
3. Die elektromagnetische Wechselwirkungen können mittels eines elektrischen Feldes  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  und magnetischen Feldes  $\vec{B}(\vec{r}, t)$  gemäß der Lorentz-Kraft beschrieben werden, wobei im nichtrelativistischen Fall

$$\vec{F}_L = q\left(\vec{E} + \frac{1}{c}\vec{v} \times \vec{B}\right)$$

gelte, und die Transformation von  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  gemäß  $F^{\mu\nu}$  und  $\tilde{F}^{\mu\nu}$  erfolgt.

4. In einem beliebigen Inertialsystem gilt  $\vec{\nabla}\vec{E} = 4\pi\rho$ .
5. In einem beliebigen Inertialsystem gilt  $\vec{\nabla}\vec{B} = 0$ .

Aus der dritten Forderung folgt für das zugehörige Inertialsystem IS der Gaußsche Satz

$$\oint_{S(V)} \vec{E} d\vec{f} = \iiint_V \vec{\nabla} \cdot \vec{E} d^3\vec{r} = 4\pi \iiint_V \rho d^3\vec{r} = 4\pi Q_V .$$

Von einem anderen Inertialsystem IS' aus muss man dann  $\vec{E}'(\vec{r}', t')$  und  $\rho'(\vec{r}', t')$ , wobei nach der ersten Annahme dort auch  $Q_{V'} = Q_V$  ist. Es gilt demnach

$$\oint_{S(V')} \vec{E}' d\vec{f}' = 4\pi Q_V = 4\pi \iiint_{V'} \rho(\vec{r}', t') d^3\vec{r}' = \iiint_{V'} \vec{\nabla}' \cdot \vec{E}' d^3\vec{r}' ,$$

also folgt  $\vec{\nabla}' \cdot \vec{E}'(\vec{r}', t') = 4\pi \rho'(\vec{r}', t')$ . Folglich ist die Gleichung  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi \rho$  Lorentz-kovariant, sie sollte sich also durch Lorentz-Tensoren ausdrücken lassen. Nach der dritten Annahme gilt

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \sum_i \frac{\partial}{\partial x^i} E^i = -\frac{\partial}{\partial x^i} F^{0i} = -\partial_i F^{0i} - \partial_0 F^{00} = -\partial_\mu F^{0\mu} = \partial_\mu F^{\mu 0} = \frac{4\pi}{c} j^0 \quad \text{und}$$

$$\vec{\nabla}' \cdot \vec{E}' = -\frac{\partial}{\partial x'^i} F'^{0i} = -\partial'_\mu F'^{0\mu} = \partial'_\mu F'^{\mu 0} = \frac{4\pi}{c} j'^0 .$$

Da  $F^{\mu\nu}$  ein Lorentz-Tensor ist, gilt das Transformationsverhalten  $F'^{\mu\nu} = \Lambda^\mu_\alpha \Lambda^\nu_\beta F^{\alpha\beta}$  sowie außerdem  $x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$  und  $\partial'_\mu = \Lambda_\mu^\nu \partial_\nu$ , sodass

$$\begin{aligned} \Lambda_\mu^\nu \partial_\nu \Lambda^\mu_\alpha \Lambda^\kappa_\beta F^{\alpha\beta} &= \frac{4\pi}{c} \Lambda^\kappa_\beta j^\beta \iff \Lambda_\mu^\nu \Lambda^\mu_\alpha \Lambda^\kappa_\beta \partial_\nu F^{\alpha\beta} = \Lambda^\kappa_\beta \frac{4\pi}{c} j^\beta \\ \iff \Lambda^\kappa_\beta \left( \partial_\alpha F^{\alpha\beta} - \frac{4\pi}{c} j^\beta \right) &= 0 \implies \partial_\alpha F^{\alpha\beta} - \frac{4\pi}{c} j^\beta = 0 \end{aligned}$$

gilt. Dies ist die kovariante Schreibweise der inhomogenen vollständigen Maxwell-Gleichungen (M1) und (M4). Um sie in die uns bekannte Form zu bringen, betrachte man zuerst den Fall  $\beta = 0$ , dies liefert über

$$\partial_0 F^{00} + \partial_1 F^{10} + \partial_2 F^{20} + \partial_3 F^{30} = \frac{\partial}{\partial x} E_x + \frac{\partial}{\partial y} E_y + \frac{\partial}{\partial z} E_z = \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{4\pi}{c} j^0 = 4\pi \rho$$

die Gleichung (M1). Für (M4) betrachte den Fälle  $\beta = 1, 2, 3$ , wobei für  $\beta = 1$  explizit

$$\begin{aligned} \partial_0 F^{10} + \partial_1 F^{11} + \partial_2 F^{21} + \partial_3 F^{31} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} E_x + \frac{\partial}{\partial y} B_z - \frac{\partial}{\partial z} B_y = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} E_x + (\text{rot } \vec{B})_x \\ &= \frac{4\pi}{c} j^1 = \frac{4\pi}{c} j_x \implies \text{rot } \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{E} \end{aligned}$$

ergibt. Nach der fünften Annahme gilt  $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = \frac{\partial}{\partial x^i} B^i = 0$  sowie  $\vec{\nabla}' \cdot \vec{B}' = \frac{\partial}{\partial x'^i} B'^i = 0$  und damit

$$\partial'_i \tilde{F}'^{0i} = 0 = \partial'_i \tilde{F}'^{0i} + \partial'_0 \tilde{F}'^{00} = \partial'_\mu \tilde{F}'^{0\mu} .$$

Aus  $\partial'_\mu \tilde{F}'^{0\mu} = 0$  folgt durch eine explizite Transformation dann

$$\Lambda_\mu^\nu \partial_\nu \Lambda^\mu_\alpha \Lambda^\kappa_\beta \tilde{F}^{\alpha\beta} = \Lambda_\mu^\nu \Lambda^\mu_\alpha \Lambda^\kappa_\beta \partial_\nu \tilde{F}^{\alpha\beta} = \delta_\alpha^\nu \Lambda^\kappa_\beta \partial_\nu \tilde{F}^{\alpha\beta} = 0 = \partial_\alpha \tilde{F}^{\alpha\beta} ,$$

sodass die inhomogenen Maxwellgleichungen in kovarianter Form dann

$$(M1) \text{ und } (M4) \quad \partial_\mu F^{\mu\nu} = \frac{4\pi}{c} j^\nu$$

$$(M2) \text{ und } (M3) \quad \partial_\mu \tilde{F}^{\mu\nu} = 0$$

lauten. Man beachte dass aus der ersten Gleichung durch  $\partial_\nu(\partial_\mu F^{\mu\nu}) = \partial_\nu\partial_\mu F^{\mu\nu} = 0 = \frac{4\pi}{c}\partial_\nu j^\nu$  direkt  $\partial_\nu j^\nu = 0$  folgt. Insbesondere erhalten wir so durch

$$\partial_\nu j^\nu = \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}j^0 + \frac{\partial}{\partial x^i}j^i = \frac{\partial}{\partial t}\rho + \vec{\nabla}\vec{j} = 0$$

wieder die Kontinuitätsgleichung zwischen Ladungsverteilung und Stromdichte.

### 11.2.3. Entkopplung der Maxwell-Gleichungen durch Potentiale

Als nächstes werden wird die Entkopplung der Gleichungen durch Einführung von Potentialen bewerkstelligen. Dazu stellen wir  $F^{\mu\nu}$  durch

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu$$

mit einem geeigneten Viererpotential  $A^\mu = (A^0, \vec{A})$  dar, welches sich als üblicher Lorentz-Vierervektor transformiert. Es gilt dann

$$F^{0i} = \partial^0 A^i - \partial^i A^0 = \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}A^i - \frac{\partial}{\partial x^i}A^0 = \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}A^i + \frac{\partial}{\partial x^i}A^0 = -E^i,$$

also folgt für  $i = 1, 2, 3$  dann in vektorieller Formulierung die Potentialdarstellung

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}A^0 - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{A},$$

sodass wir die Identifikation  $A^0 = \Phi$  und  $A^i = \vec{A}$  erhalten. Weiter betrachte man dann die Komponente

$$F^{12} = \partial^1 A^2 - \partial^2 A^1 = -\frac{\partial}{\partial x}A_y + \frac{\partial}{\partial y}A_x = -B_z,$$

so folgt erneut  $B_z = (\text{rot } \vec{A})_z$ , es gilt also  $A^\mu = (\Phi, \vec{A})$ . Wir wir aber bereits im vorigen Kapitel bemerkt haben, ist das Potential  $A^\mu$  durch den Tensor  $F^{\mu\nu}$  nicht eindeutig bestimmt. Dazu betrachtet man die Transformation  $A^\mu \rightarrow \bar{A}^\mu = A^\mu + \partial^\mu f(x)$ , für die dann

$$\bar{F}^{\mu\nu} = \partial^\mu \bar{A}^\nu - \partial^\nu \bar{A}^\mu = \partial^\mu A^\nu + \partial^\mu \partial^\nu f - \partial^\nu A^\mu - \partial^\nu \partial^\mu f = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu = F^{\mu\nu}$$

folgt. Somit hat man die Freiheit das Viererpotential  $A^\mu$  zu eichen, wobei für die zuvor vorgestellte Eichtransformation explizit in Komponenten

$$\bar{A}^0 = A^0 + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}f \quad \text{und} \quad \bar{A}^i = A^i + \partial^i f = A^i - \nabla^i f$$

gilt, also  $\Phi \rightarrow \bar{\Phi} = \Phi + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}f$  und  $\vec{A} \rightarrow \vec{\bar{A}} = \vec{A} - \vec{\nabla}f$ . Setzt man nun den Potentialansatz  $F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu$  in die zweite gefundene Maxwell-Gleichungen ein, so zeigt sich, dass wegen

$$\partial_\mu \tilde{F}^{\mu\nu} = \partial_\mu \frac{1}{2}\epsilon^{\mu\nu\alpha\beta}F_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\epsilon^{\mu\nu\alpha\beta}(\partial_\mu\partial_\alpha A_\beta - \partial_\mu\partial_\beta A_\alpha) = 0$$

bereits diese Gleichung erfüllt ist. Für die erste Gleichung liefert die Potentialdarstellung

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = \partial_\mu\partial^\mu A^\nu - \partial_\mu\partial^\nu A^\mu = \square A^\nu - \partial^\nu(\partial_\alpha A^\alpha) = \frac{4\pi}{c}j^\nu,$$

sodass wir mit dem Potential-Ansatz nur noch eine einzelne Maxwell-Gleichung

$$\square A^\nu - \partial^\nu(\partial_\alpha A^\alpha) = \frac{4\pi}{c} j^\nu$$

für das Viererpotential erhalten. Wenn wir dann noch die Lorentz-Eichung mit  $\partial_\alpha A^\alpha = 0$  für das Viererpotential wählen, so vereinfacht sich diese weiter zu

$$\square A^\nu = \frac{4\pi}{c} j^\nu .$$

### 11.2.4. Lösung der kovarianten Maxwell-Gleichungen

Es bleibt zu klären, wie sich die kovarianten Maxwell-Gleichungen lösen lassen - dies geschieht am besten durch die Methode der Green-Funktion. Dazu ermittle man die Greenfunktion  $G(\vec{r}, t)$ , die durch die Differentialgleichung

$$\square G(\vec{r}, t) = \square(x) = 4\pi\delta^{(3)}(\vec{r})\delta(t)$$

definiert ist. Eine Lösung des Potentials  $A^\mu(x)$  zu gegebener Stromdichte ist dann durch

$$A^\mu(x) = \frac{1}{c} \int G(x - x') j^\mu(x') d^4x'$$

gegeben, denn es gilt umgekehrt

$$\square A^\mu(x) = \frac{4\pi}{c} \int \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') j^\mu(\vec{r}', t') d^3\vec{r}' dt' = \frac{4\pi}{c} j^\mu(\vec{r}, t) .$$

Es bleibt also nur eine Lösung der Greenschen Gleichung zu bestimmen, dies erfolgt mit Hilfe der Fourier-Transformation

$$G(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \iiint d^3\vec{k} \int d\omega e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{-i\omega t} \tilde{G}(\vec{k}, \omega) .$$

Durch Einsetzen findet man dann

$$\frac{1}{(2\pi)^4} \iiint d^3\vec{k} \int d\omega \left( -\frac{\omega^2}{c^2} + \vec{k}^2 \right) e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{-i\omega t} \tilde{G}(\vec{k}, \omega) = \frac{4\pi}{(2\pi)^4} \iiint d^3\vec{k} \int d\omega e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{-i\omega t} ,$$

sodass sich für die Fourier-transformierte Greensche-Funktion offensichtlich

$$\left( -\frac{\omega^2}{c^2} + \vec{k}^2 \right) \tilde{G}(\vec{k}, \omega) = 4\pi \iff \tilde{G}(\vec{k}, \omega) = -\frac{4\pi}{\frac{\omega^2}{c^2} - \vec{k}^2}$$

ergibt. Für die Rücktransformierte erhalten wir damit dann folglich

$$G(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \iiint d^3\vec{k} \int d\omega e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{-i\omega t} \frac{4\pi}{\frac{\omega^2}{c^2} - \vec{k}^2} = \begin{cases} \frac{1}{|\vec{r}|} \delta(1 - \frac{1}{c}|\vec{r}|) & : t > 0 \\ 0 & : t < 0 \end{cases} =: G_{\text{ret}}(x) ,$$

womit eine mögliche Lösung gefunden wäre, die auch als  $2c\Theta(r_0)\delta(x^2)$  geschrieben wird. Für das Viererpotential ergibt sich somit schließlich

$$A^\mu(x) = \frac{1}{c} \int \Theta(x_0 - x'_0) \delta((x - x')^2) j^\mu(x') d^4x' = \frac{1}{c} \int \frac{\delta(t - t' - \frac{1}{c}|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} j^\mu(x') d^4x' .$$

Betrachten wir abschließend noch den Spezialfall einer beliebigen bewegten Ladung  $q$ , für die wir den Viererstrom

$$j^\mu = q(c\delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{R}(t)), \vec{v}\delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{R}(t)))$$

erhalten. Die zugehörigen Viererpotentiale heißen **Liènard-Wiechert-Potentiale** und haben die Form

$$A^\mu(x) = q \frac{u^\mu}{u_\alpha D_{\text{ret}}^\alpha} \quad \text{mit} \quad u^\mu = \gamma(v)(c, \vec{v}),$$

wobei der Vierervektor  $D_{\text{ret}}^\alpha = (D_{\text{ret}}, \vec{D}_{\text{ret}})$  durch  $\vec{D}_{\text{ret}} = \vec{r} - \vec{R}(t_{\text{ret}})$  mit

$$u_\alpha D_{\text{ret}}^\alpha = \gamma(v)(cD_{\text{ret}} + \vec{v}\vec{D}_{\text{ret}}) = \gamma(v)cD_{\text{ret}} \left(1 - \frac{1}{c}\vec{c}\hat{D}_{\text{ret}}\right)$$

gegeben ist.



Teil IV.  
Quantenmechanik

# 12. Empirische Notwendigkeit der Strukturen der Quantenmechanik

## 12.1. Einleitung

Der ersten Teil des Skriptes wurde von der Newtonschen Mechanik dominiert. Viele der vorausgesetzten Annahmen der Newtonschen Theorie werden im Rahmen der Relativitätstheorie bereits modifiziert, wie im zweiten Teil gesehen. Nahezu zeitgleich mit der Publikation der Relativitätstheorie fand Anfang des 20. Jahrhunderts eine weitere große Umwälzung in der Physik statt, die sich auf der Planckschen Quantentheorie stütze. In den nachfolgenden Jahrzehnten entwickelte sich die Quantentheorie zur Quantenmechanik weiter, hauptsächlich durch das Wirken Heisenbergs und Schrödingers. Die die Entdeckung sogenannter Quantenfeldtheorien Mitte des 20. Jahrhunderts gelang schließlich die Vereinigung der speziellen Relativitätstheorie und Quantenmechanik. Derartige Theorien stellen bis heute die Basis des Standardmodells dar.

In diesem vierten Teil soll nun elementar die Quantentheorie und Quantenmechanik eingeführt werden, wobei wir zuerst nach der Notwendigkeit fragen. Dazu ist es sinnvoll, noch einmal über die bisher verwendeten Konzepte und Objekte zu reflektieren.

- Makroskopische Körper, idealisiert als Massepunkte behandelt, kann man direkt visuell beobachten und identifizieren. Die zur Beschreibung verwendete Theorie ist die Newtonsche Mechanik, diese ist **kausal** und **deterministisch**. Dabei meint die erstere Kausalitätseigenschaft, dass die genaue Kenntnis des Systemzustands zum Zeitpunkt  $t_0$  durch die Beschreibung den Zustand zu jedem anderen Zeitpunkt  $t \neq t_0$  liefert. Unter deterministisch verstehen wir, dass es uns prinzipiell möglich ist, alle möglichen physikalischen Eigenschaften und Größen eines Systems zu kennen.

Ein Zustand der Newtonschen Mechanik ist durch Angabe der Orte und Impulse der  $N$  Massepunkte spezifiziert, also durch  $q_\alpha$  und  $p_\alpha$  für  $\alpha = 1, \dots, f$  zu einem gegebenen Zeitpunkt. Dabei existieren endlich viele (diskrete) Freiheitsgrade.

- Klassische Felder, beispielsweise das elektrische  $\vec{E}$ - oder magnetische  $\vec{B}$ -Feld, sind nicht direkt beobachtbar und zu identifizieren. Wir schließen aufgrund ihrer Wirkung auf andere Körper auf ihre Anwesenheit. Dennoch sind sie als vollwertige physikalische Objekte zu betrachten, da man ihnen Energie, Impuls und Drehimpuls zuordnen kann. Die verwendete Theorie ist die Maxwellsche Elektrodynamik, auch sie ist kausal und deterministisch.

Hier ist ein Zustand durch die Angabe der Felder  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$  an jedem Raumpunkt  $\vec{r}$  zu gegebener Zeit  $t$  spezifiziert, wobei hier kontinuierlich unendlich viele Freiheitsgrade vorliegen.

Bei diesen beiden Objekten handelt es sich um völlig disjunkte Gruppen. Man beachte, dass der Zustand dabei durch Resultate von Messungen bestimmter messbarer Größen (sogenannter Observablen) gegeben ist. Dabei sind mikroskopische Objekte wie Atome oder Elektronen sinnlich nicht direkt wahrnehmbar.

## 12.2. Korpuskularnatur des Lichts

In diesem Abschnitt werden wir eine Reihe von Phänomenen und Experimenten kennenlernen, die Anfang des 20. Jahrhunderts viele Widersprüche innerhalb der Physik aufwarfen. Ein Großteil dieser Probleme erwuchs aus dem Unverständnis der Natur des Lichts, dass erst im Rahmen der Quantentheorie sinnvoll beschrieben werden kann.

### 12.2.1. Der photoelektrische Effekt

Der englische Physiker J. J. Thompson führte 1899 ein konzeptionell einfaches Experiment durch, welches aber ein (zur damaligen Zeit) verblüffendes Resultat erzielte. UV-Licht trifft dabei auf eine Metallplatte, wobei es Elektronen aus dem Metallverbund heraus schlägt. Empirisch stellt man dabei fest:

- Die Energie der freigesetzten Elektronen ist proportional zur Lichtfrequenz  $\nu$ , jedoch nicht abhängig von der Intensität des einfallenden Lichts.
- Die Zahl der freigesetzten Elektronen ist proportional zur Lichtintensität.
- Es gibt keinerlei zeitliche Verzögerung zwischen dem Eintreffen des Lichts und der Emission der Elektronen.

Im Rahmen der klassischen Maxwellschen Theorie der Elektrodynamik aus dem vorigen Teil ist dies nicht erklärbar. Die Erklärung Einsteins<sup>1</sup> lautet nun wie folgt:

- Da keine zeitliche Verzögerung auftritt, müssen die Elektronen ihre Energie in kürzester Zeit aufnehmen, quasi wie bei einem direkten Stoß mit einem anderen Teilchen, einem Energiequant. Mit anderen Worten scheint die übermittelte Energie des Strahlungsfeldes in räumlich verteilten Paketen lokalisiert zu sein.
- Wegen der Frequenzabhängigkeit der Energie aller herausgeschossenen Elektronen haben alle Energiepakete die gleiche Energie  $E_\nu = h\nu$ , wobei diese Formel auf Planck zurückgeht.
- Die Intensität des Lichts ist proportional zur Anzahl der Energiepakete.

Energiequanten, also **Photonen**, bewegen sich mit der Lichtgeschwindigkeit  $c$ , nach der speziellen Relativitätstheorie müssen sie demnach die Ruhemasse Null haben, während sie eine Energie von

$$E_\nu = \hbar\omega = h\nu$$

besitzen. Man beachte, dass die Anzahl der Photonen meist sehr groß ist.

**Beispiel:** Betrachte eine 100 W-Glühlampe, die hauptsächlich gelbes Licht mit einer Wellenlänge von  $\lambda = 600 \text{ nm}$  liefert. Die pro Sekunde abgestrahlte Energie beträgt dann 100 J. Für die Energie eines einzelnen Photons erhält man

$$E = h\nu \approx (2\pi \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}) \cdot \left( \frac{1}{2} \cdot 10^{-15} \frac{1}{\text{s}} \right) = \pi \cdot 10^{-19} \text{ J} ,$$

also entspricht die abgestrahlte Energie  $N = \frac{100 \text{ J}}{3 \cdot 10^{-19} \text{ J}} \approx 3 \cdot 10^{20}$  gelben Lichtphotonen, d.h. auf eine Fläche von einem Quadratcentimeter im Abstand von einem Meter treffen

$$\frac{N}{A} = \frac{3 \cdot 10^{20}}{4\pi \cdot 100^2 \text{ cm}^2} = \frac{1}{4} \cdot 10^{16} \frac{\text{Photonen}}{\text{s} \cdot \text{cm}^2} .$$

<sup>1</sup>Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass Einstein nicht - wie oft angenommen - den Nobelpreis für seine Relativitätstheorie erhielt, sondern eben für die Erklärung des beschriebenen photoelektrischen Effekts.

### 12.2.2. Der Comptoneffekt

Einen weiteren deutlichen Hinweis auf die materielle Natur des Lichts fand Compton 1923 insofern, dass man Lichtquanten offenbar auch einen Impuls zuordnen muss. Monochromatisches hochenergetisches Licht (Röntgen-Strahlung) trifft dabei auf Elektronen (Graphit), wobei man die Intensität und die Wellenlänge der Streustrahlung in Abhängigkeit vom Streuwinkel messe. Dabei ergeben sich unter anderem folgende Intensitätsspektren:

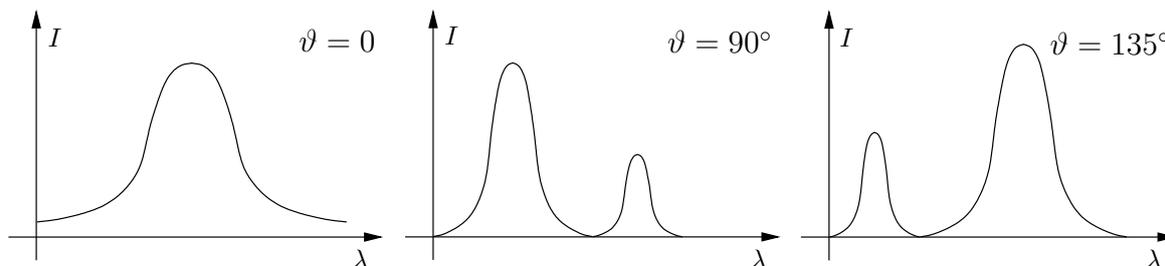


Abbildung 12.1.: Intensitätsverteilungen verschiedener Streuwinkel.

#### Interpretation im Photonenbild

Man geht davon aus, dass das Photon elastisch am Elektron gestreut wird, die Wellenlänge wird dabei durch die relativistische Viererimpulserhaltung gegeben. Die Frage ist nun, welchen Impuls man einem Photon zuschreiben soll. Für ein relativistisches Teilchen hat man allgemein

$$E^2 = (pc)^2 + (m_0c^2)^2 \xrightarrow{m_0=0} E_\gamma^2 = (pc)^2 \implies |\vec{p}| = \frac{E_\gamma}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \hbar|\vec{k}|.$$

Wenn  $\hat{k}$  die Ausbreitungsrichtung der Welle ist, so hat man außerdem  $\hat{p} = \hat{k}$  für die Impulsrichtung, sodass man die **de-Broglie-Beziehungen**

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad \text{und} \quad E = \hbar\omega$$

erhält. Mittels dieses Ansatzes für  $p_\gamma^\mu = (E_\gamma, \vec{p}_\gamma) = \hbar(\omega, \vec{k})$  erhält man dann ganz einfach die Wellenlänge

$$\lambda' = \lambda + 2\pi \frac{\hbar}{m_e c} (1 - \cos \vartheta)$$

für die Wellenlänge des auslaufenden Teilchens, wobei  $\frac{\hbar}{m_e c}$  die **Compton-Wellenlänge** des Elektrons ist.

Licht hat aber noch den zusätzlichen Freiheitsgrad der Polarisation, also muss auch den Photonen noch dieser zusätzliche Freiheitsgrad zugeschrieben werden. Ganz analog können sich Photonen in einem Zustand der  $x$ - oder  $y$ -Polarisation befinden, oder auch links- bzw. rechtszirkular, etc.

Man betrachte dann eine monochromatische Welle in  $z$ -Richtung, sie sei darüberhinaus polarisiert, d.h. es liegt ein Strom von identischen Photonen vor. Man richte diese nun auf einen halbdurchlässigen Spiegel, wobei ein Teil der Photonen transmittiert und ein Teil reflektiert wird. Dieses Ergebnis interpretieren wir nun ebenfalls im Photonenbild.

Da alle Photonen identisch sind und daher auch identisch mit dem Spiegel wechselwirken, muss es eine Wahrscheinlichkeit  $p_{\text{tr}}$  gegen, dass das Photon den Spiegel passiert und eine Wahrscheinlichkeit  $p_{\text{ref}}$ , dass es reflektiert wird. Bei einem idealen Spiegel, d.h. es findet keine Absorption

der Photonen durch den Spiegel selbst statt, gilt dann  $p_{\text{tr}} + p_{\text{ref}} = 1$ . Es scheint hier folglich ein gewisses Element der Zufälligkeit zu geben, also einen inhärent statistischen Charakter der Theorie mikroskopischer Objekt.

## 12.3. Strukturen der Quantenmechanik am Beispiel der Polarisation

Diesen statistischen Charakter werden wir nun genauer untersuchen. Dazu betrachte man eine ebene monochromatische Welle mit  $\vec{k} = (0, 0, k)$ , aber mit verschiedenen Polarisationen im Vakuum. Dies ist eine Lösung der freien Wellengleichung, die wir im vorigen Abschnitt kennengelernt haben. Für das elektrische Feld gilt

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = (E_{0x}\hat{x} + E_{0y}\hat{y})e^{i(kz-\omega t)} = \begin{pmatrix} E_{0x} \\ E_{0y} \\ E_{0z} \end{pmatrix} e^{i(kz-\omega t)},$$

wobei  $E_{0x}, E_{0y} \in \mathbb{R}$  und  $\omega = \omega(\vec{k}) = c|\vec{k}|$  sind. Setzt man dann weiter  $E_{0x} = \varepsilon_x e^{i\varphi}$  und  $E_{0y} = \varepsilon_y e^{i(\varphi+\delta)}$ , so ergibt sich für das physikalische Feld (also den Realteil)

$$\vec{E}^{\text{phy}}(\vec{r}, t) = \Re \vec{E}(\vec{r}, t) = \hat{x}E_x^{\text{phy}}(\vec{r}, t) + \hat{y}E_y^{\text{phy}}(\vec{r}, t)$$

mit  $E_x^{\text{phy}}(\vec{r}, t) = \varepsilon_x \cos(kz - \omega t)$  und  $E_y^{\text{phy}}(\vec{r}, t) = \varepsilon_y \cos(kz - \omega t + \delta)$ , wobei wir den Phasenfaktor  $\varphi = 0$  setzen. Man erhält also

$$\vec{E}^{\text{phy}}(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \varepsilon_x \cos(kz - \omega t) \\ \varepsilon_y \cos(kz - \omega t + \delta) \\ 0 \end{pmatrix} \implies \vec{B}^{\text{phy}}(\vec{r}, t) = -E_y^{\text{phy}}\hat{x} + E_x^{\text{phy}}\hat{y}.$$

Für die zugehörige Energiedichte dieser elektromagnetischen Konfiguration gilt dann

$$\begin{aligned} w(\vec{r}, t) &= \frac{1}{8\pi} [(\vec{E}^{\text{phy}})^2 + (\vec{B}^{\text{phy}})^2] = \frac{1}{4\pi} [\varepsilon_x^2 \cos^2(kz - \omega t) + \varepsilon_y^2 \cos^2(kz - \omega t + \delta)] \\ &= \frac{1}{8\pi} (\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2) = \frac{1}{8\pi} \vec{E}^2, \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt über eine Periodendauer zeitlich gemittelt wurde. Die Polarisation wird nun durch  $\delta$  und  $\frac{\varepsilon_x}{\varepsilon_y}$  bestimmt, wie wir es schon in Abschnitt 10.2.4 auf Seite 124 gesehen haben. Die später verwendeten Polarisationsarten sind die folgenden:

- *Lineare Polarisation:* Es ist  $\delta = 0$  und  $E_{0x} = \varepsilon_x$  sowie  $E_{0y} = \varepsilon_y$ , dann gilt für das elektrische Feld

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = (\varepsilon_x\hat{x} + \varepsilon_y\hat{y}) \cos(kz - \omega t) = \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ 0 \end{pmatrix} \cos(kz - \omega t) = \Re \begin{pmatrix} E_{0x} \\ E_{0y} \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(kz-\omega t)}$$

Man unterscheidet bei der linearen Polarisierung nun noch einige Spezialfälle, die in Tabelle 12.1 aufgeführt sind.

- *Zirkuläre Polarisation:* Hier ist  $\delta = \pm \frac{\pi}{2}$  und  $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon$ , wobei zwischen den folgenden beiden Fällen zu unterscheiden ist:

$x$ -Polarisation:	$\varepsilon_x = \varepsilon$	$\varepsilon_y = 0$
$y$ -Polarisation:	$\varepsilon_x = 0$	$\varepsilon_y = \varepsilon$
$x_\varphi$ -Polarisation:	$\varepsilon_x = \varepsilon \cos \varphi$	$\varepsilon_y = \varepsilon \sin \varphi$
$y_\varphi$ -Polarisation:	$\varepsilon_x = -\varepsilon \sin \varphi$	$\varepsilon_y = \varepsilon \cos \varphi$

**Tabelle 12.1.:** Spezielle lineare Polarisationen

- Bei **rechts-zirkularer Polarisation** ist  $\delta = +\frac{\pi}{2}$ , für das physikalische  $\vec{E}$ -Feld führt dies zu

$$\vec{E}^{\text{phy}} = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} [\hat{x} \cos(kz - \omega t) - \hat{y} \sin(kz - \omega t)] = \Re \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(kz - \omega t)}$$

- Für **Links-zirkulare Polarisation** ist umgekehrt  $\delta = -\frac{\pi}{2}$ , also gilt

$$\vec{E}^{\text{phy}} = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} [\hat{x} \cos(kz - \omega t) + \hat{y} \sin(kz - \omega t)] = \Re \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(kz - \omega t)} .$$

- *Elliptische Polarisation:* Wie schon bei der Elektrodynamik erwähnt, führt der Fall ungleicher Richtungsamplituden, also  $\frac{\varepsilon_x}{\varepsilon_y} \neq 1$  zu einer elliptischen Polarisation, die wir aber nicht weiter betrachten.

Man betrachte nun eine monochromatische Welle in  $z$ -Richtung mit beliebiger Polarisation, sodass wir das allgemeine komplexe elektrische Feld

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} E_{0x} \\ E_{0y} \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(kz - \omega t)}$$

erhalten - es erweist sich im Folgenden günstig, den komplexen  $\vec{E}$ -Vektor statt dem physikalischen Teil zu betrachten. Als Polarisations-(Zustands-)Vektor der Welle definieren wir den komplexen Vektor

$$\vec{P} = \begin{pmatrix} E_{0x} \\ E_{0y} \\ 0 \end{pmatrix} ,$$

dann ist  $\vec{E}^{\text{phy}}(\vec{r}, t) = \Re(\vec{P}e^{i(kz - \omega t)})$ . Für spezielle Polarisationen gilt

$$\vec{P}_{\text{lin}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{P}_x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{P}_y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{P}_{x_\varphi} = \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{P}_{y_\varphi} = \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{P}_R = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{P}_L = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} .$$

**Bemerkung:** Man kann nun recht einfach zeigen, dass sich jede beliebig polarisierte (also im allgemeinen elliptisch polarisierte) Welle darstellen lässt als komplexe Überlagerung

- einer  $x$ - und einer  $y$ -linear polarisierten Welle,
- einer  $x_\varphi$ - und einer  $y_\varphi$ -linear polarisierten Welle,
- einer  $R$ - und einer  $L$ -zirkular polarisierten Welle.

Insbesondere ist jede beliebig polarisierte Welle also als  $R$ -/ $L$ -Überlagerung darstellbar, sowie jede zirkular polarisierte als Überlagerung zweier orthogonaler linear polarisierter Wellen:

$$\vec{P}_{\text{lin}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varepsilon_x - i\varepsilon_y) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}}(\varepsilon_x + i\varepsilon_y) \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha_R \vec{P}_R + \alpha_L \vec{P}_L$$

$$\vec{P}_R = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + i \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha_x \vec{P}_x + \alpha_y \vec{P}_y$$

$$\vec{P}_R = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}}(\cos \varphi + i \sin \varphi) \vec{P}_{x_\varphi} + \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}}(-\sin \varphi + i \cos \varphi) \vec{P}_{y_\varphi} = \alpha_{x_\varphi} \vec{P}_{x_\varphi} + \alpha_{y_\varphi} \vec{P}_{y_\varphi}$$

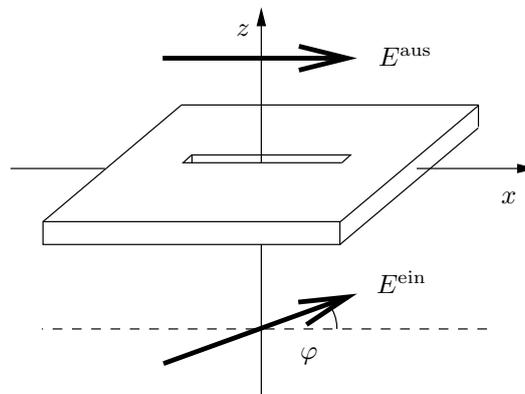
Man betrachte nun eine solche ebene monochromatische Welle mit Polarisationszustandsvektor  $\vec{P}$  im Partikelbild. Da jedes Photon die Energie  $E_\gamma = h\nu$  trägt, gilt für den zu einer gegebenen Welle  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  gehörigen Photonenstrom von  $N$  Photonen im Volumen  $V = R^2 L$

$$N \cdot h\omega = W_\gamma = \frac{1}{8\pi} V |\vec{E}|^2 \iff \frac{N}{V} = \frac{1}{8\pi \cdot h\omega} |\vec{E}|^2 .$$

Wir studieren im Folgenden nun die Vorgänge die auftreten, wenn man die Welle (den Photonenstrom) mit Vorgängen in Wechselwirkung bringt, welche die Polarisation beeinflussen.

### 12.3.1. Erster Versuch: $x_\varphi$ -polarisiertes Licht durch $x$ -Polarisator

Man positioniere ein Nicol-Prisma (dies ist ein linearer Polarisator) so in den Photonenstrom, dass er nur  $x$ -polarisierte Wellen durchlässt, und lasse dann  $x_\varphi$ -polarisiertes Licht einfallen. Empirisch stellt man dann eine Intensitätsschwächung  $|\vec{E}^{\text{ein}}|^2 > |\vec{E}^{\text{aus}}|^2$  fest, zudem ist die auslaufende Welle  $x$ -polarisiert.



### Interpretation im Wellenbild

Für die einlaufende Welle gilt  $\vec{E}^{\text{ein}}(\vec{r}, t) = \hat{x}E_x^{\text{ein}}(\vec{r}, t) + \hat{y}E_y^{\text{ein}}(\vec{r}, t) = \vec{P}_{x_\varphi} e^{i(kz - \omega t)}$ , also folgt für die Energie in einem Volumen  $V$

$$W_V^{\text{ein}} = \frac{1}{8\pi} V |\vec{E}^{\text{ein}}|^2 = \frac{1}{8\pi} V (|E_{0x}|^2 + |E_{0y}|^2) .$$

Weiter hat man für die auslaufende Welle  $\vec{E}^{\text{aus}}(\vec{r}, t) = \hat{x}E_x^{\text{aus}}(\vec{r}, t) = \hat{x}E_{0x} e^{i(kz - \omega t)}$ , also folgt entsprechend  $W_V^{\text{aus}} = \frac{1}{8\pi} V |E_{0x}|^2$ , für den transmittierten Intensitätsanteil gilt damit

$$\frac{W^{\text{aus}}}{W^{\text{ein}}} = \frac{|\vec{E}^{\text{aus}}|^2}{|\vec{E}^{\text{ein}}|^2} = \frac{|E_{0x}|^2}{|E_{0x}|^2 + |E_{0y}|^2} = \frac{\varepsilon^2 \cos^2 \varphi}{\varepsilon^2 \cos^2 \varphi + \varepsilon^2 \sin^2 \varphi} = \cos^2 \varphi .$$

### Interpretation im Teilchenbild

Die einlaufende Welle entspricht einem Strom aus völlig identischen Photonen, die durch die drei Größen  $(E, \vec{p}, \vec{P}_{x_\varphi})$  charakterisiert sind. Aus der Intensitätsabschwächung geht hervor, dass nur ein Teil der Photonen, nämlich  $N \cos^2 \varphi$  Stück, den Polarisator passiert. Demnach hat jedes Photon eine Wahrscheinlichkeit  $P_{\text{tr}} = \cos^2 \varphi$  transmittiert zu werden.

In der Regel gehen nach Einlaufen von  $N$  (endlichen vielen) Photonen aber nicht genau  $N \cos^2 \varphi$  viele hindurch, dieser genaue Wert gilt nur für  $N \rightarrow \infty$ . Da alle transmittierten Photonen zudem  $x$ -polarisiert sind, kann man die Transmissionswahrscheinlichkeit auch so auffassen, als die Wahrscheinlichkeit, dass ein Photon, welches sich im  $x_\varphi$ -Polarisationszustand befindet, nach Wechselwirkung mit dem  $x$ -Polarisator als  $x$ -polarisiert vorgefunden zu werden.

### 12.3.2. Zweiter Versuch: $x_\varphi$ -polarisiertes Licht durch $y$ -Polarisator

Nun betrachten wir das Nicol-Prisma in  $y$ -Richtung und lassen wieder  $x_\varphi$ -polarisiertes Licht einfallen. Völlig analog zum vorigen Versuch findet sich eine Intensitätsabschwächung  $|\vec{E}^{\text{ein}}|^2 > |\vec{E}^{\text{aus}}|^2$  und die auslaufende Welle ist  $y$ -polarisiert.

### Interpretation im Wellenbild

Es gilt  $\vec{E}^{\text{ein}}(\vec{r}, t) = \hat{x}E_{0x} e^{i(kz - \omega t)} + \hat{y}E_{0y} e^{i(kz - \omega t)}$  für die einlaufende Welle mit  $E_{0x} = \varepsilon \cos \varphi$  und  $E_{0y} = \varepsilon \sin \varphi$ , die Energiedichte ist damit

$$W_V^{\text{ein}} = \frac{1}{8\pi} |\vec{E}^{\text{ein}}|^2 = \frac{1}{8\pi} V (|E_{0x}|^2 + |E_{0y}|^2) = \frac{V\varepsilon^2}{8\pi} (\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi) .$$

Analog zum vorigen Versuch gilt  $\vec{E}^{\text{aus}} = \hat{y}E_{0y} e^{i(kz - \omega t)}$  für die auslaufende Welle, die damit dann eine Energie von  $W_V^{\text{aus}} = \frac{V}{8\pi} |\vec{E}^{\text{aus}}|^2 = \frac{V\varepsilon^2}{8\pi} \sin^2 \varphi$  aufweist. Es ergibt sich eine Transmissionswahrscheinlichkeit von

$$\frac{W^{\text{aus}}}{W^{\text{ein}}} = \frac{|E_{0y}|^2}{|E_{0x}|^2 + |E_{0y}|^2} = \sin^2 \varphi .$$

### Interpretation im Teilchenbild

Vom Teilchenbild aus betrachtet folgt dieselbe Interpretation, wie im vorigen Versuch: Die Wahrscheinlichkeit eines Photons in den  $y$ -Polarisator zu „passen“ ist gerade  $\sin^2 \varphi$ .

### 12.3.3. Dritter Versuch: $x_\varphi$ -linear polarisiertes Licht durch $R$ -Polarisator

Als nächstes schicken wir  $x_\varphi$ -linear polarisiertes Licht durch einen  $R$ -zirkularen Polarisator. Erneut findet sich eine Intensitätsschwächung bei der Transmission und das austretende Licht ist durchweg  $R$ -zirkular polarisiert.

#### Interpretation im Wellenbild

Obwohl vom Ansatz her völlig analog zu den vorigen beiden Experimenten, sieht das einlaufende Feld mit

$$\vec{E}^{\text{ein}}(\vec{r}, t) = \varepsilon \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(kz - \omega t)} = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi} e^{i(kz - \omega t)} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} e^{i\varphi} e^{i(kz - \omega t)} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}$$

etwas komplizierter aus, für die zugehörige Energiedichte ergibt sich

$$W_V^{\text{ein}} = \frac{V}{8\pi} |\vec{E}^{\text{ein}}|^2 = \frac{V}{8\pi} \cdot \frac{1}{2} \varepsilon^2 (|e^{-i\varphi}|^2 + |e^{i\varphi}|^2) = \frac{V \varepsilon^2}{8\pi}.$$

Die auslaufende Welle hat die Form

$$\vec{E}^{\text{aus}}(\vec{r}, t) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi} e^{i(kz - \omega t)} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit der Energiedichte  $W_V^{\text{aus}} = \frac{V}{8\pi} |\vec{E}^{\text{aus}}|^2 = \frac{V}{8\pi} \cdot \frac{1}{2} \varepsilon^2$ , für die Transmissionswahrscheinlichkeit ergibt sich damit der winkelunabhängige Term

$$\frac{W^{\text{aus}}}{W^{\text{ein}}} = \frac{1}{2}.$$

#### Interpretation im Teilchenbild

Im Teilchenbild bedeutet dieses Ergebnis, dass jedes  $x_\varphi$ -polarisierte Photon die Wahrscheinlichkeit  $P_{\text{tr}} = \frac{1}{2}$  hat, dass es durch den  $R$ -Polarisator hindurchgeht, völlig analog natürlich auch für einen  $L$ -Polarisator.

### 12.3.4. Vierter Versuch: $R$ -zirkular polarisiertes Licht durch $x$ -Polarisator

Zuletzt schicken wir umgekehrt zum vorigen Experiment  $R$ -zirkular polarisiertes Licht durch einen linearen  $x$ -Polarisator, es gilt dann

$$\vec{E}^{\text{ein}}(\vec{r}, t) = \left( \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} \hat{x} + i \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} \hat{y} \right) e^{i(kz - \omega t)} \quad \text{und} \quad \vec{E}^{\text{aus}}(\vec{r}, t) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{2}} \hat{x} e^{i(kz - \omega t)}$$

für die ein- und auslaufende Welle, also folgt für die Transmissionswahrscheinlichkeit

$$\frac{W_V^{\text{aus}}}{W_V^{\text{ein}}} = \frac{\frac{1}{2} \varepsilon^2}{\frac{1}{2} \varepsilon^2 + \frac{1}{2} \varepsilon^2} = \frac{1}{2}.$$

Im Teilchenbild interpretiert man dann wieder, dass das ursprünglich  $R$ -zirkular polarisierte Photon mit der Wahrscheinlichkeit  $P_{\text{tr}} = \frac{1}{2}$  durch den  $x$ -Polarisator hindurchgeht.

### 12.3.5. Allgemeines Konzept zur Polarisationsbeschreibung

Abstrahieren wir nun die Ergebnisse dieser Experimente. Im Wellenbild sei dazu eine allgemeine einlaufende Welle durch  $\vec{E}^{\text{ein}}(\vec{r}, t) = \vec{P}e^{i(kz - \omega t)}$  gegeben. Diese zerlege man je nach Art und Richtung des verwendeten Polarisators in

$$\vec{P} = \underbrace{\alpha_x^P \vec{P}_x + \alpha_y^P \vec{P}_y}_{\text{bei } x\text{-/}y\text{-Polarisator}} = \underbrace{\alpha_{x\varphi}^P \vec{P}_{x\varphi} + \alpha_{y\varphi}^P \vec{P}_{y\varphi}}_{\text{bei } x\varphi\text{-/}y\varphi\text{-Polarisator}} = \underbrace{\alpha_R^P \vec{P}_R + \alpha_L^P \vec{P}_L}_{\text{bei } R\text{-/}L\text{-Polarisator}} .$$

Beim Durchgang durch den  $j$ -Polarisator hat man dann

$$\vec{E}^{\text{ein}} \rightarrow \vec{E}^{\text{aus}} \quad \text{mit} \quad \sum_{i=1}^2 \alpha_i^P \vec{P}_i \rightarrow \alpha_j^P \vec{P}_j ,$$

sodass für die allgemeine Transmissionswahrscheinlichkeit

$$\frac{W_V^{\text{aus}}}{W_V^{\text{ein}}} = \frac{|\vec{E}^{\text{aus}}|^2}{|\vec{E}^{\text{ein}}|^2} = \frac{|\alpha_j^P|^2}{|\alpha_1^P|^2 + |\alpha_2^P|^2} = P(\vec{P} \rightarrow \vec{P}_j)$$

folgt. Man konzentriere sich nun auf das Teilchenbild und suche eine geeignete Beschreibung des Verhaltens des Photons. Die dazu eingeführten Konzepte müssen imstande sein, alles Messbare auszudrücken, wobei hier die Transmissionswahrscheinlichkeiten messbar sind. Diese Wahrscheinlichkeiten hängen vom ursprünglichen Polarisationszustand ab, welcher im Wellenbild durch die Amplituden  $E_{0x}$  und  $E_{0y}$  fixiert ist.

Eine geeignete Wahl eines Konzepts für die Beschreibung des Polarisationszustands der Photonen ist der zweikomponentige Vektor

$$\Phi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \psi_1 = \sqrt{\frac{V}{8\pi \cdot \hbar\omega}} E_{0x} \quad \text{und} \quad \psi_2 = \sqrt{\frac{V}{8\pi \cdot \hbar\omega}} E_{0y} .$$

Dabei ist der Vorfaktor gerade so gewählt, dass für das Betragsquadrat des Vektors dann gilt

$$|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 = \frac{V}{8\pi \cdot \hbar\omega} (|E_{0x}|^2 + |E_{0y}|^2) = \frac{V}{8\pi} |\vec{E}|^2 \cdot \frac{1}{\hbar\omega} = N_\gamma .$$

Die empirische Bedeutung der Koeffizienten  $\psi_i$  dieses neuen Vektors  $\Phi$  ist die folgende:  $\psi_1$  ist so gewählt, dass das Betragsquadrat  $|\psi_1|^2$  der Wahrscheinlichkeit entspricht, das Photon (in dem durch  $\Phi$  beschriebenen Polarisationszustand) bei Messung der  $x$ -Polarisation als  $x$ -polarisiert vorzufinden, d.h.  $|\psi_1|^2$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der das Photon durch den  $x$ -Polarisator hindurchgeht. Analog entspricht  $|\psi_2|^2$  der Wahrscheinlichkeit der  $y$ -Polarisation des Photons und insbesondere gilt dann  $|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 = 1$ . Die Konsistenz dieses Ansatzes mit den empirischen Erwartungen sieht man wegen

$$P(\vec{P} \rightarrow \vec{P}_x) = \frac{|E_{0x}|^2}{|E_{0x}|^2 + |E_{0y}|^2} = \frac{|\psi_1|^2}{|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2} = |\psi_1|^2$$

leicht ein. Wir nennen daher  $\Phi$  den **Polarisations-Zustands-Vektor** des Photons. Die Zu-

standsvektoren polarisierter Photonen sind wie folgt definiert:

$$\begin{aligned}
 x\text{-polarisiertes Photon:} \quad \Phi &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \Phi_x = X \\
 y\text{-polarisiertes Photon:} \quad \Phi &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \Phi_y = Y \\
 x_\varphi\text{-polarisiertes Photon:} \quad \Phi &= \begin{pmatrix} \cos \varphi \\ \sin \varphi \end{pmatrix} = X_\varphi \\
 y_\varphi\text{-polarisiertes Photon:} \quad \Phi &= \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \end{pmatrix} = Y_\varphi \\
 R\text{-polarisiertes Photon:} \quad \Phi &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \Phi_R = R \\
 L\text{-polarisiertes Photon:} \quad \Phi &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \Phi_L = L
 \end{aligned}$$

Die Menge aller dieser Zustandsvektoren  $\Phi$  bildet einen komplexen zweidimensionalen Vektorraum, auf dem sich dann ein Skalarprodukt erklären lässt. Man ordne jedem Spaltenvektor  $\Phi$  den komplexen Zeilenvektor  $\Phi^\dagger$  gemäß

$$\Phi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \Phi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*)$$

zu, und definiere dann für zwei Vektoren  $\Phi_A$  und  $\Phi_B$  das Skalarprodukt<sup>2</sup> durch

$$(\Phi_A, \Phi_B) := \Phi_A^\dagger \Phi_B = \psi_{A1}^* \psi_{B1} + \psi_{A2}^* \psi_{B2} \in \mathbb{R}.$$

Mit dem Skalarprodukt definieren wir durch  $\|\Phi\|^2 := (\Phi, \Phi)$  die kanonisch induzierte Norm, wobei wir für alle effektiven Zustandsvektoren die Normierungsbedingung  $\|\Phi\|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 = 1$  fordern. Mit anderen Worten kann man also die Zustände des Vektorraums beliebig superpositionieren, sinnvolle physikalische Werte erhält man aber nur nach Normierung dieser Zustände.

Speziell gilt dann  $(\Phi_x, \Phi_y) = (X, Y) = 0$  und  $(X_\varphi, Y_\varphi) = 0$  sowie  $(R, L) = 0$  für die zuvor definierten Polarisationszustandsvektoren, d.h. sowohl  $X$  und  $Y$  sowie  $X_\varphi$  und  $Y_\varphi$  als auch  $R$  und  $L$  bilden jeweils eine orthonormale Basis des Zustandsvektorraums. Dementsprechend lässt sich ein beliebiger Vektor  $\Phi$  dann als Linearkombination

$$\Phi = a_x^\Phi X + a_y^\Phi Y = a_{x_\varphi}^\Phi X_\varphi + a_{y_\varphi}^\Phi Y_\varphi = a_R^\Phi R + a_L^\Phi L$$

mit geeigneten komplexen Koeffizienten  $a_i^\Phi$  darstellen, welche die Form

$$\begin{aligned}
 a_i^\Phi &= \psi_1 X + \psi_2 Y = (\psi_1 \cos \varphi + \psi_2 \sin \varphi) X_\varphi + (-\psi_1 \sin \varphi + \psi_2 \cos \varphi) Y_\varphi \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 - i\psi_2) R + \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 + i\psi_2) L
 \end{aligned}$$

<sup>2</sup>Es sei dabei kurz an die mathematischen Eigenschaften erinnert, die ein unitäres Skalarprodukt erfüllt:

- *Positiv definit:* Es ist  $(\Phi_A, \Phi_A) \geq 0$  und aus  $(\Phi_A, \Phi_A) = 0$  folgt stets  $\Phi_A = 0$ .
- *Bilinearität:* Es gilt  $(\Phi_A, \Phi_B + \Phi_C) = (\Phi_A, \Phi_B) + (\Phi_A, \Phi_C)$  und  $(\Phi_A, \lambda \Phi_B) = \lambda (\Phi_A, \Phi_B)$ .
- *Symmetrie:* Es gilt  $(\Phi_A, \Phi_B) = (\Phi_B, \Phi_A)^*$ .

haben. Mit  $(\Phi, \Phi) = 1$  gilt dann immer  $|a_x|^2 + |a_y|^2 = |a_{x_\varphi}|^2 + |a_{y_\varphi}|^2 = |a_R|^2 + |a_L|^2 = 1$ . Die Koeffizienten  $a_i^\Phi$  lassen sich auch mit Hilfe von Skalarprodukten ausdrücken, dazu multipliziere (im Sinne von „skalar-multipliziere“) man den Vektor  $\Phi$  von links mit  $\Phi_x = X$ , es folgt

$$(X, \Phi) = (X, a_x X) + (X, a_y Y) = a_x (X, X) + a_y (X, Y) = a_x$$

bzw. die Darstellung  $\Phi = X(X, \Phi) + Y(Y, \Phi) = X_\varphi(X_\varphi, \Phi) + Y_\varphi(Y_\varphi, \Phi) = R(R, \Phi) + L(L, \Phi)$ . Man kann also jeden Photonen-Polarisations-Zustandsvektor  $\Phi$  als lineare Superposition von  $X, Y$  oder  $X_\varphi, Y_\varphi$  oder  $R, L$  (oder jeder anderen Basis) darstellen. Dies ist die einfachste Version des Superpositionsprinzips.

Wie drücken sich nun die messbaren Wahrscheinlichkeiten mit Hilfe der  $\Phi$ -Vektoren aus? Ein Vergleich des Wellenbildes  $\vec{P} = \alpha_x \vec{P}_x + \alpha_y \vec{P}_y = \dots$  mit den obigen Formeln zeigt, dass die  $\alpha_i$  proportional zu den  $a_i$  für alle  $i$  sind, also gilt für die Transmissionswahrscheinlichkeit

$$P(\Phi \rightarrow \Phi_j) = \frac{|\alpha_j|^2}{|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2} = \frac{|a_j|^2}{|a_1|^2 + |a_2|^2} = |a_j|^2 = |(\Phi_j, \Phi)|^2 .$$

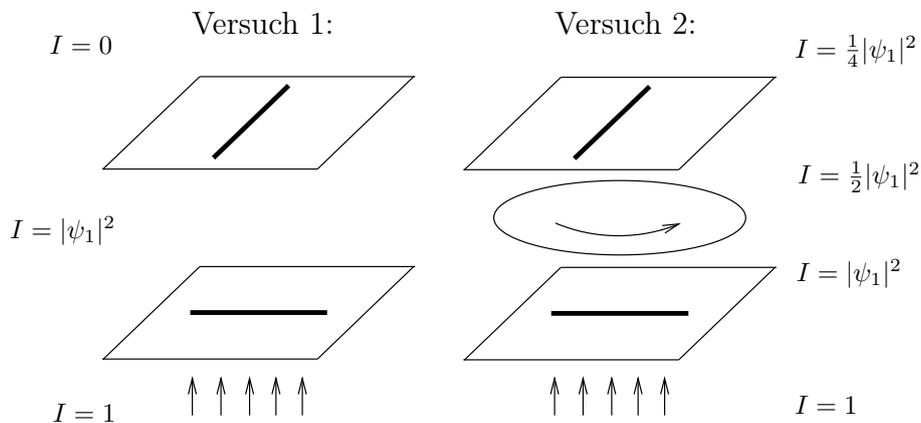
Dabei bezeichnet  $\Phi_j$  den Zustandsvektor des Photons nach dem Durchgang durch den Polarisator und  $\Phi$  den ursprünglichen Zustand des Photons. Außerdem bezeichnet  $(\Phi_j, \Phi)$  allgemein die **Wahrscheinlichkeitsamplitude** dafür, dass das Photon (präpariert im Zustand  $\Phi$ ) sich beim Durchgang durch den  $j$ -Polarisator so verhält, als befände es sich im Zustand  $\Phi_j$ .

Man betrachte dann einen Polarisator, der nur Photonen mit der Polarisation  $j$  hindurchlässt, Photonen mit dazu orthogonaler Polarisation werden vollständig absorbiert. Dann ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Photon, welches im Zustand  $\Phi$  präpariert ist, durch diesen Polarisator geht gleich  $|(\Phi_j, \Phi)|^2$ . Die durchgegangenen Photonen befinden sich außerdem im Zustand  $\Phi_j$ . Anders formuliert ist  $|(\Phi_j, \Phi)|^2$  die Wahrscheinlichkeit dafür, dass bei einer Entscheidungsmessung der  $j$ -Polarisation das Photon tatsächlich die Polarisation  $j$  aufweist („dass das Photon die Polarisation  $j$  hat“).

Nun gilt, dass wenn man  $N$  Photonen im Zustand  $\Phi$  auf einen  $x$ -Polarisator schickt, so gehen  $N|\psi_1|^2$  durch, während bei einem  $y$ -Polarisator  $N|\psi_2|^2$  durchgehen, wobei

$$N|\psi_1|^2 + N|\psi_2|^2 = N$$

gilt. Die Frage ist aber, ob man umgekehrt durch eine solche Messung darauf schließen kann, dass die Photonen ursprünglich entweder  $x$ - oder  $y$ -polarisiert waren. Dazu führt man wieder zwei Experimente durch:



Die Intensitäten lassen sich dabei leicht berechnen, indem man den zugehörigen Zustandsvektor betrachtet. Als Ergebnis dieser Experimente halten wir fest, dass die eingangs gestellte Frage verneint werden muss, da schließlich sonst auch am Ende des zweiten Versuchs die Intensität verschwinden müssten, es wurde schließlich ein  $x$ - und ein  $y$ -Polarisator verwendet.

### 12.3.6. Drehimpuls als klassische Erklärung der Polarisation

Man fragt sich, ob es eine aus der klassischen Physik bekannte physikalische Eigenschaft (Observable) gibt, die mit der Polarisation eines Photons verknüpft ist. Die Frage lässt sich positiv beantworten, es ist der Drehimpuls (genauer der Eigendrehimpuls bzw. Spin, auf den wir später in 15.5 ab Seite 227 genau eingehen). Empirisch hat man die folgenden Eigenschaften:

- Wenn ein in  $z$ -Richtung fliegendes Photon mit beliebiger Polarisation  $\Phi$  auf Materie trifft und von dieser absorbiert wird, so ändert sich die  $z$ -Komponente des Drehimpulses  $J_z$  dieser Materie entweder um  $+\hbar$  oder  $-\hbar$ , niemals aber um andere Werte, auch die Null tritt nie auf. Somit haben Photonen entweder  $J_z = +\hbar$  oder  $J_z = -\hbar$ , wobei dies den Eigendrehimpuls in Ausbreitungsrichtung bezeichnet.
- Der beim einzelnen Absorptionsprozess übertragene Drehimpulswert  $J_z = J$  ist zufällig. Aber es gibt eine gewisse definierte Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P^\Phi(J = +\hbar)$  und  $P^\Phi(J = -\hbar)$ , diese hängt von  $\Phi$  ab.
- Wenn die einlaufenden Photonen  $R$ - oder  $L$ -zirkular polarisiert sind, so tritt mit Sicherheit der Wert  $J = +\hbar$  bzw.  $J = -\hbar$  auf, der Drehimpuls in Ausbreitungsrichtung ist also direkt mit der zirkularen Polarisation verknüpft.

Der **Erwartungswert** ist als Mittelwert über viele Absorptionsprozesse des übertragenen Drehimpulses definiert durch

$$\bar{J}^\Phi = (+\hbar)P^\Phi(J = +\hbar) + (-\hbar)P^\Phi(J = -\hbar) .$$

Weiterhin erwartet man, dass  $P^\Phi(J = +\hbar) = P(\Phi \rightarrow \Phi_R) = |(\Phi_R, \Phi)|^2$  gilt, also folgt

$$\bar{J}^\Phi = (+\hbar)|(\Phi_R, \Phi)|^2 + (-\hbar)|(\Phi_L, \Phi)|^2 .$$

Tatsächlich ergibt sich dies auch bei Vergleich mit dem Wellenbild, wo für den elektromagnetischen Bahndrehimpuls

$$\vec{L}_V^{\text{em}} = \frac{1}{4\pi c} \iiint_V d^3\vec{r} \vec{r} \times [\vec{E}(\vec{r}, t) \times \vec{B}(\vec{r}, t)]$$

gilt, wobei man explizit für die in Flugrichtung liegende  $z$ -Komponente dann

$$\begin{aligned} (L_V^{\text{em}})_z &= \frac{V}{8\pi i\omega} (E_{0x}^* E_{0y} - E_{0x} E_{0y}^*) = \frac{V}{8\pi\omega} \left( \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(E_{0x} - iE_{0y}) \right|^2 - \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(E_{0x} + iE_{0y}) \right|^2 \right) \\ &= \hbar \left( \left| \sqrt{\frac{V}{8\pi}} \frac{1}{\hbar\omega} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(E_{0x} - iE_{0y}) \right|^2 - \left| \sqrt{\frac{V}{8\pi}} \frac{1}{\hbar\omega} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(E_{0x} + iE_{0y}) \right|^2 \right) \end{aligned}$$

erhält. Im Teilchenbild interpretiere man dies dann als den mittleren Drehimpuls der Photonen. Für ein einzelnes Photon ( $N = 1$ ) gilt dann also

$$\begin{aligned} (L_V)_z &= \hbar (|\psi_1 - i\psi_2|^2 - |\psi_1 + i\psi_2|^2) = \hbar (|(R, \Phi)|^2 - |(L, \Phi)|^2) \\ &= (+\hbar)|(\Phi_R, \Phi)|^2 + (-\hbar)|(\Phi_L, \Phi)|^2 = (+\hbar)P^\Phi(J = +\hbar) + (-\hbar)P^\Phi(J = -\hbar) . \end{aligned}$$

### 12.3.7. Operator-Formalismus für den Drehimpuls

Es stellt sich dann die Frage, wie man die Observable „Drehimpuls“ des Photons mit den obigen Manifestationen theoretisch beschreiben kann. Zunächst können wir folgende Feststellungen tätigen:

- Die möglichen Messergebnisse sind die diskreten Werte  $+\hbar$  und  $-\hbar$ .
- Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der einzelnen Messergebnisse  $P^\Phi(J = +\hbar)$  ist definiert.
- Der Erwartungswert ist definiert.
- Die Einzelergebnisse sind zufällig.

Ein geeignetes theoretisches Konzept ist die Verwendung linearer Operatoren, welche auf den Zustandsraum der  $\Phi$ -Vektoren wirken. Der Zustandsraum ist hier zweidimensional, lineare Operatoren können also durch  $2 \times 2$ -Matrizen dargestellt werden. Unsere Behauptung ist dann, dass der Drehimpuls  $J$  durch den Operator  $\hat{J} := \hbar S$  mit

$$S = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

beschrieben wird. Später bei der Behandlung des Spins und Drehimpulses wird deutlich, warum die Matrix gerade so aussieht.<sup>3</sup> Zur Notation sei bemerkt, dass wir von nun an mit  $\hat{O}$  stets den Operator zu einer Observable  $O$  bezeichnen.

- *Eigenwerte:* Aus dem definierten  $\hat{J}$ -Operator lassen sich dann alle Manifestationen des Drehimpulses zurückerhalten, dazu berechnen wir die Eigenwerte von  $\hat{J}$  bzw. der Matrix  $S$ . Effektiv müssen wir dazu nur die Polynomgleichung  $\det(S - \lambda \mathbb{1}_2) = 0$  nach  $\lambda$  hin auflösen, explizit gilt

$$\det(S - \lambda \mathbb{1}_2) = \det \begin{pmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0 \iff \lambda_{1,2} = \pm 1 .$$

Demnach sind die Eigenwerte von  $\hat{J} = \hbar S$  gerade  $+\hbar$  und  $-\hbar$ , dies sind genau die von uns zuvor festgestellten möglichen Messergebnisse.

- *Eigenvektoren:* Zu den Eigenwerten gehören Eigenvektoren, also Vektoren  $\tilde{\Phi}$  mit der Eigenschaft  $\hat{J}\tilde{\Phi} = \lambda\tilde{\Phi}$ . Mit den zuvor berechneten Eigenwerten erhalten wir durch

$$(S - \lambda_{\pm} \mathbb{1}_2) \begin{pmatrix} \alpha_1^{\pm} \\ \alpha_2^{\pm} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & -i \\ i & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1^{\pm} \\ \alpha_2^{\pm} \end{pmatrix} = 0 \iff \alpha_2^{\pm} = \pm i \alpha_1^{\pm}$$

<sup>3</sup>Im mathematischen Sinne ist  $\hat{J}$  der Generator bzw. Erzeuger der Drehungen um die  $z$ -Achse der  $\Phi$ -Vektoren. Die hier verwendeten Drehungen werden durch die Symmetriegruppe  $SU(2)$  beschrieben, diese ist eine sogenannte Lie-Gruppe (d.h. eine Gruppe, die zugleich eine differenzierbare Mannigfaltigkeit ist). Lie-Gruppen haben (mit gewissen mathematischen Einschränkungen, auf die nicht weiter eingegangen werden soll) die nützliche Eigenschaft, dass die Gruppenelemente  $g \in G$  durch

$$g = \exp \left( i \sum_{i=1}^n \theta_i \hat{T}_i \right)$$

mit  $\theta_i \in \mathbb{R}$  für  $i = 1, \dots, n$  parametrisiert werden können. Die  $\hat{T}_i$ -Operatoren spannen also einen  $n$ -dimensionalen Vektorraum  $\text{span}(\hat{T}_1, \dots, \hat{T}_n)$  auf, die sogenannte Lie-Algebra. Unser Drehimpuls-Operator  $\hat{J}$  ist einer der drei Erzeuger der  $SU(2)$ -Lie-Gruppe.

die Parametrisierung aller möglichen Eigenvektoren. Wählt man der Einfachheit wegen  $\alpha_1^\pm = 1$ , so erhält man nach Normierung der Vektoren auf die physikalische Länge Eins

$$\begin{aligned} \text{Eigenvektor zu } \lambda = +\hbar: \quad & \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \Phi_R = R \quad \Longrightarrow \quad \hat{J}\Phi_R = \hbar\Phi_R \\ \text{Eigenvektor zu } \lambda = -\hbar: \quad & \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \Phi_L = L \quad \Longrightarrow \quad \hat{J}\Phi_L = -\hbar\Phi_L \end{aligned}$$

Die Anwendung des Operators  $\hat{J}$  auf einen Eigenvektor lässt sich als Messung der Observable mit dem Eigenwert als Messergebnis interpretieren.

- *Erwartungswert:* Zur Definition des Erwartungswerts betrachten wir den Zustand  $\Phi = \Phi_R$  bzw.  $\Phi_L$ , es gilt dann

$$\bar{J}^R = +\hbar = (R, \hat{J}R) = (R, \hbar R) = \hbar \quad \text{bzw.} \quad \bar{J}^L = -\hbar = (L, \hat{J}L) .$$

Es liegt daher nahe für einen beliebigen Zustand  $\Phi$  den Erwartungswert als  $\bar{J}^\Phi = (\Phi, \hat{J}\Phi)$  zu definieren, wobei natürlich noch zu zeigen bleibt, dass dieser Ansatz konsistent mit den bisherigen Ergebnissen ist. Dazu betrachte man die Darstellung  $\Phi = R(R, \Phi) + L(L, \Phi)$  und  $\hat{J}\Phi = (R, \Phi)\hat{J}R + (L, \Phi)\hat{J}L = (+\hbar)(R, \Phi)R + (-\hbar)(L, \Phi)L$ , dann folgt

$$\begin{aligned} \bar{J}^\Phi &= (\Phi, \hat{J}\Phi) = (R(R, \Phi) + L(L, \Phi), (+\hbar)(R, \Phi)R + (-\hbar)(L, \Phi)L) \\ &= (R, \Phi)^* \hbar (R, \Phi)(R, R) + (R, \Phi)^* (-\hbar)(R, L)(L, \Phi) \\ &\quad + (L, \Phi)^* (+\hbar)(R, \Phi)(L, R) + (L, \Phi)^* (-\hbar)(L, \Phi)(L, L) \\ &= (+\hbar)|(R, \Phi)|^2 + (-\hbar)|(L, \Phi)|^2 . \end{aligned}$$

Andererseits hatten wir aber auch  $\bar{J}^\Phi = (+\hbar)P^\Phi(J = +\hbar) + (-\hbar)P^\Phi(J = -\hbar)$  für den Erwartungswert eines beliebigen Zustands erhalten, vergleicht man also beide Identitäten, so erkennt man sofort, dass  $\bar{J}^\Phi = (\Phi, \hat{J}\Phi)$  konsistent ist mit der Interpretation

$$P^\Phi(J = +\hbar) = |(R, \Phi)|^2 \quad \text{bzw.} \quad P^\Phi(J = -\hbar) = |(L, \Phi)|^2 .$$

### 12.3.8. Rechenregeln für Wahrscheinlichkeitsamplituden

Da wir im weiteren Verlauf immer wieder Wahrscheinlichkeitsamplituden verwenden werden, betrachten wir nun einige Beispiele zur Illustration entsprechender Rechenregeln. Man weiß, dass die Wahrscheinlichkeit mit der ein  $x$ -polarisiertes Photon durch einen  $y$ -Polarisator geht, verschwindet ist, d.h. es gilt  $|(Y, X)|^2 = 0$  und wegen der strikten Definitheit folgt daraus  $(Y, X) = 0$ . Nach dem Superpositionsprinzip gilt  $X = R(R, X) + L(L, X)$  und

$$(Y, X) = (Y, R(R, X) + L(L, X)) = (Y, R)(R, X) + (Y, L)(L, X) ,$$

sodass für das Betragsquadrat dieses Skalarprodukts damit

$$\begin{aligned} |(Y, X)|^2 &= [(Y, R)(R, X) + (Y, L)(L, X)] \cdot [(Y, R)^*(R, X)^* + (Y, L)^*(L, X)^*] \\ &= |(Y, R)|^2 |(R, X)|^2 + |(Y, L)|^2 |(L, X)|^2 \\ &\quad + \underbrace{(Y, R)(R, X)(Y, L)^*(L, X)^*}_A + \underbrace{(Y, L)(L, X)(Y, R)^*(R, X)^*}_B \end{aligned}$$

folgt. Nun rechnet man leicht nach, dass für die Skalarprodukte

$$(Y, R) = (1, 0) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \text{und} \quad (L, X) = (R, X) = \frac{1}{\sqrt{2}} (1, -i) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

gilt, somit ergibt sich für die Terme  $A$  und  $B$  durch Einsetzen sofort

$$A = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad B = \frac{i}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{i}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{-i}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{-i}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} = -\frac{1}{2},$$

also gilt  $|(Y, X)|^2 = 0$ . Man kann die beiden Terme  $A$  und  $B$  gesondert interpretieren: Wenn gälte, dass die ursprünglich  $x$ -linear polarisierten Photonen entweder gleichzeitig  $R$ - oder  $L$ -polarisiert sind, dann wäre die Wahrscheinlichkeit, mit der diese durch den  $y$ -Polarisator gehen gleich:

Die Wahrscheinlichkeit, dass sich ein  $x$ -polarisiertes Photon wie ein  $R$ -polarisiertes Photon verhält, multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit, dass ein  $R$ -polarisiertes Photon durch den  $y$ -Polarisator geht, addiert zu dem Produkt der Wahrscheinlichkeiten, dass sich ein  $x$ -polarisiertes Photon wie ein  $L$ -polarisiertes Photon verhält, und das ein  $L$ -polarisiertes Photon durch den  $y$ -Polarisator geht.

$$|(R, X)|^2 \cdot |(Y, R)|^2 + |(L, X)|^2 \cdot |(Y, L)|^2 = A = \frac{1}{2} \neq 0$$

Dieses Ergebnis entspricht aber nicht den empirischen Erwartungen. Die notwendige Kompensation kommt erst von den sogenannten **Interferenztermen**  $A$  und  $B$ . Man betrachte dazu noch einmal die Wahrscheinlichkeitsamplitude

$$(Y, X) = (Y, R)(R, X) + (Y, L)(L, X),$$

dann entspricht diese Gleichung (aus mathematischer Sicht die einfache Auswertung des Skalarprodukts auf den  $R$ -/ $L$ -Basisvektoren)

Die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, dass ein  $x$ -polarisiertes Photon durch einen  $y$ -Polarisator geht ist gleich der Summe von den Wahrscheinlichkeitsamplituden dafür, dass es als  $R$ -polarisiert durchgeht und dass es als  $L$ -polarisiert durchgeht, wobei die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, dass es als  $R$ -polarisiert durchgeht gleich dem Produkt der Wahrscheinlichkeitsamplitude, dass sich das  $x$ -polarisierte Photon wie  $R$ -polarisiert verhält, und der Wahrscheinlichkeitsamplitude, dass das  $R$ -polarisierte Photon durch den  $y$ -Polarisator geht, ist.

In der Quantenmechanik genügen die Wahrscheinlichkeitsamplituden ähnlichen Regeln, wie die Wahrscheinlichkeiten in der klassischen Physik:

- Wahrscheinlichkeitsamplituden für aufeinander folgende Prozessmöglichkeiten multiplizieren sich.
- Die totale Wahrscheinlichkeitsamplitude für einen Prozess, der (klassisch) auf mehrere Arten ablaufen könnte, ist die Summe der Wahrscheinlichkeitsamplituden der einzelnen Prozessarten (kohärente Überlagerung).

**Beispiel:** Betrachte einen klassischen idealen Würfel, sodass jede Zahl die Wahrscheinlichkeit  $P = \frac{1}{6}$  hat. Die Wahrscheinlichkeit zweimal eine 2 zu werden, ist  $\frac{1}{6} \cdot \frac{1}{6}$ . Die Wahrscheinlichkeit, dass eine gerade Zahl geworfen wird, ist  $\frac{1}{6} + \frac{1}{6} + \frac{1}{6}$ .

Dabei ist entscheidend, dass die verschiedenen Möglichkeiten nicht experimentell identifiziert werden. Wenn man dies täte, so würde daraus der Verlust der Interferenzterme folgen.

**Beispiel:** *Passiert Licht einen  $x$ -Polarisator, so weiss man nur, dass eine  $x$ -Polarisation vorliegt, aber man hat keine Informationen über den  $R$ -/ $L$ -Polarisationszustand. Analog weiss man auch, dass wenn Licht durch einen  $R$ -Polarisator tritt, dass es  $R$ -polarisiert ist, jedoch liefert dies keinen Anhaltspunkt über die  $x$ -/ $y$ -Polarisation des Lichts.*

Die konkrete Messvorrichtung bestimmt, welche Eigenschaften eines Systems relevant sind, man sagt auch „sichtbar werden“. Demnach wählt erst die Messung selbst zwischen verschiedenen Möglichkeiten eine aus und macht diese real, d.h. eine Messung führt vom Möglichen zum Faktischen.

Der Physiker Bohr formulierte: Physikalische Eigenschaften eines Systems sind nur definiert unter den Bedingungen, die durch den konkreten Messprozess festgelegt sind - große Vorsicht ist bei Aussagen über nicht Beobachtetes geboten.

**Bemerkung:** *Bisher haben wir Zustände durch den zweikomponenten Polarisations-Zustandsvektor*

$$\Phi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (X, \Phi) \\ (Y, \Phi) \end{pmatrix} = \Phi^{(X,Y)}$$

beschrieben. Man kann aber genauso von einer anderen Basis aus starten, etwa

$$\begin{pmatrix} (R, \Phi) \\ (L, \Phi) \end{pmatrix} = \Phi^{(R,L)} \quad \text{oder} \quad \begin{pmatrix} (X_\varphi, \Phi) \\ (Y_\varphi, \Phi) \end{pmatrix} = \Phi^{(X_\varphi, Y_\varphi)} .$$

## 12.4. Welleneigenschaften massiver Teilchen

In Abschnitt 12.2 haben wir gesehen, dass man Licht aufgrund einiger Experimente Eigenschaften massiver Teilchen zuweisen kann, etwa einen Impuls. Umgekehrt verhalten sich aber auch massive, nichtrelativistische Teilchen (Elektronen, Protonen, Neutronen, Kerne, etc.) unter bestimmten Umständen wie Teilchen, unter anderen Umständen aber auch wellenartig. Zu diesem Thema wurden eine Reihe wichtiger Experimente durchgeführt, z.B.:

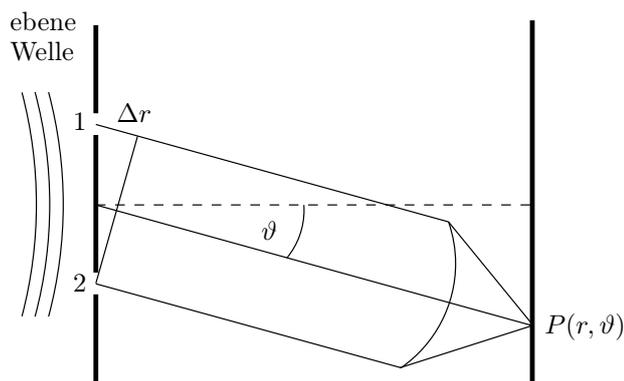
- Streuung von Elektronen am Kristallgitter (Davisson & Gerner, 1926/27)
- Streuung am Doppelspalt (Donati, Missiroli, Pozzi)
- Streuung von Neutronen am Si-Kristall (Rauch)
- Streuung von Fullerenen an organischen Molekülen (Zeilinger)

Von diesen Experimenten wollen wir das Doppelspalt-Experiment genauer betrachten, da es alle wichtigen Effekte illustriert.

### 12.4.1. Das Doppelspalt-Experiment mit Elektronen

Wir betrachten die in Abbildung 12.2 dargestellte Situation des Doppelspalt-Experiments. Für das Wellenfeld am Punkt  $P(r, \vartheta)$  zur Zeit  $t$  gilt

$$\varphi(r, \vartheta, t) = \varphi_1(r, \vartheta, t) + \varphi_2(r, \vartheta, t)$$


**Abbildung 12.2.:** Schematik des Doppelspalt-Experiments

aufgrund linearer Superposition, wobei die einzelnen Summanden die von den beiden Öffnungen 1 und 2 ausgehenden Wellen bezeichnet. Also folgt

$$\begin{aligned} \varphi(r, \vartheta, t) &= A(r)e^{ikr}e^{-i\omega t} + A(r)e^{ik(r+\Delta r)}e^{-i\omega t} \\ &= A(r)e^{-i\omega t}e^{ik(r+\frac{1}{2}\Delta r)} \left( e^{-\frac{1}{2}ik\Delta r} + e^{\frac{1}{2}ik\Delta r} \right) = A(r)e^{-i\omega t}e^{ik(r+\frac{1}{2}\Delta r)} \cdot 2 \cos \left( k \frac{\Delta r}{2} \right) \end{aligned}$$

mit dem Abstandsunterschied  $\Delta r = s \sin \vartheta$ , wobei  $s$  den Abstand der Spalte 1 und 2 voneinander bezeichnet und  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  gilt. Für die Intensität als Betragsquadrat der Welle  $\varphi(r, \vartheta, t)$  gilt dann

$$I(r, \vartheta, t) = |\varphi(r, \vartheta, t)|^2 = B \cos^2 \left( k \frac{\Delta r}{2} \right) = B \cos^2 \left( \pi \frac{s}{\lambda} \sin \vartheta \right) .$$

Man sieht direkt, dass die Intensität  $I$  genau dann minimal wird, wenn die Bedingung

$$\pi \frac{s}{\lambda} \sin \vartheta = \frac{2n+1}{2} \pi \iff \sin \vartheta_{\min} = \frac{\lambda}{s} \frac{2n+1}{2}$$

erfüllt ist. Bei einer endlichen Blendenweite kommt noch ein weiterer Korrekturfaktor

$$B(\lambda, \vartheta) = \frac{\sin^2(\pi \frac{b}{\lambda} \sin \vartheta)}{\pi \frac{b}{\lambda} \sin \vartheta}$$

hinzu, wobei die  $b$  die Breite der Spalte bezeichne. Minima des  $B$ -Korrekturfaktors finden sich bei  $\vartheta = \frac{\lambda}{b} \frac{2n+1}{2}$ .

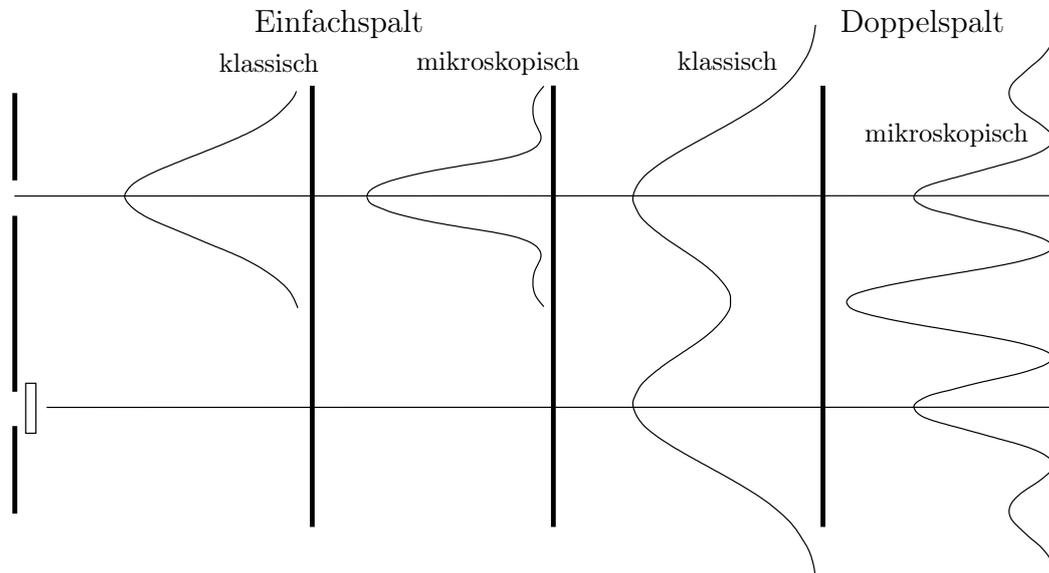
Alle diese Experimente lassen sich erklären, wenn man annimmt, dass die Teilchen durch eine monochromatische Welle beschrieben werden, deren Frequenz  $\nu$  und Wellenzahlvektor  $\vec{k}$  mit der Energie  $E$  und dem Impuls  $\vec{p}$  der Teilchen verknüpft sind. Dies geschieht durch die von Seite 146 bereits bekannten de-Broglie-Relationen

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar} \quad \text{und} \quad \lambda = \frac{h}{p} .$$

Wegen der letzten Beziehung sind die Wellenlängen makroskopischer Objekte winzig, dazu einige typische Wellenlängen von Materiewellen:

Elektronen mit $E_{\text{kin}} = 50 \text{ eV}$ :	$\lambda = 1.8 \cdot 10^{-10} \text{ m}$
Elektronen mit $E_{\text{kin}} = 80 \text{ keV}$ :	$\lambda = 0.04 \cdot 10^{-10} \text{ m}$
Neutronen aus Reaktor:	$\lambda = 2 \cdot 10^{-10} \text{ m}$
Gewehrkugel:	$\lambda = 2.3 \cdot 10^{-34} \text{ m}$

Wichtig sind nun die Unterschiede zur klassischen Betrachtungsweise. Dazu betrachten wir die Intensitätsverteilungen klassischer makroskopischer Teilchen und mikroskopischer (also quantenmechanisch zu beschreibender) Teilchen am Doppelspalt:



Das erste Bild zeigt dabei die Auftreffwahrscheinlichkeit für klassische Teilchen bei lediglich einem geöffneten Spalt, während das zweite Bild die Auftreffwahrscheinlichkeit derselben Situation für mikroskopische Teilchen wiedergibt. Öffnet man stattdessen nur den anderen Spalt, so ergibt sich eine entsprechend an der  $x$ -Achse gespiegelte Situation.

Im dritten Bild ist nun die klassische Auftreffwahrscheinlichkeit klassischer Teilchen zu sehen, wenn beide Spalte geöffnet sind, es zeigt sich eine additive Überlagerung der einzelnen Wahrscheinlichkeiten, die sich bei jeweils einem geöffneten Spalt ergeben. Das letzte Bild zeigt die Situation bei mikroskopischen Teilchen, hier entstehen durch die Öffnung des zweiten Spaltes Bereiche, an die weniger Licht als zuvor gelangt.

### 12.4.2. Welle-Teilchen-Dualismus

Dieses Ergebnis lässt sich wie folgt interpretieren: In Analogie zum Licht existiert ein Welle-Teilchen-Dualismus. Um diese Aussage zu verstehen, betrachte man das Experiment genauer, d.h. so weit verlangsamt, dass immer nur ein einzelnes Teilchen durch die Spalte hindurchgeht. Dabei stellt man fest:

- Die einzelnen Auftreffpunkte auf dem Projektionsschirm sind stochastisch verteilt.
- Befestigt man Detektoren am Projektionsschirm, so registriert jeweils nur ein einzelner das Auftreffen eines Teilchens - ein einlaufendes Teilchen bleibt also ein einzelnes Teilchen.
- Erst nach dem Eintreffen vieler Elektronen ergibt sich eine gewisse regelmässige Häufigkeitsverteilung.
- Die Verteilung ist völlig analog zum Lichtverhalten.

Man muss also schließen, dass die Intensitätsverteilung des Interferenzbildes als die Wahrscheinlichkeitsverteilung zu interpretieren ist, mit der ein Teilchen am Ort  $\vec{r}$  auftritt. Bei Licht hatten

wir für ein gegebenes elektrisches Feld dazu

$$I(\vec{r}) = |\vec{E}_t(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = P(\vec{r}) d^3\vec{r}$$

erhalten. Für Teilchen liegt es daher ebenfalls nahe, eine Wellenfunktion  $\psi_t(\vec{r})$  einzuführen, so dass  $|\psi_t(\vec{r})|^2 d^3\vec{r}$  der Wahrscheinlichkeit entspricht, dass ein beschriebenes Teilchen zur Zeit  $t$  im Volumen  $d^3\vec{r}$  bei  $\vec{r}$  anzutreffen ist. Die konkrete funktionale Form dieser Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$  wird abhängen von den physikalischen Bedingungen, unter denen sich das Teilchen befindet, z.B. von der Energie, mit der es erzeugt wird, von äußeren Kraftfeldern, etc., kurz gesagt also vom physikalischen Zustand des Teilchens.

Es wird sich noch herausstellen, dass die Wellenfunktion die gesamte Information über den Zustand des Teilchens enthält. Man überlege sich zunächst die notwendigen **Eigenschaften der Wellenfunktion**:

- Es muss  $|\psi_t(\vec{r})|^2 \geq 0$  und  $\iiint_{\mathbb{R}^3} |\psi_t(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = 1$  sein, also muss die Wellenfunktion  $\psi$  quadratintegabel sein, insbesondere geht dann  $|\psi_t(\vec{r})| \rightarrow 0$  für  $r \rightarrow \infty$ .
- Die Wellenfunktion  $\psi_t(\vec{r})$  muss im ganzen Raum  $\mathbb{R}^3$  stetig differenzierbar sein.
- $\psi_t(\vec{r})$  ist aus physikalischer Sicht nur bis auf eine komplexe Phase bestimmt, d.h. die Wellenfunktionen  $\psi_t(\vec{r})$  und  $e^{i\alpha}\psi_t(\vec{r})$  sind physikalisch äquivalent.

## 12.5. Die Schrödinger-Gleichung

Wir suchen nun eine Bestimmungsgleichung für Wellenfunktionen  $\psi(\vec{r}, t)$ . Eine derartige Gleichung muss den folgenden Eigenschaften genügen:

1. Aufgrund des Superpositionsprinzips von Wellen muss es sich um eine lineare Differentialgleichung handeln.
2. Die Gleichung muss als Lösung unter anderem auch Wellen mit definierter Frequenz  $\omega$  und definiertem Wellenzahlvektor  $\vec{k}$  besitzen, wobei diese über  $E = \hbar\omega$  und  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  mit der Energie  $E$  und dem Impuls  $\vec{p}$  des beschriebenen Teilchens zusammenhängen.
3.  $E$  und  $\vec{p}$  müssen für nichtrelativistische bewegte Teilchen gemäß  $E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$  zusammenhängen.

### 12.5.1. Freie Schrödinger-Gleichung

Betrachten wir dann zuerst ein freies Teilchen, es gilt also  $V = 0$  für das Potential. Wir erhalten dann aus der klassische Energiebeziehung mit den de-Broglie-Relationen

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad \Longrightarrow \quad \hbar\omega = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \quad \Longleftrightarrow \quad \omega = \hbar \frac{\vec{k}^2}{2m} .$$

Sei nun die Wellenfunktion  $\psi$  eine Lösung mit definiertem  $\omega$  und  $\vec{k}$ , d.h. eine ebene monochromatische Welle der Form  $\psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$ . Für die Ableitungen dieser Wellenfunktion erhalten wir dann

$$\vec{\nabla}\psi(\vec{r}, t) = i\vec{k}\psi(\vec{r}, t) \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) = -i\omega\psi(\vec{r}, t) .$$

In der zeitlichen Ableitung finden wir also (bis auf konstante Vorfaktoren)  $\omega$  wieder, während aus dem Gradienten insbesondere  $\Delta\psi(\vec{r}, t) = -\vec{k}^2\psi(\vec{r}, t)$  folgt. Wir können die Größen in der obigen Energiebeziehung damit als

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}, t)$$

schreiben, dies ist die **Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen**.

### 12.5.2. Einteilchen-Schrödinger-Gleichung

Als Verallgemeinerung betrachten wir nun den Fall eines Teilchens, welches sich in einem Potential  $V(\vec{r})$  bewegt. Die Energierektion lautet

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad \text{wobei} \quad E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \quad \vec{p} \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla}$$

zu ersetzen ist. Man kann mit der obigen Identifikation also die Bestimmungsgleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t)$$

erwarten. Man beachte, dass das Potential  $V$  dabei als  $V(\vec{r})\psi(\vec{r}, t)$  in die Gleichung eingehen muss, damit die geforderte Linearität bzw. Homogenität der Gleichung für das Superpositionsprinzip erhalten bleibt. Es ist dann

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}, t)$$

die **Einteilchen-Schrödinger-Gleichung**. Man beachte, dass die Lösungen dieser Gleichung nur dann gültige Wellenfunktionen sind, wenn sie quadratintegabel sind. Die Lösungen gewährleisten außerdem die Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit, d.h. es gilt

$$\frac{d}{dt} \iiint |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 0 .$$

*Beweis.* Wir wollen die letzte Aussage explizit nachprüfen, da sie die große Bedeutung der Schrödinger-Gleichung unterstreicht. Zunächst gilt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \iiint |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} &= \frac{d}{dt} \iiint \psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r} \\ &= \iiint \left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\vec{r}, t)\right)\psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r} + \iiint \psi^*(\vec{r}, t)\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t)\right) d^3\vec{r} . \end{aligned}$$

Da nun die Wellenfunktion  $\psi$  eine Lösung der Schrödinger-Gleichung ist, hat man weiter

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\psi \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial t}\psi^* = -\frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\psi^* .$$

Diese beiden Ableitungen setzen wir jetzt in den letzten Term ein, und erhalten damit

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{i\hbar} \iiint \left[ \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + V \psi^* \right) \psi - \psi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi \right] d^3 \vec{r} \\
 &= -\frac{1}{i\hbar} \iiint \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} [(\Delta \psi^*) \psi - \psi^* (\Delta \psi)] + \psi^* V \psi - \psi^* V \psi \right] d^3 \vec{r} \\
 &= -\frac{i\hbar}{2m} \iiint [(\vec{\nabla} \vec{\nabla} \psi^*) \psi - \psi^* \vec{\nabla} \vec{\nabla} \psi] d^3 \vec{r} \\
 &\stackrel{\text{P.I.}}{=} \frac{i\hbar}{2m} \iiint (\vec{\nabla} \psi^* \vec{\nabla} \psi - \vec{\nabla} \psi^* \vec{\nabla} \psi) d^3 \vec{r} + \text{Oberflächenterme in } \infty = 0,
 \end{aligned}$$

wobei verwendet wurde, dass die zusätzlichen Terme im Unendlichen gegen Null gehen, da wegen der vorausgesetzten Quadratintegrabilität der Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t) \rightarrow 0$  für  $|\vec{r}| \rightarrow \infty$  geht. Explizit hat die partielle Integration die Form

$$\begin{aligned}
 \iiint_{\mathbb{R}^3} (\Delta \psi^*) \psi d^3 \vec{r} &= \iiint \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi^* + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi^* \right) \psi dx dy dz \\
 &= \iiint \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \right] \psi dx dy dz + \dots \\
 &\stackrel{\text{P.I.}}{=} - \iiint \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx dy dz + \iint \left( \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \Big|_{x=-\infty}^{x=\infty} dy dz + \dots,
 \end{aligned}$$

wobei wir von nun an stets auf die Rand- bzw. Oberflächenterme verzichten werden.  $\square$

Damit ist also gezeigt, dass die Gesamtwahrscheinlichkeit einer durch die Einteilchen-Schrödinger-Gleichung bestimmten Wellenfunktion zeitlich erhalten bleibt. Da der Vorfaktor von  $\psi$  wegen Homogenität der Differentialgleichung frei wählbar ist, kann die Wellenfunktion  $\psi$  so normiert werden, dass sich für die Gesamtwahrscheinlichkeit  $\iiint |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3 \vec{r} = 1$  ergibt.

**Bemerkung:** Die Schrödinger-Gleichung ist eine lineare homogene Differentialgleichung mit komplexen Koeffizienten, d.h. man also eine genuine komplexe Lösung. Insbesondere genügt die komplex konjugierte Wellenfunktion  $\psi^*$  deswegen einer anderen Differentialgleichung, nämlich

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{r}, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \psi^*(\vec{r}, t).$$

Der Real- oder Imaginärteil  $\Re \psi$  oder  $\Im \psi$  liefert uns also diesmal keine Lösungen.

**Definition 16:** Die Menge der stetig differenzierbaren quadratintegrablen Lösungen der Schrödinger-Gleichung bilden den linearen **Raum der Wellenfunktionen** des betrachteten Systems.

Der Zustand eines Systems bestehend aus  $N$  (verschiedenen) Teilchen wird dann analog durch eine  $N$ -Teilchen-Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$  beschrieben. Hier steht dann der Ausdruck

$$|\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 d^3 \vec{r}_1 \dots d^3 \vec{r}_N$$

für die Wahrscheinlichkeit zum Zeitpunkt  $t$  das erste Teilchen in  $d^3 \vec{r}_1$  bei  $\vec{r}_1$ , das zweite Teilchen in  $d^3 \vec{r}_2$  bei  $\vec{r}_2$ , usw. anzutreffen.

### 12.5.3. Berechnung von messbaren physikalischen Größen

Der Zustand eines Systems ist vollständig in der Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$  enthalten, es stellt sich nun die Frage, wie man die Informationen aus  $\psi$  herausextrahiert.

### Orts-Erwartungswert

Wenn man in einem Zustand  $\psi(\vec{r}, t)$  den Ort des Teilchens misst, so erhält man im Einzelfall stochastische Ereignisse, aber die Ortswahrscheinlichkeitsverteilung ist durch  $|\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$  gegeben. Wir interpretieren den Erwartungswert des Orts als Mittelung über viele Messungen, es gilt also

$$\overline{\vec{r}}^{\psi_i} = \iiint \vec{r} |\psi_i(\vec{r})|^2 d^3\vec{r},$$

d.h.  $\overline{x}^{\psi_i} = \iiint_{\mathbb{R}^3} x |\psi_i(\vec{r})|^2 d^3\vec{r}$  und analog für die übrigen Komponenten. Mit  $|\psi|^2 = \psi^* \psi$  erhalten wir durch

$$\overline{\vec{r}}^{\psi_i} = \iiint \psi^*(\vec{r}, t) \vec{r} \psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r}$$

eine etwas elegantere Darstellung. Man definiert nun ein Skalarprodukt im Raum der Wellenfunktionen durch

$$(\phi, \psi) := \iiint \phi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r},$$

welches im Allgemeinen zeitabhängig ist. Außerdem definiert man den Operator  $\hat{X}$  im Raum der Wellenfunktionen durch

$$\hat{X} : \psi(\vec{r}, t) \mapsto \hat{X}\psi = x\psi(\vec{r}, t)$$

und analog die Operatoren  $\hat{Y}$  und  $\hat{Z}$  für die übrigen Komponenten, sowie  $\hat{X}$  mit  $\hat{X}\psi = \vec{r}\psi(\vec{r}, t)$ . Es handelt sich hierbei jeweils um lineare Operatoren, mit denen sich die oben erklärten Erwartungswerte als

$$\overline{x}^{\psi_i} = \iiint \psi^*(\vec{r}, t) x \psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = \iiint \psi^*(\vec{r}, t) [\hat{X}\psi(\vec{r}, t)] d^3\vec{r} = (\psi, \hat{X}\psi) = \langle \hat{X} \rangle_{\psi}$$

schreiben lassen. Dabei beschreibt  $\langle \hat{X} \rangle_{\psi}$  den Erwartungswert des Operators  $\hat{X}$  im Zustand  $\psi$ , analog natürlich wieder für die übrigen Komponenten  $\langle \hat{Y} \rangle_{\psi}$  und  $\langle \hat{Z} \rangle_{\psi}$ .

### Erwartungswerte ortsabhängiger Funktionen

Man betrachte eine Observable, die klassisch als Funktion  $f(\vec{r})$  vom Ort abhängt. Der Erwartungswert von  $f$  im Systemzustand  $\psi$  ist dann

$$\begin{aligned} \overline{f(\vec{r})} &= \iiint f(\vec{r}) |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = \iiint \psi^*(\vec{r}, t) f(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r} \\ &= \iiint \psi^*(\vec{r}, t) f(\hat{X}) \psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = (\psi, f(\hat{X})\psi) = \langle f(\hat{X}) \rangle_{\psi}. \end{aligned}$$

Der zu einer Observablen  $f(\vec{r})$  gehörige Operator ist dann  $f(\hat{X})$ .

### Impuls-Operator und -Erwartungswert

Neben dem Ort  $\vec{r}$  ist der Impuls  $\vec{p}$  eines Teilchens eine entscheidende Größe. Der Impulsoperator  $\hat{P}_x$  soll so sein, dass  $\overline{P_x^\psi} = (\psi, \hat{P}_x \psi) = \langle \hat{P}_x \rangle_\psi$  gilt. Die Bedeutung des Impulses im Mikroskopischen lässt sich auf zwei verschiedenen Weisen verstehen, entweder über das Noether-Theorem (der Impuls ist der Generator von räumlichen Translationen, dazu später mehr) oder über das **Korrespondenzprinzip**, d.h. durch die Betrachtung des klassischen Grenzfalles.

Wir wollen zunächst der letzteren Interpretation folgen, es schließt sich dann direkt die Frage an, wie der klassische Grenzfall charakterisiert ist. Eine sinnvolle Forderung ist beispielsweise eine de-Broglie-Wellenlänge  $\lambda \ll L$ , wobei  $L$  die typische Längendimension des klassischen Objekts sei. In diesem Fall gilt dann

$$\lambda = \frac{h}{p} \ll L \quad \Longrightarrow \quad Lp \gg h ,$$

wobei  $Lp$  die Wirkung ist. Man erwartet in dieser Situation, dass sich die Objekte klassisch verhalten, d.h. die Messergebnisse für jede Observable nur sehr gering streuen, dass also alle Messergebnisse sehr nahe dem Erwartungswert der Observablen sind und somit für die Erwartungswerte der Observablen die klassischen Gesetze gelten. Insbesondere ist demnach dann

$$\overline{\vec{p}} = m \frac{d}{dt} \overline{\vec{r}} \quad \text{da klassisch } \vec{p} = m\vec{v} = m \frac{d}{dt} \vec{r} .$$

Man erwartet, dass diese Beziehung immer gilt, woraus sich nun der Impuls-Operator  $\hat{\vec{P}}$  ableiten lässt. Dazu betrachte das Skalarprodukt

$$\begin{aligned} (\psi, \hat{P}_x \psi) &= m \frac{d}{dt} (\psi, \hat{X} \psi) = m \frac{d}{dt} \iiint \psi^*(\vec{r}, t) \hat{X} \psi(\vec{r}, t) d^3\vec{r} \\ &= m \iiint \frac{\partial \psi^*}{\partial t} x \psi d^3\vec{r} + m \iiint \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial t} d^3\vec{r} \\ &= \frac{m}{i\hbar} \iiint \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\Delta \psi^*) x \psi + V \psi^* x \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \psi^* x \Delta \psi - \psi^* x V \psi \right] d^3\vec{r} \\ &= \frac{m \hbar^2}{i\hbar 2m} \iiint \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} x \psi + \left[ \left( \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi^* \right] x \psi \\ &\quad - \psi^* x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \psi^* x \left( \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi d^3\vec{r} \\ &= \frac{\hbar}{2i} \iiint \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \psi \right) - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \frac{\partial \psi}{\partial x} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x} \left( \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \frac{\partial \psi}{\partial x} dx dy dz . \end{aligned}$$

Verwendet man nun  $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \psi \right) dx = \frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \psi \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$ , so erhält man daraus

$$\frac{\hbar}{2i} \iiint \left[ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right] dx dy dz \stackrel{\text{P.I.}}{=} \frac{\hbar}{i} \iiint \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} d^3\vec{r} = \iiint \psi^* \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi d^3\vec{r}$$

für den Impulsoperator, also gilt schließlich im Vergleich  $(\psi, \hat{P}_x \psi) = \iiint \psi^* \hat{P}_x \psi d^3\vec{r}$  dann

$$\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad \hat{P}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \quad \hat{P}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad \text{bzw.} \quad \hat{\vec{P}} = -i\hbar \vec{\nabla} .$$

### Beliebige Observablen

Man kann nun analog auch Erwartungswerte von Funktionen des Impulses statt des Orts betrachten. Der zugehörige Operator zu einer Funktion  $g(\vec{p})$  ist dann durch  $g(-i\hbar\vec{\nabla})$  bestimmt. So erhält man für die kinetische Energie beispielsweise

$$T = \frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla})(-i\hbar\vec{\nabla}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta.$$

Der Operator für die Gesamtenergie ist  $\hat{E} = \hat{H}$ , der sogenannte **Hamilton-Operator**, der durch

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$$

gegeben ist. Man erkennt, dass mit seiner Hilfe die Einteilchen-Schrödinger-Gleichung in deutlich verkürzter Form als

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi$$

geschrieben werden kann. Betrachtet man weiter eine beliebige Observable, die klassisch durch Funktionen  $f = f(\vec{r}, \vec{p})$  gegeben sind, so ist der zugehörige Operator durch

$$\hat{f} = f(\hat{X}, \hat{P}) = f(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla})$$

spezifiziert. Eine Verallgemeinerung auf ein System von  $N$  Teilchen mit der klassischen Observable  $f(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$  ist dann einfach durch den Operator

$$\hat{f} = f(\hat{X}_1, \dots, \hat{X}_N, \hat{P}_1, \dots, \hat{P}_N)$$

bestimmt. Man betrachte dann weiter ein System von  $N$  Teilchen, die klassisch durch die Hamilton-Funktion

$$H(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N) = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \sum_i V_i(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$$

beschrieben werden, der zugehörige Hamilton-Operator lautet dann

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i \right) + \sum_i V_i(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}(\vec{r}_i, \vec{r}_j).$$

Ein solches System wird durch die  $N$ -Teilchen-Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$  beschrieben, wobei man als Schrödinger-Gleichung für ein  $N$ -Teilchensystem postuliert

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = \hat{H}\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t).$$

**Bemerkung:** Fassen wir noch einmal kurz zusammen. Man ordnet jeder Observablen, d.h. messbaren dynamischen Variable  $A$ , einen linearen Operator  $\hat{A}$  im Raum der Wellenfunktionen zu, und zwar so, dass der Erwartungswert des Operator  $\hat{A}$  im Zustand definiert ist durch

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = (\psi, \hat{A}\psi) = \iiint \psi_t^*(\vec{r}) \hat{A}\psi_t(\vec{r}) d^3\vec{r}$$

und gleich dem Mittelwert der Messergebnisse von  $A$  über viele Messungen an identisch präparierten Systemen ist.

### Mathematischer Einschub: Das Fourier-Theorem

Als nächstes wollen wir Wellenpaket-Lösungen der Schrödinger-Gleichung als Überlagerung monochromatischer ebener Wellen betrachten, wozu wir erst einige mathematische Vorbereitungen leisten wollen. Man betrachte eine beliebige Funktion  $y(x)$  die absolut integrierbar sei und die Dirichlet-Bedingung erfülle. Dann lässt sich diese als

$$y(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{1}{\sqrt{2\pi}} f(k) e^{ikx}$$

darstellen, d.h. als Überlagerung von  $e^{ikx}$ -Funktionen mit geeignetem Gewicht  $f(k)$ . Umgekehrt ergibt sich eine Gewichtsfunktion, die **Fourier-Transformierte**

$$f(k) = \tilde{y}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-ikx} y(x) .$$

**Beispiel:** Als einfaches und zugleich wichtiges Beispiel betrachten wir die Fourier-Transformation eines Gaußschen Wellenpakets mit

$$y(x) = \exp\left(-\left[\frac{x-x_0}{2\Delta x}\right]^2\right) \stackrel{!}{=} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk f(k) e^{ikx} .$$

Für die Fourier-Transformierte  $f(k)$  gilt mit der Definition  $C := x_0 - 2(\Delta x)^2 ik$

$$\begin{aligned} f(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-ikx} \exp\left(-\left[\frac{x-x_0}{2\Delta x}\right]^2\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2 + ikx \cdot 4(\Delta x)^2}{4(\Delta x)^2}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \exp\left(-\frac{(x-C)^2 + x_0^2 - C^2}{4(\Delta x)^2}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \exp\left(-\frac{(x-C)^2}{4(\Delta x)^2}\right) \exp\left(-\frac{x_0^2 - C^2}{4(\Delta x)^2}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0 - k^2(\Delta x)^2} \int dx \exp\left(-\left[\frac{x-C}{2\Delta x}\right]^2\right) . \end{aligned}$$

Substituiert man nun noch  $y := \frac{x-C}{2\Delta x}$  mit  $dy = \frac{1}{2\Delta x} dx$ , so erhält man daraus

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} 2\Delta x e^{-k^2(\Delta x)^2} e^{-ikx_0} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \sqrt{2}\Delta x \exp\left(-\frac{k^2}{4(\Delta k)^2}\right) e^{-ikx_0}$$

für  $\Delta k = \frac{1}{2\Delta x}$ . Dies ist eine harmonische Funktion moduliert mit einer Gaußverteilung um  $k = 0$ . Man beachte, dass  $\Delta x \cdot \Delta k = \frac{1}{2}$  gilt, ist also die Breite  $\Delta x$  der ursprünglichen Verteilung klein, so muss die Breite  $\Delta k$  der Fourier-transformierten Verteilung groß sein und umgekehrt. Es gilt weiter auch die Umkehrung

$$f(k) = \exp\left(-\left[\frac{k-k_0}{2\Delta k}\right]^2\right) = \tilde{y}(k) \quad \implies \quad y(x) = \sqrt{2}\Delta k \exp\left(-\left[\frac{x}{2\frac{1}{2\Delta k}}\right]^2\right) e^{ik_0 x} .$$

### 12.5.4. Wellenpaket-Lösungen der Schrödinger-Gleichung

Wir suchen jetzt nach einer Lösung der eindimensionalen Einteilchen-Schrödinger-Gleichung für  $\psi(x, t)$ , sodass

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk f(k) e^{ikx} \quad \text{mit} \quad f(k) = \exp\left(-\left[\frac{k-k_0}{2\Delta k}\right]^2\right)$$

gilt, außerdem sei  $\Delta k \ll k_0$ . Wegen der Linearität der Schrödinger-Gleichung erwartet man, dass die zu der obigen Überlagerung gehörende Lösung gleich

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk f(k) e^{i(kx - \omega(k)t)}$$

ist, wobei aus der freien Schrödinger-Gleichung der Zusammenhang  $\omega(k) = \frac{\hbar}{2m} \vec{k}^2$  folgt. Dies zeigt sich direkt durch Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, t) \iff \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) \psi(x, t) = 0$$

was dann

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk f(k) \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) e^{i(kx - \omega(k)t)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk f(k) \overbrace{\left( \hbar\omega(k) - \frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}^2 \right)}^0 e^{i(kx - \omega(k)t)}$$

liefert. Man betrachte dann die Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  in diesem speziellen Fall von  $f(k)$ . Alle beitragenden  $k$ -Werte sind in der Nähe von  $k_0$ , also entwickelt man  $\omega(k)$  um diesen Punkt  $k_0$  in eine Taylorreihe

$$\begin{aligned} \omega(k) &= \omega(k_0) + (k - k_0) \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} + \frac{1}{2} (k - k_0)^2 \left( \frac{d^2\omega}{dk^2} \right)_{k_0} + \dots \\ &= \omega_0 + (k - k_0) v_G + \frac{1}{2} (k - k_0)^2 \alpha + \dots \end{aligned}$$

sodass sich unter Verwendung der Entwicklungsterme bis zur ersten Ordnung für die Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \exp\left(-\left[\frac{k-k_0}{2\Delta k}\right]^2\right) e^{ikx} e^{-i(\omega_0 + (k-k_0)v_G)t} \\ &= \sqrt{2\Delta k} \cdot e^{i(k_0x - \omega_0t)} \exp\left(-\left[\frac{x - v_Gt}{2\Delta x}\right]^2\right) \quad \text{mit} \quad \Delta x = \frac{1}{2\Delta k} . \end{aligned}$$

Die Amplitude der ebenen Welle  $e^{i(k_0x - \omega_0t)}$  ist durch die Gaußverteilung um  $x = v_Gt$  moduliert, es handelt sich also um ein Wellenpaket mit der Breite  $\Delta x$ , welches sich mit der Geschwindigkeit  $v_G$  nach rechts bewegt, wobei  $v_G$  als Gruppengeschwindigkeit bezeichnet wird. Jede Komponente von  $e^{i(kx - \omega t)}$  hat die

$$\begin{aligned} \text{Phasengeschwindigkeit:} \quad v_P(k) &= \frac{\omega(k)}{k} \quad \text{und} \\ \text{Gruppengeschwindigkeit:} \quad v_G &= \left( \frac{d\omega(k)}{dk} \right)_{k_0} . \end{aligned}$$

Im Fall der freien Schrödinger-Gleichung ist  $\omega(k) = \frac{\hbar}{2m} k^2$ , also gilt  $v_G = \frac{\hbar}{m} k_0 = \frac{p_0}{m}$ . Man beachte, dass die Breite  $\Delta x = \frac{1}{2\Delta k}$  eine zeitliche Konstante ist. Dies ändert sich aber, wenn man bei der Taylorreihenentwicklung auch die höheren Ordnungen mit berücksichtigt. Bei Hinzunahme des dritten Summanden folgt bereits

$$\Delta x(t) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{(\Delta k)^2} + \alpha^2 (\Delta k)^2 t^2} .$$

Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation des Ergebnisses lautet nun wie folgt:  $|\psi(x, t)|^2$  ist die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, das Teilchen zur Zeit  $t$  am Ort  $x$  anzutreffen. Hier ist diese Wahrscheinlichkeit nur im Bereich  $x = v_G t \pm \Delta x$  nennenswert von Null verschieden.  $\Delta x$  lässt sich somit als **Ortsunschärfe** des Teilchens interpretieren. Andererseits schreibt man jeder Welle  $e^{i(kx - \omega t)}$  den Impuls  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$  zu, wobei hier  $k$  nur für  $k_0 \pm \Delta k$  nennenswert von Null verschieden ist. Man interpretiert deshalb  $\hbar \Delta k = \Delta p$  als die **Impulsunschärfe**. Mit  $\Delta x = \frac{1}{2\Delta k}$  ergibt sich nun

$$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2} .$$

Man kann mathematisch zeigen, dass dieses Breitenprodukt für die im betrachteten Fall einer Gaußverteilung ein Minimum annimmt, für allgemeine Verteilungen gilt also die **Heisenbergsche Unschärferelation**

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} .$$

Die Unschärferelation impliziert, dass man keine Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  finden kann, für die gleichzeitig  $\Delta x = 0$  und  $\Delta p = 0$  gilt - eine gewissen Messungenauigkeit ist also ein Prinzip der Natur.

**Beispiel:** Eine praktische Manifestation lässt sich nun im Rahmen einer Messung veranschaulichen. Dazu lasse man monochromatisches Licht auf einen Einzelspalt fallen. Der Impuls des Lichts sei durch  $\vec{p} = (0, 0, p_z)$  gegeben, also gilt  $\Delta p_x = \Delta p_y = \Delta p_z = 0$ , folglich muss  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \infty$  gelten (dies ist mathematisch unsauber formuliert, verdeutlicht aber das Prinzip), damit die Heisenbergsche Unschärferelation erfüllt ist. Tritt das Licht durch die Blende, so ergibt sich eine Ortsunschärfe von  $\Delta x = \frac{b}{2}$ , wobei hier  $b$  der Breite des Einzelspalts entspricht.

Weiter erhalten die Teilchen aber auch einen nichtverschwindenden Impuls in  $x$ -Richtung, der sich aus der Intensitätsverteilung ergibt. Ist  $\vartheta_{\min}$  der Winkel bei dem das erste Intensitätsminimum zu beobachten ist, so gilt  $\sin \vartheta = \frac{\lambda}{b}$ , und es ergibt sich

$$p_x = p \sin \vartheta_{\min} = p \frac{\lambda}{b} = \Delta p_x \quad \implies \quad \Delta x \cdot \Delta p_x = p \frac{b \lambda}{2 b} = p \frac{b \lambda}{2 b} = \frac{h}{2} > \frac{\hbar}{2} .$$

## 12.6. Observablen-Operatoren und ihre Eigenwertgleichungen

### 12.6.1. Summe und Produkt von Operatoren

Man betrachte einen beliebigen Operator  $\hat{A}$  im Raum der Wellenfunktionen  $\mathcal{H}$ . Im Allgemeinen wird  $\hat{A}$  nicht auf dem ganzen Hilbertraum  $\mathcal{H}$  definiert sein, nämlich dann, wenn  $\hat{A}\psi$  nicht mehr

quadratintegrierbar ist, es existiert also ein Definitionsbereich  $D_{\hat{A}} \subset \mathcal{H}$  von  $\hat{A}$ . Im mathematischen Anhang B ab Seite 265 werden diese Details für den Orts- und Impulsoperator detailliert ausgearbeitet.

Man definiere nun die Summe und das Produkt zweier Operatoren auf kanonische Weise durch

$$(\hat{A} + \hat{B})\psi := \hat{A}\psi + \hat{B}\psi \quad \text{und} \quad (\hat{A} \cdot \hat{B})\psi := \hat{A}(\hat{B}\psi)$$

und macht sich dann leicht klar, dass das hier erklärte Produkt zweier Operatoren im Allgemeinen nicht kommutativ ist. Betrachte beispielsweise das Produkt von Orts- und Impuls-Operator, dann gilt

$$\begin{aligned} \hat{X}\hat{P}_x\psi &= \hat{X}(\hat{P}_x\psi) = -i\hbar\hat{X}\frac{\partial}{\partial x}\psi = -i\hbar x\frac{\partial}{\partial x}\psi \quad \text{und} \\ \hat{P}_x\hat{X}\psi &= \hat{P}_x(\hat{X}\psi) = \hat{P}_x(x\psi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = -i\hbar x\frac{\partial}{\partial x}\psi - i\hbar\psi. \end{aligned}$$

Daher erklären wir für zwei Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  den **Kommutator**  $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ , der die Differenz zwischen den beiden Anordnungen angibt. Im vorigen Beispiel wäre also  $[\hat{X}, \hat{P}_x] = i\hbar$ , allgemeiner gilt für die übrigen Komponenten

$$[\hat{X}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad [\hat{X}_i, \hat{X}_j] = 0 \quad [\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0.$$

### 12.6.2. Eigenschaften von Observablen-Operatoren

Wie wir bereits wissen, müssen Observablen-Operatoren wegen des Superpositionsprinzips linear sein. Außerdem müssen sie so gegeben sein, dass ihre Erwartungswerte bezüglich der Zustands-Wellenfunktion  $\psi$  reell sind. Für  $\langle \hat{A} \rangle_\psi \in \mathbb{R}$  muss also  $(\psi, \hat{A}\psi)^* = (\psi, \hat{A}\psi)$  für alle  $\psi \in \mathcal{H}$  erfüllt sein. Zu einem Operator  $\hat{A}$  definiert man den **hermitesch konjugierten Operator**  $\hat{A}^\dagger$ , sodass

$$(\psi_1, \hat{A}\psi_2) = (\hat{A}^\dagger\psi_1, \psi_2)$$

für alle  $\psi_1, \psi_2$  im Definitionsbereich erfüllt ist. Daraus folgt dann für die Forderung eines reellen Erwartungswert

$$(\hat{A}^\dagger\psi, \psi) = (\psi, \hat{A}\psi) \stackrel{!}{=} (\psi, \hat{A}\psi)^* = (\hat{A}\psi, \psi)$$

für alle  $\psi \in D$ , also muss  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$  und  $D_{\hat{A}^\dagger} \supset D_{\hat{A}}$  gelten. Einen Operator mit diesen Eigenschaften nennt man hermitesch, wenn außerdem  $D_{\hat{A}^\dagger} = D_{\hat{A}}$  gilt, so heißt  $\hat{A}$  selbstadjungiert. Kurzgesagt stellen wir also fest, dass sinnvolle Observablen-Operatoren linear und hermitesch (oder selbstadjungiert) sein müssen.

### 12.6.3. Eigenwerte und Eigenfunktionen von Observablen-Operatoren

Berechnen wir zunächst die **Unschärfe** bzw. **Dispersion** einer Observablen  $\hat{A}$ , d.h. die mittlere quadratische Abweichung vom Erwartungswert, die durch  $\overline{(\Delta A)^2} := \overline{(A - \bar{A})^2}$  definiert ist. Es gilt dann

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\psi)^2 \rangle_\psi = \langle \hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A} \rangle_\psi + \langle \hat{A} \rangle_\psi^2 \rangle_\psi \\ &= \langle \hat{A}^2 \rangle_\psi - 2\langle \hat{A} \rangle_\psi \langle \hat{A} \rangle_\psi + \langle \hat{A} \rangle_\psi^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle_\psi - \langle \hat{A} \rangle_\psi^2. \end{aligned}$$

Eine interessante Frage ist nun, ob es Zustand-Wellenfunktionen  $\psi$  gibt, sodass  $\overline{(\Delta A)^2} = 0$  gilt, also Zustände, die mit Sicherheit den Erwartungswert  $\langle \hat{A} \rangle_\psi$  liefern. Dazu definiere man

für einen gegebenen Observablen-Operator  $\hat{A}$  die zugehörigen Eigenwerte und Eigenfunktionen mittels der Eigenwertgleichung

$$\hat{A}f_{a_n}(\vec{r}) = a_n f_{a_n}(\vec{r})$$

für  $n = 1, 2, \dots$ . Jede Zahl  $a_n$ , für die diese Gleichung eine normierbare Lösung  $f_{a_n}(\vec{r})$  hat, heißt **Eigenwert** von  $\hat{A}$  und  $f_{a_n}(\vec{r})$  ist zu gehörende **Eigenfunktion**. Umgekehrt formuliert ist jede normierbare Funktion  $f(\vec{r}) = f_{a_n}(\vec{r})$ , zu der es eine Zahl  $a_n$  gibt, sodass

$$\hat{A}f_{a_n}(\vec{r}) = a_n f_{a_n}(\vec{r})$$

gilt eine Eigenfunktion von  $\hat{A}$  und  $a_n$  der zugehörige Eigenwert.

Im Allgemeinen wird es nur für einzelne, diskret verteilte Zahlen  $a_n$  derartige Eigenwertlösungen geben. Man wähle dabei die Eigenfunktionen auf Länge Eins normiert und betrachte dann die Zustands-Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$ , die durch

$$\psi(\vec{r}, 0) = f_{a_n}(\vec{r})$$

mit dem Eigenzustand zum Eigenwert  $a_n$  von  $\hat{A}$  in Verbindung gebracht wird. Für den Erwartungswert der Observablen  $A$  in diesem Zustand gilt dann

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle_{\psi_{t=0}} &= (\psi_0, \hat{A}\psi_0) = \iiint d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}, 0) \hat{A}\psi(\vec{r}, 0) = \iiint d^3\vec{r} f_{a_n}^*(\vec{r}) \hat{A}f_{a_n}(\vec{r}) \\ &= a_n \iiint d^3\vec{r} f_{a_n}^*(\vec{r}) f_{a_n}(\vec{r}) = a_n, \end{aligned}$$

die Eigenwerte von Observablen-Operatoren sind also insbesondere reell, da man die Eigenwertgleichung im vorletzten Schritt auch von links lesen kann. Für die Dispersion folgt

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \langle \hat{A}^2 \rangle_{\psi_{t=0}} - \langle \hat{A} \rangle_{\psi_{t=0}}^2 = \iiint d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}, 0) \hat{A}^2 \psi(\vec{r}, 0) - a_n^2 \\ &= \iiint d^3\vec{r} f_{a_n}^*(\vec{r}) \hat{A} \hat{A} f_{a_n}(\vec{r}) - a_n^2 = 0, \end{aligned}$$

Eigenzustände weisen also keinerlei Unschärfe zum Erwartungswert auf, d.h. im Eigenzustand  $f_{a_n}(\vec{r})$  ergibt eine Messung der Observablen  $A$  mit Sicherheit den Wert  $a_n$ . Befindet sich das System umgekehrt in einem solchen Zustand (in dem wiederholte Messung der Observablen  $A$  immer denselben Wert liefert), so ist dieser Zustand durch einen Eigenzustand  $f_{a_n}(\vec{r})$  des Operators  $\hat{A}$  beschrieben.

**Bemerkung:** Man betrachte das System in einem beliebigen Zustand  $\psi(\vec{r}, t)$  und messe eine beliebig ausgewählte Observable  $A$  in diesem Zustand, wobei diese den Wert  $a$  liefert. Dann muss als physikalische Konsequenz gelten, dass eine zeitlich unmittelbar anschließende nochmalige Messung von  $A$  wieder (mit Sicherheit) den Wert  $a$  liefert.

Folglich befindet sich unmittelbar nach der ersten Messung von  $A$  mit dem Ergebnis  $a$  das System in einem Eigenzustand  $f_a(\vec{r})$  des Observablen-Operators  $\hat{A}$ . Dies nennt man den **Kollaps der Wellenfunktion**,

$$\psi(\vec{r}, t) \xrightarrow{\text{Messung von } A} f_a(\vec{r}),$$

als mögliche Messergebnisse von  $A$  kommen somit nur die Eigenwerte von  $\hat{A}$  in Frage.

Insgesamt gilt also, dass bei einer Messung von  $A$  im Zustand  $\psi$  als Messergebnisse nur die Eigenwerte  $a_n$  von  $\hat{A}$  auftreten können und nach erfolgter Messung mit Wert  $a_n$  sich das System im zugehörigen Eigenzustand  $f_{a_n}(\vec{r})$  befindet.

#### 12.6.4. Orts- und Impulsoperator und zugehörige Eigenfunktionen

Der Orts-Operator  $\hat{X}$  und Impulsoperator  $\hat{P}_x$  (bzw. die vektoriellen Operatoren) sind neben dem Hamilton-Operator  $\hat{H}$  die wohl wichtigsten Operatoren der Quantenmechanik, daher werden wir nun ihre Eigenwertigenschaften gesondert untersuchen. Die zugehörige Eigenwertgleichung des Ortsoperators ist

$$\hat{X} f_{x'}(x) = x' f_{x'}(x) \iff (x - x') f_{x'}(x) = 0 ,$$

also muss  $f_{x'}(x) = 0$  für alle  $x \neq x'$  gelten, wir wählen daher  $f_{x'}(x) = B\delta(x - x')$  als Eigenfunktion von  $\hat{X}$  zum Eigenwert  $x'$ . Dies gilt für alle reellen Werte von  $x'$ , problematisch ist aber, dass  $f_{x'}(x) = B\delta(x - x')$  nicht normierbar ist - auf diese Problematik wird im Anhang genauer eingegangen. Im Dreidimensionalen hat man analog

$$\hat{X} f_{\vec{r}'}(\vec{r}) = \vec{r}' f_{\vec{r}'}(\vec{r}) \iff (\vec{r} - \vec{r}') f_{\vec{r}'}(\vec{r}) = 0 \implies f_{\vec{r}'}(\vec{r}) = B\delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') .$$

Betrachte dann die  $x$ -Komponente  $\hat{P}_x$  des Impulsoperators, dann lautet die zugehörige Eigenwertgleichung

$$\hat{P}_x f_{p_x}(x) = p_x f_{p_x}(x) \iff -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} f_{p_x}(x) = p_x f_{p_x}(x) \iff \frac{\partial}{\partial x} f_{p_x}(x) = i \frac{p_x}{\hbar} f_{p_x}(x) ,$$

hier erhalten wir also eine Differentialgleichung zur Bestimmung der Eigenfunktionen. Für alle reellen Eigenwerte  $p_x$  hat diese Gleichung die Lösung

$$f_{p_x}(x) = C \exp\left(\frac{ip_x}{\hbar} x\right)$$

wie man leicht nachprüft. Aber auch hier ist die Lösung nicht normierbar, denn es gilt

$$(f_{p_x}, f_{p_x}) = \int dx |C|^2 \exp\left(-\frac{ip_x}{\hbar} x\right) \exp\left(\frac{ip_x}{\hbar} x\right) = |C|^2 \int dx = \infty .$$

Ähnliches gilt auch im dreidimensionalen Fall, wo die Eigenwertgleichung auf

$$\hat{P}_{\vec{p}} f_{\vec{p}'}(\vec{r}) = \vec{p}' f_{\vec{p}'}(\vec{r}) \iff -i\hbar \vec{\nabla} f_{\vec{p}'}(\vec{r}) = \vec{p}' f_{\vec{p}'}(\vec{r})$$

führt. Diese Gleichung hat für alle reellen Vektoren  $\vec{p}'$  die Lösung

$$f_{\vec{p}'}(\vec{r}) = C \exp\left(\frac{i\vec{p}'\vec{r}}{\hbar}\right) ,$$

wie ebenfalls durch Einsetzen nachzuprüfen ist. Aber auch diese Lösung ist nicht normierbar, denn es gilt

$$\begin{aligned} (f_{\vec{p}'}, f_{\vec{p}''}) &= \iiint d^3\vec{r} f_{\vec{p}'}^*(\vec{r}) f_{\vec{p}''}(\vec{r}) = |C|^2 \iiint d^3\vec{r} \exp\left(-\frac{i\vec{p}'\vec{r}}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{i\vec{p}''\vec{r}}{\hbar}\right) \\ &= |C|^2 \iiint d^3\vec{r} \exp\left(-\frac{i(\vec{p}' - \vec{p}'')\vec{r}}{\hbar}\right) \stackrel{\text{Sub.}}{=} |C|^2 \hbar^3 \iiint d\vec{y} e^{-i(\vec{p}' - \vec{p}'')\vec{y}} \\ &= |C|^2 (2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\vec{p}' - \vec{p}'') , \end{aligned}$$

üblicherweise wählt man dann  $C = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}$ , sodass der Vorfaktor verschwindet. Mit der  $\delta$ -Funktion haben wir aber trotzdem eine gewisse kontinuierlich-dimensionale Orthogonalitätsbedingung auf dem Raum der Wellenfunktionen, also nennen wir

$$f_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}\right) \quad \text{mit} \quad (f_{\vec{p}}, f_{\vec{p}'}) = \delta^{(3)}(\vec{p}' - \vec{p})$$

die **quasinormierten Eigenfunktionen des Impuls-Operators**  $\hat{P}$ . Analog setzt man für  $f_{\vec{r}'}(\vec{r})$  die Konstante  $B = 1$ , dann sind  $f_{\vec{r}'}(\vec{r}) = \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}')$  die **quasinormierten Eigenfunktionen des Orts-Operators**.

### 12.6.5. Technische Alternativen für nicht normierbare Eigenfunktionen

Statt der Verwendung quasinormierter Eigenfunktionen, können wir auch noch einige andere Wege gehen. Sei dazu  $\psi(\vec{r}, t)$  eine Wellenfunktion der freien Schrödinger-Gleichung, die zur Zeit  $t = 0$  gleich  $f_{\vec{p}}(\vec{r})$  ist, so gilt

$$\psi(\vec{r}, 0) = C \exp\left(\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}\right) \quad \Longrightarrow \quad \psi(\vec{r}, t) = C \exp\left(i\left[\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar} - \omega t\right]\right) = C e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega(\vec{k})t)}$$

wobei sich die Zeitentwicklung aus der Schrödinger-Gleichung ergibt. Diese Funktion  $\psi(\vec{r}, t)$  beschreibt ein Teilchen, das den definierten Impuls  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  und die definierte Energie  $E = \hbar\omega$  besitzt, allerdings ist die Funktion wegen

$$\iiint |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = \iiint d^3\vec{r} |f_{\vec{p}}(\vec{r})|^2 = |C|^2 \cdot \infty$$

wieder nicht normierbar. Damit lässt sich die Lösungsfunktion  $\psi$  physikalisch nicht sinnvoll interpretieren, allerdings gibt es mehrere Auswege.

#### Endliches Volumen

Die Unendlichkeit des obigen Integrals entsteht durch das unbeschränkte Integrationsvolumen  $\mathbb{R}^3$ , ein simpler Ansatz besteht also darin, nur ein endliches Volumen  $L^3$  (Würfel mit der Kantenlänge  $L$ ) zu betrachten, außerhalb dessen  $|\psi|^2 = 0$  ist. Außerdem wähle man periodische Randbedingungen, also  $\psi(x = -\frac{L}{2}, y, z, t) = \psi(x = \frac{L}{2}, y, z, t)$  und analog für  $y, z$ , d.h. insbesondere für  $\psi(\vec{r}, t) = f_{\vec{p}}(\vec{r})$  gilt

$$\begin{aligned} \exp\left(i\frac{p_x L}{2\hbar}\right) \exp\left(i\frac{p_y y}{\hbar}\right) \exp\left(i\frac{p_z z}{\hbar}\right) &= \exp\left(-i\frac{p_x L}{2\hbar}\right) \exp\left(i\frac{p_y y}{\hbar}\right) \exp\left(i\frac{p_z z}{\hbar}\right) \\ \iff \exp\left(i\frac{p_x L}{\hbar}\right) &= 1 \iff \frac{p_x L}{\hbar} = 2\pi n \iff p_x = \frac{2\pi\hbar n}{L} \end{aligned}$$

mit  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Durch die Beschränkung des Volumens sind also nur diskrete  $\vec{p}$ -Werte als Eigenwerte möglich, d.h.  $\vec{p} = \frac{2\pi\hbar}{L}\hat{n}$  mit  $\hat{n} \in \mathbb{Z}^3$ . Die zugehörigen Impuls-Eigenfunktionen sind dann mit

$$(f_{\vec{p}_n}, f_{\vec{p}_n}) = \iiint d^3\vec{r} |C_n|^2 \rightarrow |C_n|^2 \iiint_{L^3} d^3\vec{r} = |C_n|^2 L^3 \stackrel{!}{=} 1 \quad \text{mit} \quad C_n = L^{-\frac{3}{2}}$$

normierbar.

### Teilchenflussdichte

Als alternativen Weg betrachten wir nun weiterhin den gesamten  $\mathbb{R}^3$ , interpretieren jetzt aber  $\psi(\vec{r}, t)$  als Wellenfunktion eines Vielteilchensystems mit unendlich vielen Teilchen, und ersetzen dann die Wahrscheinlichkeitsstromdichte durch die Teilchenflussdichte. Betrachten wir zuerst ein endliches Volumen  $V$ , dann gilt

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \iiint_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = \iiint_V \left[ \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] d^3\vec{r} \\ &= \frac{i}{\hbar} \iiint_V \left[ \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + V \psi^* \right) \psi - \psi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi \right) \right] d^3\vec{r} \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \iiint_V [(\Delta \psi^*)\psi - \psi^* \Delta \psi] d^3\vec{r} = -\frac{i\hbar}{2m} \iiint_V \vec{\nabla} \cdot (\psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi^* \vec{\nabla} \psi) d^3\vec{r}. \end{aligned}$$

Definiert man dann die Wahrscheinlichkeitsstromdichte als  $\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi]$ , dann gilt mit dem Satz von Gauß

$$0 = \frac{d}{dt} \iiint_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = - \iiint_V \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) d^3\vec{r} = - \oint_{S(V)} \vec{j}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{f}$$

und wir erhalten die **Kontinuitätsgleichung für Wahrscheinlichkeiten**

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(\vec{r}, t)|^2 + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0.$$

Nun wende man sich der wahrscheinlichkeitstheoretischen Interpretation der nicht normierten Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$  zu, die durch

$$\psi(\vec{r}, t) = C \exp \left( i \left[ \frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar} - \omega(\vec{p})t \right] \right) \quad \text{mit} \quad C = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}$$

gegeben ist. Diese Wellenfunktion beschreibe den Zustand eines Vielteilchensystem mit homogener Teilchenverteilung. Man setze die Wahrscheinlichkeitsstromdichte gleich der Teilchenflussdichte, d.h. der Anzahl der pro Sekunde durch die Flächeneinheit  $F = 1$  hindurchgehenden Teilchen. Deren Anzahl ist dann durch  $|\vec{v}| \cdot |F| = |\vec{v}|$  gegeben. Bezeichnet dann weiter  $\rho$  die Teilchendichte, dann gilt für die Teilchenflussdichte  $|\vec{j}| = |\vec{v}|\rho$ . Nun ist weiter die Wahrscheinlichkeitsstromdichte gleich

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} |C|^2 \left( e^{-i(\dots)} \frac{i\vec{p}}{\hbar} e^{i(\dots)} - \frac{-i\vec{p}}{\hbar} e^{-i(\dots)} e^{i(\dots)} \right) = |C|^2 \frac{\vec{p}}{m} = |C|^2 \vec{v},$$

also gilt  $|C|^2 = \rho$  und falls  $C = (2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}$  gilt, so ist  $\rho = (2\pi\hbar)^{-3}$  die Anzahl der Teilchen pro Volumen.

Tatsache ist jedenfalls, dass man auch einige nicht (im eigentlichen Sinne) normierbaren Wellenfunktionen zulassen muss, insbesondere die Eigenfunktionen des Orts- und Impuls-Operators. An dieser Stelle sei noch einmal auf den mathematischen Anhang zu diesem Thema verwiesen.

### 12.6.6. Zusammenhang von Ort und Impuls durch die Fourier-Transformation

Betrachten wir nun eine beliebige Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$  und das Skalarprodukt mit der Impuls-Eigenfunktion  $f_{\vec{p}}(\vec{r})$ , dann gilt

$$\begin{aligned} (f_{\vec{p}}, \psi_t) &= \iiint d^3\vec{r} f_{\vec{p}}^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) = \iiint \frac{d^3\vec{r}}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}\right) \psi(\vec{r}, t) \\ &= \iiint \frac{d^3\vec{r}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}\right) \left(\frac{1}{\hbar^{\frac{3}{2}}}\psi(\vec{r}, t)\right) = f\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}, t\right) = \tilde{\psi}(\vec{p}, t). \end{aligned}$$

Für die Umkehrtransformation findet man dann, wobei hier  $\tilde{\vec{p}} := \frac{\vec{p}}{\hbar}$  sei,

$$\frac{1}{\hbar^{\frac{3}{2}}}\psi(\vec{r}, t) = \iiint \frac{d^3\tilde{\vec{p}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(i\frac{\tilde{\vec{p}}\vec{r}}{\hbar}\right) f(\tilde{\vec{p}}, t) = \frac{1}{\hbar^3} \iiint \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}\right) f\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}, t\right)$$

sodass wir die Darstellung

$$\psi(\vec{r}, t) = \iiint \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}\right) \psi(\vec{p}, t)$$

erhalten. Für den Erwartungswert des Impulsoperators im Zustand  $\psi_t$  gilt nun weiter

$$\langle \hat{P} \rangle_{\psi_t} = (\psi_t, \hat{P}\psi_t) = \iiint d^3\vec{r} \psi_t^*(\vec{r}) \hat{P}\psi_t(\vec{r}) = \iiint d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) (-i\hbar) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \psi(\vec{r}, t)$$

und mit Hilfe der Fourier-Transformierten von  $\psi$  und  $\psi^*$  erhält man daraus

$$\begin{aligned} &\iiint \iiint \frac{d^3\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}^*(\vec{p}', t) \exp\left(-i\frac{\vec{p}'\vec{r}}{\hbar}\right) \cdot (-i\hbar) \vec{\nabla} \exp\left(i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}\right) \tilde{\psi}(\vec{p}, t) d^3\vec{r} \\ &= \iiint \iiint \frac{d^3\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} \tilde{\psi}^*(\vec{p}', t) \exp\left(-i\frac{\vec{p}'\vec{r}}{\hbar}\right) \vec{p} \tilde{\psi}(\vec{p}, t) \iiint \exp\left(-i\frac{(\vec{p}' - \vec{p})\vec{r}}{\hbar}\right) d^3\vec{r}, \end{aligned}$$

wobei für den letzten Integralfaktor wegen  $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$

$$\iiint \exp\left(-i\frac{(\vec{p}' - \vec{p})\vec{r}}{\hbar}\right) d^3\vec{r} = (2\pi)^3 \delta^{(3)}\left(\frac{\vec{p}' - \vec{p}}{\hbar}\right) = (2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\vec{p}' - \vec{p})$$

gilt, also erhalten wir schließlich für den Erwartungswert

$$\langle \hat{P} \rangle_{\psi_t} = \iiint d^3\vec{p} \iiint d^3\vec{p}' \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}') \tilde{\psi}^*(\vec{p}', t) \tilde{\psi}(\vec{p}, t) = \iiint d^3\vec{p} \vec{p} |\tilde{\psi}_t(\vec{p})|^2.$$

Man interpretiere  $|\tilde{\psi}_t(\vec{p})|^2$  als die Wahrscheinlichkeit, mit der bei einer Impulsmessung zur Zeit  $t$  der Wert  $\vec{p}$  erhalten wird. Andererseits war  $\tilde{\psi}_t(\vec{p}) = (f_{\vec{p}}, \psi_t)$  die Wahrscheinlichkeitsamplitude für die Impulsmessung.

Es sei daran erinnert, dass bei der Polarisation die Wahrscheinlichkeitsamplitude im Zustand  $\Phi$  Rechtspolarisation zu messen gegeben ist durch  $|(R, \Phi)|^2$ . Man kann dann analog für die Orts- und Impuls-Erwartungswerte zeigen dass gilt

$$\begin{aligned} \langle \hat{X} \rangle_{\psi_t} &= \iiint d^3\vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \iiint d^3\vec{p} \tilde{\psi}_t(\vec{p}) + i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}} \tilde{\psi}_t(\vec{p}) \\ \langle \hat{P} \rangle_{\psi_t} &= \iiint d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) (-i\hbar) \vec{\nabla}_{\vec{r}} \psi(\vec{r}, t) = \iiint d^3\vec{p} \vec{p} |\tilde{\psi}_t(\vec{p})|^2. \end{aligned}$$

**Bemerkung:** Zur Beschreibung des Zustands eines Teilchens hatte man die Wellenfunktion  $\psi_t(\vec{r})$  als Lösung der Schrödinger-Gleichung auf Eins normiert. Vom physikalischen Standpunkt aus ist jede Funktion der Form  $e^{i\alpha}\psi_t(\vec{r})$  für  $\alpha \in \mathbb{R}$  gleich gut, denn alles Messbare ist durch das Skalarprodukt ausdrückbar. Man sagt der Strahl  $\{e^{i\alpha}\psi(\vec{r}, t) : \alpha \in \mathbb{R}\}$  beschreibt den Zustand.

# 13. Der Formalismus der Quantenmechanik

Nachdem wir im vorigen Kapitel zahlreiche Aspekte und viele Grundlagen der Quantenmechanik kennengelernt haben, werden wir dies nun in ein sauberes mathematisches Rahmenkonzept bringen, also einen einheitlichen Formalismus für die Quantenmechanik einführen. Dies geschieht im Wesentlichen durch die sogenannten Axiome der Quantenmechanik, deren Anzahl aber je nach Literaturquelle deutlich schwankt.

## 13.1. Die Axiome der Quantenmechanik

Man betrachte ein beliebiges physikalisches System, das sich in verschiedenen physikalischen Zuständen befinden kann. Operativ ist dieses System durch die Werte von Observablen bestimmt, allerdings ist noch genauer zu klären, was damit gemeint ist. Wenn alle gleichzeitig messbaren Observablen zur Zeit  $t$  bestimmt sind, so nennen wir dies einen **reinen Zustand**, im Unterschied zu den später behandelten gemischten Zuständen.

### 13.1.1. Erstes Axiom: Zustände

**1. Axiom der Quantenmechanik:** *Zu jedem reinen Zustand des Systems zur festen Zeit  $t$  gehört ein Strahl von Vektoren im Hilbertraum  $\mathcal{H}$  des Systems. Man bezeichnet die Elemente (Vektoren) dieses Hilbertraums als **Ket-Vektoren**, sie werden durch  $|\psi\rangle$  notiert.*

Es sei noch einmal daran erinnert, dass wir unter einem Hilbertraum einen linearen, vollständigen Vektorraum mit Skalarprodukt verstehen, der im Allgemeinen unendlichdimensional ist - es ist also Vorsicht bei den Begriffen wie Stetigkeit linearer Funktionen, etc. geboten. Ein Strahl ist die Menge  $\{e^{i\alpha}|\psi\rangle : \alpha \in \mathbb{R}\}$  zu einem Zustand  $|\psi\rangle$ . Im Folgenden sei stets immer ein repräsentatives Element aus dem Strahl zur Beschreibung des zugehörigen Zustands gewählt, welches insbesondere als normiert angenommen sein, also  $(|\psi\rangle, |\psi\rangle) =: \|\psi\|^2 = 1$ .

Sei  $\mathcal{H}'$  der zu  $\mathcal{H}$  duale Raum, der ebenfalls ein Hilbertraum ist. Der duale Hilbertraum  $\mathcal{H}'$  entspricht der Menge der stetigen linearen Funktionale auf  $\mathcal{H}$ , also gilt

$$\mathcal{H}' = \{ \text{lineare stetige Abbildungen } \phi : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C} \} .$$

Die Elemente von  $\mathcal{H}'$  werden als **Bra-Vektoren**  $\langle\phi|$  notiert. Für den Zusammenhang zwischen dem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  und seinem Dualraum  $\mathcal{H}'$  gilt:

**Satz 17 (Riesz-Fréchet):** *Zu jedem linearen stetigen Funktional  $\phi$  auf  $\mathcal{H}$ , also  $\phi \in \mathcal{H}'$ , gibt es genau ein Element  $|g\rangle \in \mathcal{H}$ , sodass für beliebige  $|f\rangle \in \mathcal{H}$*

$$\phi(|f\rangle) = (|g\rangle, |f\rangle)$$

*gilt, man bezeichnet oft auch  $|g\rangle = |\phi\rangle$ , d.h. es gilt  $\phi(|f\rangle) = (|\phi\rangle, |f\rangle) = \langle\phi|f\rangle$ . Dies liefert eine Isomorphie  $\mathcal{H} \cong \mathcal{H}'$ .*

Nach diesem Theorem können wir also Skalarprodukte zweier Zustände  $|\psi\rangle, |\psi'\rangle \in \mathcal{H}$  künftig elegant als  $\langle\psi|\psi'\rangle = (|\psi\rangle, |\psi'\rangle)$  notieren.

### 13.1.2. Zweites Axiom: Observablen und Operatoren

Als Observable bezeichnet man eine messbare physikalische Eigenschaft des Systems. Jede Observable, die man einem mikroskopischen System zuschreiben kann, ist durch eine Messvorschrift bzw. -vorrichtung definiert. Diese ist meist aus klassischen Überlegungen abgeleitet, allerdings gibt es auch rein quantenmechanische Observablen, wie etwa den später behandelten Spin. Die Messung geschieht dabei durch Wechselwirkung des Systems mit der Messvorrichtung. Wiederholte Messungen derselben Observablen an identisch präparierten Systemen werden im Allgemeinen zu verschiedenen, stochastisch verteilten Messergebnissen führen.

**2. Axiom der Quantenmechanik:** *Zu jeder Observable  $A$  des System, die durch Angabe der Messvorschrift definiert ist, gehört ein auf dem Hilbertraum operierender selbstadjungierter linearer Operator  $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ .*

Im Folgenden werden wir genauer auf die Eigenschaften von Operatoren eingehen. Sei  $\hat{A}$  ein Operator und  $|f\rangle \in D_{\hat{A}} \subset \mathcal{H}$  ein Zustand in seinem Definitionsbereich. Also ist die Zuordnung  $|f\rangle \mapsto \hat{A}|f\rangle \in \mathcal{H}$  wohldefiniert, denn im Allgemeinen ist  $D_{\hat{A}} \neq \mathcal{H}$ . Der Operator  $\hat{A}$  heißt **linear**, wenn die Bedingung

$$\hat{A}(\alpha_1|\psi_1\rangle + \alpha_2|\psi_2\rangle) = \alpha_1\hat{A}|\psi_1\rangle + \alpha_2\hat{A}|\psi_2\rangle$$

für alle  $\alpha_i \in \mathbb{C}$  erfüllt ist. Die Definitionsbereiche aller uns im weiteren Verlauf interessierenden Operatoren liegen dicht im Hilbertraum  $\mathcal{H}$ , d.h.  $D_{\hat{A}} \subset \mathcal{H}$  ist eine dichte Teilmenge. Dies bedeutet, dass zu jedem Zustand  $|f\rangle \in \mathcal{H}$  und zu jedem  $\varepsilon > 0$  ein Zustand  $|g\rangle \in D_{\hat{A}}$  existiert, sodass  $\| |f\rangle - |g\rangle \| < \varepsilon$  gilt - kurz gesagt können wir also jeden Zustand beliebig genau approximieren. Man schreibt oft  $\hat{A} \supset \hat{B}$ , wenn  $D_{\hat{A}} \supset D_{\hat{B}}$  und  $\hat{A} = \hat{B}$  auf  $D_{\hat{B}}$  gilt. Der Operator  $\hat{A}$  mit dem größeren Definitionsbereich heißt dann **Erweiterung** von  $\hat{B}$ . Außerdem ist  $\hat{A} \supset \hat{A}$  der **Abschluss** von  $\hat{A}$ , der einer minimalen Erweiterung von  $\hat{A}$  entspricht.

#### Der hermitesch adjungierte Operator

Betrachten wir den hermitesch adjungierten Operator  $\hat{A}^\dagger$  zu einem linearer Operator  $\hat{A}$ . Anschaulich ist  $\hat{A}^\dagger$  so gewählt, dass

$$\langle \hat{A}^\dagger f | g \rangle = \langle f | \hat{A} g \rangle$$

für alle  $|f\rangle, |g\rangle \in D_{\hat{A}}$  gilt. Um genauer vorzugehen, betrachten wir einen beliebigen Ket-Vektor  $|f\rangle \in \mathcal{H}$ . Dann sei  $\langle f| \in \mathcal{H}'$  der zugehörige duale Bra-Vektor, also das assoziierte lineare stetige Funktional auf  $\mathcal{H}$ , d.h.  $\langle f|$  sei so, dass  $\langle f|(|b\rangle) = (|f\rangle, |b\rangle)$  für alle  $|b\rangle$  gilt. Man betrachte nun das lineare stetige Funktional

$$|g\rangle \mapsto \langle f|(\hat{A}|g\rangle) = \langle f|\hat{A}|g\rangle = \langle f|\hat{A}g\rangle$$

für alle  $|g\rangle \in \mathcal{H}$ . Dieses Funktional liegt wieder in  $\mathcal{H}'$ , also gibt es nach Riesz-Fréchet einen Ket-Vektor  $|h\rangle \in \mathcal{H}$  mit

$$\langle f|(\hat{A}|g\rangle) = (|h\rangle, |g\rangle) = \langle h|(|g\rangle) = \langle h|g\rangle$$

für  $|g\rangle \in \mathcal{H}$ . Dadurch erhalten wir eine lineare Zuordnung  $|f\rangle \mapsto |h\rangle$  im Dualraum  $\mathcal{H}'$ , und da  $\mathcal{H}'$  selbst ein Hilbertraum ist, definiert diese Zuordnung einen linearen Operator auf  $\mathcal{H}'$ , der ebenfalls als  $\hat{A} : \langle f| \mapsto \langle h|$  bezeichnet sei, d.h. es gilt

$$\langle f|\hat{A}|g\rangle = \langle h|g\rangle = (\langle f|\hat{A})|g\rangle .$$

Die zugehörige Zuordnung  $|f\rangle \mapsto |h\rangle$  von Ket-Vektoren in  $\mathcal{H}$  definiert dann einen linearen Operator  $\hat{A}^\dagger : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ , sodass  $|h\rangle = \hat{A}^\dagger|f\rangle = |\hat{A}^\dagger f\rangle$  gilt. Damit erhalten wir dann schließlich

$$\langle h|g\rangle = (\langle h|, |g\rangle) = (\langle \hat{A}^\dagger f|, |g\rangle) = \langle \hat{A}^\dagger f|g\rangle = \langle f|\hat{A}g\rangle .$$

Mit dieser Definition gilt dann:

- *Assoziativ-Gesetz:* Das Symbol  $\langle f|\hat{A}g\rangle$  kann entweder als  $\langle f|(\hat{A}g)\rangle = \langle f|\hat{A}g\rangle$  oder als  $(\langle f|\hat{A})|g\rangle = \langle \hat{A}^\dagger f|g\rangle$  aufgefasst werden.

- *Dualer Vektor:* Der zum Ket-Vektor  $\hat{A}|g\rangle$  duale Vektor ist  $\langle g|\hat{A}^\dagger$ , also folgt

$$\langle f|\hat{A}g\rangle = (\langle f|\hat{A})|g\rangle = \langle \hat{A}^\dagger f|g\rangle .$$

- *Komplexe Konjugation:* Es gilt  $(\langle f|\hat{A}g\rangle)^* = (\langle \hat{A}^\dagger f|g\rangle)^*$ , d.h. mit anderen Worten gilt

$$\langle \hat{A}g|f\rangle = \langle g|\hat{A}^\dagger f\rangle = (\langle g|\hat{A}^\dagger)|f\rangle ,$$

also folgt  $\langle \hat{A}g| = \langle g|\hat{A}^\dagger$  und für den Definitionsbereich des adjungierten Operators  $\hat{A}^\dagger$  gilt  $D_{\hat{A}^\dagger} \supset D_{\hat{A}}$ .

**Definition 18:** Ein linearer Operator heißt

- **hermitesch** wenn  $\hat{A}^\dagger \supset \hat{A}$  ist,
- **selbstadjungiert** wenn  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$  ist,
- **wesentlich selbstadjungiert** wenn  $\bar{A} = \hat{A}^\dagger$  ist.

In unendlichdimensionalen Hilberträumen sind lineare Operatoren entweder beschränkt oder unbeschränkt. Ein linearer Operator heißt  $\hat{A}$  **beschränkt**, wenn ein reelles  $C > 0$  existiert mit

$$\|\hat{A}|f\rangle\| \leq C\||f\rangle\| \quad \text{für alle } |f\rangle \in \mathcal{H}.$$

Man beachte, dass in endlichdimensionalen Hilberträumen folglich automatisch alle linearen Operatoren beschränkt sind. Ein beschränkter linearer Operator kann immer auf den ganzen Raum  $\mathcal{H}$  erweitert werden, während für einen unbeschränkten linearen Operator  $D_{\hat{A}} \neq \mathcal{H}$  gilt. Hieraus ergeben sich dann Probleme bei der Definition  $\hat{A} + \hat{B}$  oder  $\hat{A}\hat{B}$ .

### Eigenwerte und Eigenvektoren linearer Operatoren

**Definition 19:** Sei  $\hat{A}$  ein beliebiger linearer Operator. Die **Resolventenmenge** von  $\hat{A}$  ist durch

$$\rho(\hat{A}) := \{z \in \mathbb{C} : (\hat{A} - z\text{Id})^{-1} \text{ existiert als linearer beschränkter Operator}\}$$

definiert, weiter ist das **Spektrum** von  $\hat{A}$  erklärt durch

$$\sigma(\hat{A}) = \mathbb{C} \setminus \rho(\hat{A}) .$$

Im Allgemeinen besteht das Spektrum  $\sigma(\hat{A})$  aus einem **Punktspektrum**  $\sigma_p(\hat{A})$  und einem **kontinuierlichen Spektrum**  $\sigma_c(\hat{A})$ , also gilt  $\sigma(\hat{A}) = \sigma_p(\hat{A}) \cup \sigma_c(\hat{A})$ . Außerdem gilt

$$\sigma_p(\hat{A}) = \{z \in \mathbb{C} : \ker(\hat{A} - z \text{Id}) \neq 0\} \quad \text{mit} \quad \ker(\hat{A}) = \{|\psi\rangle \in \mathcal{H} : \hat{A}|\psi\rangle = 0\} .$$

Falls  $z \in \sigma_p(\hat{A})$  liegt, dann gibt es mindestens einen Vektor  $|z\rangle \in \mathcal{H}$ , sodass  $(\hat{A} - z \text{Id})|z\rangle = 0$  gilt, also  $\hat{A}|z\rangle = z|z\rangle$ . Folglich sind die Elemente des Punktspektrums die eigentlichen Eigenwerte des Operators. Für die Elemente  $\xi$  des kontinuierlichen Spektrums gibt es im Allgemeinen keine Vektoren  $|\xi\rangle \in \mathcal{H}$ , sodass  $\hat{A}|\xi\rangle = \xi|\xi\rangle$  gelten würde. Man lässt diese aber dennoch zu, d.h. man betrachtet auch die Eigenvektoren zu kontinuierlichen Spektren  $|\xi\rangle$ , sie sind aber im Allgemeinen nicht normierbar (vgl. etwa Orts- oder Impuls-Operator).

Für einen beschränkten Operator ist das kontinuierliche Spektrum  $\sigma_c(\hat{A})$  leer, sodass man nur ein reines Punktspektrum hat, welches gerade der Menge der Eigenwerte entspricht. Das Spektrum eines selbstadjungierten linearen Operators ist insbesondere reell, es besteht im Allgemeinen aus den diskret verteilten eigentlichen Eigenwerten und den kontinuierlichen Spektren.

**Bemerkung:** Zusammenfassend lässt sich also sagen, dass das Spektrum eines Operators alle möglichen Messergebnisse der assoziierten Observable angibt.

### Eigenschaften von Eigenwerten und -vektoren selbstadjungierter Operatoren

Nachdem wir die Eigenwerte in Punktspektrum und kontinuierliches Spektrum eingeordnet haben, betrachten wir nun, welche Eigenschaften Observablen-Operatoren haben:

- *Entartung:* Im Allgemeinen existieren zu einem Eigenwert  $a_k$  mehrere Eigenvektoren, d.h. bei einer  $s$ -fachen Entartung gilt  $\hat{A}|a_{k,r}\rangle = a_k|a_{k,r}\rangle$  für  $r = 1, \dots, s$ .
- *Erwartungswert:* Es gilt  $\langle \hat{A} \rangle_{a_k} = \langle a_{k,r} | \hat{A} | a_{k,r} \rangle = a_k \langle a_{k,r} | a_{k,r} \rangle = a_k$ .
- *Dispersion:*  $\overline{(\Delta A)^2} = \langle a_{k,r} | \hat{A}^2 | a_{k,r} \rangle - (\langle a_{k,r} | \hat{A} | a_{k,r} \rangle)^2 = a_k^2 - a_k^2 = 0$ .
- *Dispersionsfreiheit:* Ist für einen beliebigen Zustand  $|\psi\rangle$  die Observable  $A$  dispersionsfrei, also  $\overline{(\Delta A)^2} = 0$ , so ist  $|\psi\rangle$  einer der Eigenzustände von  $\hat{A}$ , denn mit dem Erwartungswert  $\alpha = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$  folgt

$$\begin{aligned} 0 &= \overline{(\Delta A)^2} = \langle \psi | (\hat{A} - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | (\hat{A} - \alpha)(\hat{A} - \alpha) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | (\hat{A}^\dagger - \alpha)(\hat{A} - \alpha) | \psi \rangle = \langle \psi | (\hat{A} - \alpha)^\dagger (\hat{A} - \alpha) | \psi \rangle = (x, x) = \|x\|^2 \end{aligned}$$

und dieser letzte Term entspricht der quadratischen Länge von  $x := (\hat{A} - \alpha)|\psi\rangle = 0$ , also ist  $|\psi\rangle$  ein Eigenvektor.

- *Orthogonalität:* Die Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten eines selbstadjungierten Operators stehen orthogonal zueinander. Seien etwa  $a_k$  und  $a_m$  verschiedene Eigenwerte von  $\hat{A}$ , dann gilt  $\hat{A}|a_k\rangle = a_k|a_k\rangle$  und  $\hat{A}|a_m\rangle = a_m|a_m\rangle$  und es folgt

$$\langle a_m | \hat{A} | a_k \rangle = a_k \langle a_m | a_k \rangle \quad \text{und} \quad \langle a_k | \hat{A} | a_m \rangle = a_m \langle a_k | a_m \rangle .$$

Bildet man das komplex konjugierte von  $\langle a_k | \hat{A} | a_m \rangle = a_m \langle a_k | a_m \rangle$ , so erhält man

$$\langle \hat{A} a_m | a_k \rangle = a_m^* \langle a_m | a_k \rangle = a_m \langle a_m | a_k \rangle$$

da die Eigenwerte selbstadjungierter Operatoren reell sind, also  $\langle a_m | \hat{A} | a_k \rangle = a_m \langle a_m | a_k \rangle$ . Subtrahiert man nun diese Gleichung von der ersten Eigenwertgleichung, so folgt daraus dann  $0 = (a_k - a_m) \langle a_m | a_k \rangle$  und damit die Orthogonalitätsrelation  $\langle a_m | a_k \rangle = 0$ .

- *Orthonormierung*: Sei  $a_k$  ein  $s$ -fach entarteter Eigenwert des selbstadjungierten Operators  $\hat{A}$ , dann existieren  $s$  Eigenvektoren  $|a_{k,r}\rangle$ , sodass  $\hat{A}|a_{k,r}\rangle = a_k|a_{k,r}\rangle$  für  $r = 1, \dots, s$  gilt. Im Allgemeinen sind diese Vektoren  $|a_{k,r}\rangle$  zu einem Eigenwert aber nicht orthogonal zueinander. Aber auch jede Linearkombination dieser Vektoren ist ein Eigenvektor von  $\hat{A}$  zum Eigenwert  $a_k$ , denn

$$\hat{A} \left( \sum_{r=1}^s \lambda_r |a_{k,r}\rangle \right) = \sum_{r=1}^s \lambda_r a_k |a_{k,r}\rangle = a_k \left( \sum_{r=1}^s \lambda_r |a_{k,r}\rangle \right) .$$

Die Eigenvektoren spannen also gleich einen ganzen linearen Unterraum auf. In diesem kann man nun durch Linearkombination orthogonal zueinander stehende Vektoren auswählen. Somit sind die Eigenvektoren eines selbstadjungierten Operators orthonormiert wählbar.

- *Vollständiges Orthonormalsystem*: Die Eigenvektoren eines jeden selbstadjungierten Operators  $\hat{A}$  bilden ein vollständiges Orthonormalsystem, also eine Basis des Hilbertraum  $\mathcal{H}$ . Somit kann jeder Vektor  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  dargestellt werden als

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |a_k\rangle \quad \text{bzw.} \quad |\psi\rangle = \sum_k c_k |a_k\rangle + \int d\xi c(\xi) |a(\xi)\rangle ,$$

wobei die kontinuierlichen Zustände  $|a(\xi)\rangle$  im Allgemeinen nicht normierbar sind. Die Orthonormiertheit ist durch die Bedingung  $\langle a_k | a_m \rangle = \delta_{km}$  und  $\langle a(\xi) | a(\xi') \rangle = \delta(\xi - \xi')$  gegeben.

### 13.1.3. Drittes Axiom: Messungen

Bei Messung der Observablen  $A$  an vielen identisch präparierten Systemen wird man im Allgemeinen jeweils verschiedene Messergebnisse erhalten. Damit der Begriff der Messung physikalisch sinnvoll ist, muss gelten, dass wenn man nach Messung von  $A$  mit Ergebnis  $a$  erneut  $A$  misst, man wieder den Wert  $a$  erhält. Demnach befindet sich das System nach der ersten Messung folglich im Eigenzustand  $|a\rangle$  von  $\hat{A}$ , dies gilt jedenfalls bei einer idealen Messung von  $A$ , deren Existenz vorausgesetzt werden muss.

**3. Axiom der Quantenmechanik:** *Ein System befinde sich zur Zeit  $t$  im reinen Zustand, der durch den Ket-Vektor  $|\psi_t\rangle$  beschrieben wird. Zu dieser Zeit  $t$  werde die Observablen  $A$  gemessen, dann gilt*

1. Die einzigen möglichen Messergebnisse sind die Eigenwerte von  $\hat{A}$ , d.h. die Werte des Spektrums  $\sigma(\hat{A})$ .
2. Befindet sich das System unmittelbar vor der Messung im Zustand  $|\psi\rangle$ , dann ist die Wahrscheinlichkeit, mit der das Ergebnis  $a_k \in \sigma_p(\hat{A})$  auftritt gleich

$$P^A(a_k) = |\langle a_k | \psi \rangle|^2 \xrightarrow{\text{Entartung}} \sum_{r=1}^s |\langle a_{k,r} | \psi \rangle|^2$$

bzw. mit der das Ergebnis  $a(\xi) \in \sigma_c(\hat{A})$  auftritt gleich

$$P^A(a(\xi)) = |\langle a(\xi) | \psi \rangle|^2 d\xi$$

für  $\xi \in [\xi, \xi + d\xi]$ . Man beachte, dass die Zeit  $t$  hier für die Zeit der Messung steht.

Man beachte, dass die beiden geforderten Eigenschaften physikalisch zu einer einzelnen dritten äquivalent sind:

3. Der Erwartungswert der Observablen, der als Mittelwert über viele Messergebnisse definiert ist, ist gleich  $\overline{A}^\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ , wobei hier alle Vektoren als normiert vorausgesetzt seien.

*Beweis.* Da  $\hat{A}$  ein selbstadjungierter Operator ist, bilden die Eigenvektoren  $|a_k\rangle$  eine Basis, d.h.

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |a_k\rangle \quad \text{mit} \quad \langle a_m | \psi \rangle = \sum_k c_k \langle a_m | a_k \rangle = c_m .$$

Außerdem gilt  $\langle \psi | = \sum_{k'} c_{k'}^* \langle a_{k'} |$ , sodass damit

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle &= \sum_{k'} c_{k'}^* \langle a_{k'} | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_{k,k'} c_{k'}^* c_k \langle a_{k'} | \hat{A} | a_k \rangle = \sum_{k,k} c_{k'}^* c_k a_k \langle a_{k'} | a_k \rangle \\ &= \sum_k c_k^* c_k a_k = \sum_k a_k |c_k|^2 = \sum_k a_k |\langle a_k | \psi \rangle|^2 = \overline{A} \end{aligned}$$

folgt. Damit erhalten wir dann folglich  $\overline{A}^\psi = \langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ . □

Da bei einer Messung der Observablen  $A$  mit dem Ergebnis  $a_k$  das System vom Zustand  $|\psi\rangle$  in den Eigenzustand  $|a_k\rangle$  übergeht - dies wird **Reduktion** bzw. **Kollaps der Wellenfunktion** genannt - bezeichnet man  $|\langle a_k | \psi \rangle|^2$  auch als **Übergangswahrscheinlichkeit**.

Dies hat eine wichtige formale Konsequenz. Sei dazu  $\hat{A}$  ein beliebiger selbstadjungierter Operator und  $|a_{k,r}\rangle$  seine Eigenvektoren. Für einen beliebigen Vektor  $|\psi\rangle$  gilt dann

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |a_k\rangle = \sum_k \langle a_k | \psi \rangle |a_k\rangle = \sum_k |a_k\rangle \langle a_k | \psi \rangle = \left( \sum_k |a_k\rangle \langle a_k| \right) |\psi\rangle .$$

Das Objekt  $\sum_k |a_k\rangle \langle a_k|$  ist ebenfalls ein Operator. Man setzt  $|a_m\rangle \langle a_m| =: \hat{P}_m$ , also

$$\hat{P}_m |\psi\rangle = |a_m\rangle \langle a_m | \psi \rangle = \langle a_m | \psi \rangle |a_m\rangle ,$$

dann folgt durch Summation  $\sum_k \hat{P}_k = \sum_k |a_k\rangle \langle a_k| = \text{Id}$ . Der Operator  $\hat{P}_k$  ist ein Projektionsoperator, denn es gilt

$$\hat{P}_k^2 = (|a_k\rangle \langle a_k|) (|a_k\rangle \langle a_k|) = |a_k\rangle \overbrace{\langle a_k | a_k \rangle}^1 \langle a_k| = |a_k\rangle \langle a_k| = \hat{P}_k ,$$

also projiziert  $\hat{P}_k$  auf den Eigenraum des Eigenwerts  $a_k$ . Somit erhält man zu jedem selbstadjungierten Operator  $\hat{A}$  eine Zerlegung der Identität in Projektionsoperator:

$$\text{Id} = \sum_k |a_k\rangle \langle a_k| \quad \implies \quad \hat{A} = \sum_k a_k \hat{P}_k = \sum_k a_k |a_k\rangle \langle a_k| .$$

Diese Zerlegung wird aus mathematischer Sicht durch den Spektralsatz sichergestellt.

### Gleichzeitige Messung mehrerer Observablen

Operativ ist die gleichzeitige Messung mehrerer Observablen so zu verstehen, dass das betrachtete System unmittelbar hintereinander (also keine echte Gleichzeitigkeit) in Wechselwirkung mit den zugehörigen Messvorrichtungen zu bringen ist. Man bezeichnet zwei Observablen  $A$  und  $B$  als gleichzeitig messbar (kompatibel), wenn man nach Messung von  $A$  mit Ergebnis  $a$  und Messung von  $B$  mit Ergebnis  $b$  bei einer unmittelbar darauf folgenden Messung von  $A$  erneut  $a$  erhält. Dies impliziert, dass die Messung von  $B$  nicht die für  $A$  wichtigen Informationen des Systems beeinflusst hat. Miteinander kompatible Observablen werden durch kommutierende Operatoren beschrieben:

$$A \text{ und } B \text{ kompatibel} \iff [\hat{A}, \hat{B}] = 0 .$$

Kommutieren zwei selbstadjungierte Operator  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  miteinander, dann haben sie auch gemeinsame Eigenvektoren bzw. genauer können die Eigenvektoren von so gewählt werden, dass sie gleichzeitige Eigenvektoren sind. Es gilt aber auch die Umkehrung: Haben  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  einen vollständigen Satz gemeinsamer Eigenvektoren, dann muss  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$  gelten.

*Beweis.* • „ $\Rightarrow$ “: Es gelte  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$  und mit  $|a_i\rangle$  seien die Eigenvektoren von  $\hat{A}$  mit  $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$  bezeichnet. Wir unterscheiden zwei Fälle:

1. Alle  $a_i$  seien nicht entartet. Dann gilt für  $\hat{B}|a_i\rangle$  die Gleichheit

$$\hat{A}(\hat{B}|a_i\rangle) = \hat{B}\hat{A}|a_i\rangle = a_i(\hat{B}|a_i\rangle) ,$$

d.h. auch  $\hat{B}|a_i\rangle$  ist ein Eigenvektor von  $\hat{A}$  und zwar zum selben Eigenwert  $a_i$ . Da  $a_i$  nicht entartet ist, muss  $\hat{B}|a_i\rangle = \lambda|a_i\rangle$  gelten, d.h.  $|a_i\rangle$  ist auch gleichzeitig ein Eigenvektor von  $\hat{B}$  zum Eigenwert  $\lambda_i$ . Dies gilt für alle  $|a_i\rangle$ , also erhalten wir einen vollständigen Satz von gemeinsamen Eigenvektoren, nämlich den  $|a_i\rangle =: |a_i, \lambda_i\rangle$  mit

$$\hat{A}|a_i, \lambda_i\rangle = a_i|a_i, \lambda_i\rangle \quad \text{und} \quad \hat{B}|a_i, \lambda_i\rangle = \lambda_i|a_i, \lambda_i\rangle .$$

2. Sei der Eigenwert  $a_k$  nun  $s$ -fach entartet, also  $\hat{A}|a_{k,r}\rangle = a_k|a_{k,r}\rangle$  für  $r = 1, \dots, s$ . Diese Eigenvektoren können wir als orthonormiert wählen und betrachten dann die Vektoren  $\hat{B}|a_{k,r}\rangle$ . Diese sind auch Eigenvektoren von  $\hat{A}$  zum Eigenwert  $a_k$ , denn analog zum ersten Fall hat man

$$\hat{A}(\hat{B}|a_{k,r}\rangle) = \hat{B}\hat{A}|a_{k,r}\rangle = a_k(\hat{B}|a_{k,r}\rangle)$$

Für ein festes  $t$  kann nun der Vektor  $\hat{B}|a_{k,t}\rangle$  als Linearkombination der  $|a_{k,r}\rangle$  geschrieben werden, also  $\hat{B}|a_{k,t}\rangle = \sum_{r=1}^s c_{rt}|a_{k,r}\rangle$ . Es folgt dann

$$\langle a_{k,r'}|\hat{B}|a_{k,t}\rangle = \sum_{r=1}^s c_{rt}\langle a_{k,r'}|a_{k,r}\rangle = c_{r't} \quad \implies \quad c_{rt} = \langle a_{k,r}|\hat{B}|a_{k,t}\rangle = c_{tr}^* .$$

Man betrachte nun die mittels  $c_{rt}$  gebildete  $s \times s$ -Matrix  $C := [c_{rt}]$ , diese ist hermitesch, da  $C = C^\dagger = (C^\dagger)^*$  gilt und damit diagonalisierbar. D.h. es existieren Eigenwerte  $\xi_\alpha$  für  $\alpha = 1, \dots, s$  und für die zugehörigen Eigenvektoren  $\vec{\gamma}^{(\alpha)}$  gilt  $C\vec{\gamma}^{(\alpha)} = \xi_\alpha\vec{\gamma}^{(\alpha)}$ , also gilt

$$\sum_{r=1}^s c_{rt}\gamma_r^{(\alpha)} = \xi_\alpha\gamma_r^{(\alpha)}$$

für alle  $r = 1, \dots, s$ . Man konstruiere mit Hilfe dieser  $s$  Eigenvektoren  $\vec{\gamma}^{(\alpha)}$  dann die Linearkombination

$$\sum_{r=1}^s \gamma_r^{(\alpha)} |a_{k,t}\rangle =: |a_{k,\alpha}\rangle ,$$

diese sind ebenfalls Eigenvektoren von  $\hat{A}$  zum Eigenwert  $a_k$ . Für diese spezielle Linearkombination gilt dann, dass sie zugleich auch Eigenvektoren von  $\hat{B}$  sind, denn es gilt

$$\begin{aligned} \hat{B}|a_{k,\alpha}\rangle &= \hat{B} \left( \sum_{t=1}^s \gamma_t^{(\alpha)} |a_{k,t}\rangle \right) = \sum_{t=1}^s \gamma_t^{(\alpha)} (\hat{B}|a_{k,t}\rangle) \\ &= \sum_{t=1}^s \gamma_t^{(\alpha)} \sum_{r=1}^s c_{rt} |a_{k,r}\rangle = \sum_{r=1}^s \left( \sum_{t=1}^s c_{rt} \gamma_t^{(\alpha)} \right) |a_{k,r}\rangle = \sum_{r=1}^s \xi_\alpha \gamma_r^{(\alpha)} |a_{k,r}\rangle \\ &= \xi_\alpha \sum_{r=1}^s \gamma_r^{(\alpha)} |a_{k,r}\rangle = \xi_\alpha |a_{k,\alpha}\rangle , \end{aligned}$$

d.h.  $|a_{k,\alpha}\rangle$  ist ein Eigenvektor der Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$ .

• „ $\Leftarrow$ “: Nun die Umkehrung, es existiere also ein vollständiger Satz von gemeinsamen Eigenvektoren  $|a_i, b_i\rangle$ . Dann gelten

$$\hat{A}\hat{B}|a_i, b_i\rangle = \hat{A}(b_i|a_i, b_i\rangle) = b_i a_i |a_i, b_i\rangle \quad \text{und} \quad \hat{B}\hat{A}|a_i, b_i\rangle = \hat{B}(a_i|a_i, b_i\rangle) = a_i b_i |a_i, b_i\rangle ,$$

also muss folglich  $(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|a_i, b_i\rangle = 0$  für alle  $|a_i, b_i\rangle$  sein, also folgt aufgrund der Vollständigkeit des Eigenvektorsatzes  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ . Daraus sehen wir außerdem, dass falls  $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$  ist, kein vollständiger Satz von gemeinsamen Eigenfunktionen existieren kann.  $\square$

**Bemerkung:** Man beachte, dass für jedes System ein maximales vollständiges System von kompatiblen Observablen  $\{\hat{A}, \hat{B}, \dots, \hat{V}\}$  existiert, d.h. auch ein maximaler Satz von miteinander kommutierenden Operatoren. Außerdem folgt, dass dann ein vollständiger Satz von gleichzeitigen Eigenwerten dieser Operatoren  $\{|a_i, b_j, c_k, \dots, v_s\rangle$  für alle  $a_i, b_j, \dots\}$  existiert. Wenn man das System in einem solchen Zustand  $|a_i, \dots, v_s\rangle$  präpariert, dann ist dies ein vollständig spezifizierter reiner Zustand.

#### 13.1.4. Viertes Axiom: Dynamik

Bisher haben wir alles zu einem festen Zeitpunkt  $t_0$  betrachtet. Da Physik die Wissenschaft der zeitlichen Beschreibung von Systemen ist, fragt man sich natürlich, wie sich Zustände und Observablen im Laufe der Zeit verändern.

**4. Axiom der Quantenmechanik:** Sei zur Zeit  $t_0$  der Systemzustand durch einen Ket-Vektor  $|\psi\rangle := |\psi(t_0)\rangle = |\psi, t_0\rangle := |\psi, t_0; t_0\rangle$  beschrieben. Das System sei im Weiteren sich selbst überlassen, es wird also keine Messung vorgenommen. Dann bestimmt  $|\psi, t_0\rangle$  eindeutig den Zustandsvektor  $|\psi, t_0; t\rangle := |\psi, t\rangle = |\psi(t)\rangle$  des Systems zu einem späteren Zeitpunkt  $t > t_0$ . D.h. es existiert eine eindeutige Zuordnung

$$|\psi, t_0; t_0\rangle \rightarrow |\psi, t_0; t\rangle ,$$

die wegen dem Superpositionsprinzip linear ist und daher durch einen linearen Operator  $\hat{U}(t, t_0)$  gemäß

$$|\psi, t_0; t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi, t_0; t_0\rangle \quad \text{für alle } t > t_0$$

beschrieben wird. Dieser Operator genügt dabei der Bestimmungsgleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0)$$

mit der Bedingung  $\hat{U}(t_0, t_0) = \text{Id}$ , wobei  $\hat{H}$  der (im allgemeinen zeitabhängige) Hamilton-Operator der Gesamtenergie ist.

Der **Zeitentwicklungsoperator**  $\hat{U}(t, t_0)$  erfüllt eine Reihe von Eigenschaften:

- $\hat{U}(t, t_0)$  für  $t$  fest ist linear. Insbesondere folgt für  $|\psi, t_0\rangle = \alpha_1|1, t_0\rangle + \alpha_2|2, t_0\rangle$  dann die Dynamik  $|\psi, t\rangle = \alpha_1|1, t\rangle + \alpha_2|2, t\rangle$ .
- Der Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}(t, t_0)$  ist für alle  $t$  unitär, denn die Gesamtenergie (also die Norm des Ket-Vektors) muss zeitlich erhalten bleiben, d.h. es muss  $\langle\psi, t|\psi, t\rangle = 1$  für alle  $t$  sein. Mit anderen muss also

$$\langle\psi(t_0)|\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi, t_0|\psi, t_0\rangle$$

für alle  $\psi$  gelten, und dies zur für Bedingung  $\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = \text{Id}$ , also ist  $\hat{U}$  unitär.

- Es gilt  $|\psi, t_1; t_2\rangle = \hat{U}(t_2, t_1)|\psi, t_0; t_1\rangle = \hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0)|\psi, t_0; t_0\rangle = \hat{U}(t_2, t_0)|\psi, t_0; t_0\rangle$ , also folgt die Zusammensetzungsregel  $\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0)$  für beliebige Zeiten  $t_2 > t_1 > t_0$ .

Es bleibt zu klären, wie die im vierten Axiom genannte Differentialgleichung für den Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}(t, t_0)$  entsteht. Dazu betrachte man einerseits

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t_0; t\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle = i\hbar \frac{1}{\delta t} (|\psi(t + \delta t)\rangle - |\psi, t\rangle) \\ &= i\hbar \frac{1}{\delta t} [\hat{U}(t + \delta t, t_0)|\psi, t_0\rangle - \hat{U}(t, t_0)|\psi, t_0\rangle] \\ &= i\hbar \frac{1}{\delta t} [\hat{U}(t + \delta t, t) - \text{Id}] \hat{U}(t, t_0)|\psi, t_0\rangle = i\hbar \frac{1}{\delta t} [\hat{U}(t + \delta t, t) - \text{Id}] |\psi, t_0; t\rangle, \end{aligned}$$

während andererseits aber auch

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) &= i\hbar \frac{1}{\delta t} [\hat{U}(t + \delta t, t_0) - \hat{U}(t, t_0)] = i\hbar \frac{1}{\delta t} [\hat{U}(t + \delta t, t) - \text{Id}] \hat{U}(t, t_0) \\ &= \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0) \iff \hat{H}(t) = \frac{i\hbar}{\delta t} [\hat{U}(t + \delta t, t) - \text{Id}] \end{aligned}$$

folgt. Wir wissen, dass  $\hat{H}(t)$  der Operator der Gesamtenergie ist, die bei abgeschlossenen Systemen erhalten bleibt, d.h. man hat  $\hat{H}(t) = \hat{H}$  zeitunabhängig. Zeitabhängigkeit des Hamilton-Operators findet man nur bei einer externen Kraftwirkung, jedoch nicht bei Messung. Wenn  $\hat{H}$  zeitlich konstant ist, so erhält man als Lösung von

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0)$$

mit  $\hat{U}(t_0, t_0) = \text{Id}$  den Zeitentwicklungsoperator

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot (t - t_0)\right),$$

was man direkt durch Einsetzen in die Differentialgleichung nachrechnet.

### Stationäre Zustände

Ein wichtiger Spezialfall sind abgeschlossene Systeme, die sich zur Zeit  $t_0$  in einem Eigenzustand des Energie-Operators  $\hat{H}$  befinden, beispielsweise

$$\hat{H}|\psi, t_0\rangle = E|\psi, t_0\rangle = E|E, t_0\rangle .$$

Dann ist die Zeitabhängigkeit des Zustands  $|\psi, t_0; t\rangle = |E, t\rangle$  durch

$$|E, t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|E, t_0\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H} \cdot (t - t_0)\right) |E, t_0\rangle$$

gegeben. Mit der Taylorentwicklung  $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H} \cdot (t - t_0)\right) = \exp(\hat{H}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{H}^n$ , durch welche die Exponentiation des Hamilton-Operators definiert ist, folgt

$$|E, t\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E(t - t_0)\right) |E, t_0\rangle ,$$

bei der Zeitentwicklung handelt es sich also um eine reine Phasentransformation. Man beachte dann weiter, dass

$$\begin{aligned} \hat{H}|E, t\rangle &= \hat{H} \left[ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E(t - t_0)\right) |E, t_0\rangle \right] = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E(t - t_0)\right) \hat{H}|E, t_0\rangle \\ &= E \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E(t - t_0)\right) |E, t_0\rangle = E|E, t\rangle \end{aligned}$$

gilt, d.h.  $|E, t\rangle$  ist ebenfalls ein Eigenzustand des Hamilton-Operators  $\hat{H}$  zum selben Energie-Eigenwert  $E$ , man wählt deshalb auch die Bezeichnung  $|E, t_0\rangle = |E, t\rangle = |E\rangle$ .

Es interessiert uns nun der Erwartungswert einer beliebigen nicht explizit zeitabhängigen Observablen  $A$  in einem stationären Zustand  $|E, t\rangle$ . Für diese gilt

$$\begin{aligned} \bar{A}^{|E, t\rangle} &= \langle E, t | \hat{A} | E, t \rangle = \left\langle E, t_0 \left| \exp\left(\frac{i}{\hbar}E(t - t_0)\right) \hat{A} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E(t - t_0)\right) \right| E, t_0 \right\rangle \\ &= \langle E, t_0 | \hat{A} | E, t_0 \rangle , \end{aligned}$$

die Mittelwerte aller Observablen sind also in einem **stationären Zustand**  $|E, t\rangle = |E\rangle$  zeitu-nabhängig, weshalb sich eben gerade diese Bezeichnung ergibt.

### Erhaltungsgrößen

Als nächstes betrachten wir einen beliebigen Zustand zur Zeit  $t$ , also  $|\psi, t_0; t\rangle = |\psi, t\rangle$ , und eine beliebige (im Allgemeinen sogar explizit zeitabhängige) Observable  $A = A(t)$ . Die zeitliche Änderung des Erwartungswertes von  $A$  ist dann

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \psi, t | \hat{A}(t) | \psi, t \rangle &= \frac{d\langle \psi, t |}{dt} \hat{A}(t) | \psi, t \rangle + \langle \psi, t | \frac{d\hat{A}(t)}{dt} | \psi, t \rangle + \langle \psi, t | \hat{A}(t) \frac{d|\psi, t\rangle}{dt} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi, t | [\hat{A}(t), \hat{H}(t)] | \psi, t \rangle + \left\langle \psi, t \left| \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} \right| \psi, t \right\rangle \\ \iff i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi, t | \hat{A}(t) | \psi, t \rangle &= \langle \psi, t | [\hat{A}(t), \hat{H}(t)] | \psi, t \rangle + \left\langle \psi, t \left| i\hbar \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} \right| \psi, t \right\rangle \end{aligned}$$

**Definition 20:** Die Observable  $A$  ist eine **Erhaltungsgröße** wenn ihr Erwartungswert in einem beliebigen Zustand zeitlich konstant ist. Für jede nicht explizit von  $t$  abhängige Observable  $A$ , also  $\frac{\partial}{\partial t}\hat{A} = 0$  ist  $A$  genau dann eine Erhaltungsgröße, wenn  $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$  gilt.

Man betrachte speziell den Fall, dass die Observable die Gesamtenergie ist, also  $\hat{A}(t) = \hat{H}(t)$ . Dann gilt

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi, t | \hat{H}(t) | \psi, t \rangle = \left\langle \psi, t \left| i\hbar \frac{\partial \hat{H}(t)}{\partial t} \right| \psi, t \right\rangle$$

und im Falle eines abgeschlossenen Systems, also bei  $\hat{H}$  zeitunabhängig, folgt dann durch

$$\frac{d}{dt} \langle \psi, t | \hat{H}(t) | \psi, t \rangle = 0$$

direkt aus dem Formalismus die Erhaltung des Gesamtenergie.

**Bemerkung:** • Wenn  $A, B, \dots$  mehrere Erhaltungsgröße sind und die zugehörigen Operatoren  $\hat{A}, \hat{B}, \dots$  paarweise alle miteinander kommutieren, dann kann man gemeinsame Eigenvektoren von  $\hat{H}$  und  $\hat{A}, \hat{B}, \dots$  in der Form  $|E_n, a_k, b_l, \dots\rangle$  konstruieren, die insbesondere stationär sind.

- Im Zusammenhang mit der klassischen Mechanik stellt man eine Beobachtung fest (vgl. Abschnitt 4.3 ab Seite 53): Für eine beliebige klassische Observable  $A = f(q, p)$  hatten wir

$$\frac{d}{dt} A = \{A, H\}_{\text{PB}} + \frac{\partial A}{\partial t}$$

gefunden, im direkten Vergleich mit der zeitlichen Ableitung des quantenmechanischen Erwartungswertes folgt also die Beziehung

$$\text{klassisch: } \{A, H\}_{\text{PB}} \quad \leftrightarrow \quad \text{quantenmechanisch: } \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] .$$

## 13.2. Darstellungen und Bilder der Zeitentwicklung

### 13.2.1. Verschiedene Darstellungen

Wir haben bereits mehrfach darauf hingewiesen, dass die Ket-Vektoren unseres Hilbertraums  $\mathcal{H}$  abstrakte Objekte sind, ebenso wie die Operatoren, die auf diesem Raum operieren. Es geht nun um die Darstellung dieser abstrakten Objekte, d.h. um eine Realisierung in Form von Vektoren der Zustände und Matrizen für die Operatoren. Eine solche Darstellung kann in mannigfaltiger Weise erfolgen, wie wir sehen werden.

Man wähle einen beliebigen selbstadjungierten Operator  $\hat{A}$  bzw. allgemein einen maximalen Satz von selbstadjungierten kommutierenden Operatoren  $\hat{A}, \hat{B}, \dots, \hat{V}$ . Außerdem sei durch die Eigenvektoren  $|a_k\rangle$  von  $\hat{A}$  eine Basis des Hilbertraums  $\mathcal{H}$  gewählt, im allgemeinen Fall verwendet man die gemeinsamen Eigenvektoren. Jeder Zustand  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  kann dann bezüglich dieser Basis als

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle = \sum_n |a_n\rangle \langle a_n | \psi \rangle$$

entwickelt werden, wobei die  $c_n$  die Linearfaktoren bezüglich der Basis  $|a_k\rangle$  sind. Jedem abstrakten Ket-Vektor  $|\psi\rangle$  ordnen wir dann den Spaltenvektor  $c := \psi^{\hat{A}}$  gemäß

$$|\psi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle a_1|\psi\rangle \\ \langle a_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi(a_1) \\ \psi(a_2) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1^{\hat{A}} \\ \psi_2^{\hat{A}} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \psi^{\hat{A}} =: c$$

zu, sowie analog dualisiert jedem Bra-Vektor  $\langle\psi|$  einen Zeilenvektor  $\psi^{\hat{A}\dagger} = c^\dagger$  durch

$$\langle\psi| \rightarrow (\langle\psi|a_1\rangle, \langle\psi|a_2\rangle, \dots) = (\psi_1^{\hat{A}\dagger}, \psi_2^{\hat{A}\dagger}, \dots) = (c_1^*, c_2^*, \dots) = \psi^{\hat{A}\dagger} =: c^\dagger.$$

Weiter ordne man jedem selbstadjungierten Observablen-Operator  $\hat{O}$  dann die Zahlenmatrix

$$\hat{O} \rightarrow \langle a_m|\hat{O}|a_n\rangle = O_{mn}^{\hat{A}} = (O^{\hat{A}}) \quad \text{also} \quad \hat{O} \rightarrow \begin{pmatrix} \langle a_1|\hat{O}|a_1\rangle & \langle a_1|\hat{O}|a_2\rangle & \dots \\ \langle a_2|\hat{O}|a_1\rangle & \langle a_2|\hat{O}|a_2\rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

zu, man beachte, dass  $O_{mn}^{\hat{A}\dagger} = O_{nm}^{\hat{A}}$  hermitesch ist, genauer  $(O_{mn}^{\hat{A}})^\dagger = (O_{nm}^{\hat{A}})^*$ . Diese Zuordnung ist physikalisch eindeutig<sup>1</sup> und definiert die **A-Darstellung** der Quantenmechanik des betrachteten Systems.

### Formalismus der Zuordnung

Zu jedem Operator  $\hat{A}$  gehört eine Zerlegung der Eins  $\mathbb{1} = \mathbb{1}^{\hat{A}} = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n|$  durch den kanonischen Projektionsoperator der Eigenvektoren dieses Operators. Damit folgt direkt

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \mathbb{1}^{\hat{A}}|\psi\rangle = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle,$$

wobei die Skalarprodukte  $c_n$  dann die Koeffizienten der A-Darstellung von  $|\psi\rangle$  liefern. Völlig analog gilt auch für die dualen Bra-Vektoren

$$\langle\psi| = \langle\psi| \mathbb{1}^{\hat{A}} = \sum_n \langle\psi|a_n\rangle\langle a_n| = \sum_n c_n^* \langle a_n|,$$

wo die Koeffizienten  $c_n^*$  entsprechend die A-Darstellung von  $\langle\psi|$  sind. Für Observablen-Operatoren gilt dann

$$\hat{O} = \mathbb{1}^{\hat{A}} \hat{O} \mathbb{1}^{\hat{A}} = \sum_{n,m} |a_m\rangle\langle a_m|\hat{O}|a_n\rangle\langle a_n| = \sum_{n,m} O_{mn}^{\hat{A}} |a_m\rangle\langle a_n|.$$

Inbesondere für den Fall  $\hat{A} = \hat{O}$  gilt dann

$$A_{nm}^{\hat{A}} = \langle a_m|\hat{A}|a_n\rangle = a_n \langle a_m|a_n\rangle = a_n \delta_{nm},$$

<sup>1</sup>Aus mathematischer Sicht muss wegen der unendlichen Dimension der Darstellungsraums genauer untersucht werden, ob tatsächlich eine Bijektion zwischen abstraktem Objekt und der Darstellung besteht.

wobei hier  $a_n \delta_{mn}$  keine Summe gemäß der Einsteinschen Konvention darstellt. Der Operator  $\hat{A}$  ist also in seiner eigenen  $A$ -Darstellung diagonal. Dasselbe gilt auch für alle mit  $\hat{A}$  kommutierenden Operatoren wegen der Existenz gemeinsamer Eigenvektoren. Man beachte, dass dann

$$\hat{A} = \mathbb{1}^{\hat{A}} \hat{A} \mathbb{1}^{\hat{A}} = \sum_{m,n} |a_m\rangle \langle a_m| \hat{A} |a_n\rangle \langle a_n| = \sum_n a_n |a_n\rangle \langle a_n| = \sum_n a_n \hat{P}_n^{\hat{A}}$$

gilt, dies ist die sogenannte **Spektraldarstellung** von  $\hat{A}$ . Aus mathematischer Sicht besitzt jeder selbstadjungierte Operator  $\hat{A}$  eine Spektralschar

$$\lambda \in \sigma(\hat{A}) \rightarrow \hat{P}^{\hat{A}}(\lambda) \quad \text{sodass} \quad \hat{A} = \int d\lambda \lambda \hat{P}^{\hat{A}}(\lambda)$$

gilt. Dies erlaubt eine rigorose Formulierung des dritten Axiom von Seite 182 in der Form

$$P^A(\lambda) d\lambda = |\hat{P}^{\hat{A}}(\lambda)|\psi\rangle|^2 d\lambda .$$

### Praktische Auswirkungen einer Darstellung

Zunächst mag man sich fragen, welchen Sinn verschiedene Darstellungen erfüllen, denn effektiv drücken sie nur dasselbe System auf verschiedene Weise aus. Berechnen wir den Erwartungswert eines beliebigen Operators  $\hat{O}$  in einem beliebigen Zustand  $|\psi\rangle$ , dann gilt

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle &= \langle \psi | \mathbb{1}^{\hat{A}} \hat{O} \mathbb{1}^{\hat{A}} | \psi \rangle = \sum_{n,m} \langle \psi | a_m \rangle \langle a_m | \hat{O} | a_n \rangle \langle a_n | \psi \rangle = \sum_{n,m} (\psi_m^{\hat{A}})^* O_{mn}^{\hat{A}} \psi_n^{\hat{A}} \\ &= \psi^{\hat{A}\dagger} (O^{\hat{A}}) \psi^{\hat{A}} . \end{aligned}$$

Alle algebraischen Operationen von Ket- und Bra-Vektoren und Operatoren resultieren in analogen Relationen der Darstellungsvektoren bzw. Matrizen, beispielsweise

$$\begin{aligned} \hat{O}|\psi\rangle &\rightarrow \sum_n O_{mn}^{\hat{A}} \psi_n^{\hat{A}} = (O^{\hat{A}})\psi^{\hat{A}} & \hat{O}\hat{S} &\rightarrow \sum_{n'} O_{mn'}^{\hat{A}} S_{n'n} = (O^{\hat{A}})(S^{\hat{A}}) \\ \langle \varphi | \psi \rangle &= \sum_n \varphi_n^{\hat{A}\dagger} \psi_n^{\hat{A}} = \varphi^{\hat{A}\dagger} \psi^{\hat{A}} . \end{aligned}$$

Jedes Problem der Quantenmechanik kann entweder im abstrakten Hilbertraum oder in einer geeignet gewählten Darstellung behandelt werden. Eine geeignete Darstellung zeichnet sich dadurch aus, dass in ihr das Problem besonders einfach erscheint.

Man beachte nun zwei solche Darstellungen zu zwei selbstadjungierten Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$ , sowie deren Eigenvektoren  $|a_n\rangle$  und  $|b_\nu\rangle$ , sodass also ein Zustandsvektor  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  bezüglich  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  als

$$\psi^{\hat{A}} = \begin{pmatrix} \langle a_1 | \psi \rangle \\ \langle a_2 | \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \psi^{\hat{B}} = \begin{pmatrix} \langle b_1 | \psi \rangle \\ \langle b_2 | \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

dargestellt werden kann. Analog erhalten wir für einen Operator  $\hat{O}$  die Darstellungen

$$\hat{O} \rightarrow O_{mn}^{\hat{A}} = \langle a_m | \hat{O} | a_n \rangle \quad \text{und} \quad \hat{O} \rightarrow O_{\mu\nu}^{\hat{B}} = \langle b_\mu | \hat{O} | b_\nu \rangle .$$

Der Zusammenhang zwischen zwei Darstellungen wird durch die Matrixelemente  $S_{n\nu} = \langle a_n | b_\nu \rangle$  für alle  $n, \nu$  vermittelt, denn es gilt

$$\psi_n^{\hat{A}} = \langle a_n | \psi \rangle = \sum_\nu \langle a_n | b_\nu \rangle \langle b_\nu | \psi \rangle = \sum_\nu S_{n\nu} \psi_\nu^{\hat{B}} = (S\psi^{\hat{B}})_n .$$

Analog gilt auch beim Darstellungswechsel für Operatoren

$$O_{mn}^{\hat{A}} = \langle a_m | \hat{O} | a_n \rangle = \sum_{\mu, \nu} \langle a_m | b_\mu \rangle \langle b_\mu | \hat{O} | b_\nu \rangle \langle b_\nu | a_n \rangle = \sum_{\mu, \nu} S_{m\mu} O_{\mu\nu}^{\hat{B}} S_{\nu n}^\dagger = (SO^{\hat{B}}S^\dagger)_{mn} ,$$

wobei die Wechselmatrix  $S$  wegen

$$\begin{aligned} (SS^\dagger)_{mn} &= \sum_{\nu'} S_{m\nu'} S_{\nu'n}^\dagger = \sum_{\nu'} S_{m\nu'} S_{\nu'n}^* = \sum_{\nu'} \langle a_m | b_{\nu'} \rangle \langle a_m | b_{\nu'} \rangle^* = \sum_{\nu'} \langle a_m | b_{\nu'} \rangle \langle b_{\nu'} | a_n \rangle \\ &= \langle a_m | a_n \rangle = \delta_{mn} \end{aligned}$$

unitär ist. Kurz gesagt ist also  $S$  die unitäre Basiswechselmatrix zweier Darstellungen. Falls die Indexmengen für  $m$  und  $\mu$  gleich sind, dann existiert außerdem ein unitärer Operator  $\hat{\rho}$ , sodass  $\rho_{mn}^{\hat{A}} = \langle a_m | \rho | a_n \rangle = S_{mn}$  mit  $\hat{\rho} = \sum_r |b_r\rangle \langle a_r|$  folgt.

Die physikalischen Größen (Skalarprodukte von Vektoren oder Matrixelemente) bleiben unter unitären Transformationen invariant, also insbesondere unter einem Darstellungswechsel. Im Falle eines Skalarprodukts wird dies explizit anhand von

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \psi \rangle &= \sum_n \langle \varphi | a_n \rangle \langle a_n | \psi \rangle = \sum_n \varphi_n^{\hat{A}\dagger} \psi_n^{\hat{A}} = \sum_n (S\varphi^{\hat{B}})_n^* (S\psi^{\hat{B}})_n \\ &= \sum_{n, \nu, \nu'} (S_{n\nu} \varphi_\nu^{\hat{B}})^* (S_{n\nu'} \psi_{\nu'}^{\hat{B}}) = \sum_{n, \nu, \nu'} S_{n\nu}^* S_{n\nu'} \varphi_\nu^{\hat{B}\dagger} \psi_{\nu'}^{\hat{B}} = \sum_{\nu, \nu'} \left( \sum_n S_{\nu n}^\dagger S_{n\nu'} \right) \varphi_\nu^{\hat{B}\dagger} \psi_{\nu'}^{\hat{B}} \\ &= \sum_\nu \varphi_\nu^{\hat{B}\dagger} \psi_\nu^{\hat{B}} \end{aligned}$$

deutlich, es gilt also  $\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_n \varphi_n^{\hat{A}\dagger} \psi_n^{\hat{A}} = \sum_\nu \varphi_\nu^{\hat{B}\dagger} \psi_\nu^{\hat{B}}$ . Analoges gilt natürlich auch für Matrixelemente  $\langle \varphi | \hat{O} | \psi \rangle$ .

### 13.2.2. Bilder der Zeitentwicklung

Ähnlich wie es mehrere Darstellungen von Zuständen und Operatoren gibt, kann man auch unterschiedliche Darstellungen der Zeitentwicklungen betrachten. Hinsichtlich der zeitlichen Entwicklung wurde bisher im sogenannten Schrödinger-Bild gearbeitet. Zustandsvektoren  $|\psi\rangle$  haben eine zeitliche Entwicklung gemäß  $|\psi, t_0; t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi, t_0; t_0\rangle$ , andererseits waren die Observablen durch zeitunabhängige Operatoren beschrieben. Messbar sind nur die Matrixelemente von Operatoren, im bisherigen Schrödinger-Bild waren dies

$$s\langle \psi, t | \hat{O}_S | \psi, t \rangle_S = s\langle \psi, t_0 | \hat{U}^\dagger(t) \hat{O}_S \hat{U}(t) | \psi, t_0 \rangle_S = s\langle \psi, t_0 | \hat{O}_H | \psi, t_0 \rangle_S .$$

Man setzt nun  $\hat{U}^\dagger(t) \hat{O}_S \hat{U}(t) =: \hat{O}_H$  und für die Zustände

$$|\psi, t\rangle_H := \hat{U}^\dagger(t) |\psi, t\rangle_S = \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) |\psi, t_0\rangle_S = |\psi, t_0\rangle_S ,$$

also gilt insbesondere  $|\psi, t\rangle_H = |\psi\rangle_H$ , die neuen Zustandsvektoren sind somit zeitunabhängig. Für den Erwartungswert gilt

$$s\langle \psi, t | \hat{O}_S | \psi, t \rangle_S = {}_H\langle \psi | \hat{O}_H | \psi \rangle_H .$$

Die neu definierten Zustände  $|\psi\rangle_H$  und Operatoren  $\hat{O}_H$  definieren das **Heisenbergbild**. Das Schrödinger- und Heisenberg-Bild unterscheiden sich dabei wie folgt voneinander:

- *Schrödinger-Bild*: Hier haben Zustands-Vektoren die Zeitentwicklung, welche durch die Schrödinger-Gleichung für die  $|\psi, t\rangle_S$  gegeben ist. Observablen-Operatoren haben dagegen im Allgemeinen keine Zeitentwicklung.
- *Heisenberg-Bild*: Hier haben umgekehrt die Zustände keine Zeitentwicklung, dafür aber die Heisenberg-Operatoren  $\hat{O}_H(t)$  durch die Schrödinger-Gleichung für Heisenberg-Operatoren, die wir im Folgenden herleiten.

Im Wesentlichen ergibt sich die Bestimmungsgleichung der Dynamik von Heisenberg-Operatoren durch die Ableitung der Definition und Verwendung der Schrödinger-Gleichung, also

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) &= i\hbar \frac{d}{dt} \left( \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}_S(t) \hat{U}(t) \right) = i\hbar \frac{d\hat{U}^\dagger}{dt} \hat{A}_S \hat{U} + i\hbar \hat{U}^\dagger \hat{A}_S \frac{d\hat{U}}{dt} + i\hbar \hat{U}^\dagger \frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t} \hat{U} \\
 &= -\hat{U}^\dagger \hat{H}_S \hat{A}_S \hat{U} + \hat{U}^\dagger \hat{A}_S \hat{H}_S \hat{U} + \hat{U}^\dagger \left( i\hbar \frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t} \right) \hat{U} \\
 &= -\hat{U}^\dagger \hat{H}_S \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{A}_S \hat{U} + \hat{U}^\dagger \hat{A}_S \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{H}_S \hat{U} + \hat{U}^\dagger \left( i\hbar \frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t} \right) \hat{U} \\
 &= [\hat{A}_H, \hat{H}_H] + \hat{U}^\dagger \left( i\hbar \frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t} \right) \hat{U} \\
 \iff i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) &= [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t)] + i\hbar \left( \frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t} \right)_H .
 \end{aligned}$$

Man beachte, dass für ein abgeschlossenes System insbesondere

$$\hat{H}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{H}_S(t) \hat{U}(t) \stackrel{\text{abg.}}{=} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \hat{H}_S \cdot (t - t_0)\right) \hat{H}_S \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_S \cdot (t - t_0)\right) = \hat{H}_S$$

folgt, was man alternativ auch durch  $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{H}_H = [\hat{H}_H, \hat{H}_H] = 0$  hätte herleiten können. Außerdem hat man noch die Übereinstimmung

$$\hat{A}_H(t = t_0) = \hat{U}^\dagger(t_0, t_0) \hat{A}_S \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{A}_S \quad \text{und} \quad |\psi, t_0\rangle_S = |\psi\rangle_H ,$$

d.h. zum Zeitpunkt  $t = t_0$  fallen Schrödinger- und Heisenberg-Bild zusammen.

### Eigenvektoren in unterschiedlichen Bildern der Zeitentwicklung

Eine wichtige Frage ist, wie sich die Eigenvektoren der Operatoren in den verschiedenen Bildern der Zeitentwicklung verhalten. Dazu betrachte man die Eigenvektoren eines beliebigen Operators  $\hat{A}$ , wobei im Schrödinger-Bild

$$\hat{A}_S |a_k\rangle_S = a_k |a_k\rangle_S$$

gilt, und da der Schrödinger-Operator  $\hat{A}_S$  zeitunabhängig ist, muss dies auch für die Eigenwerte  $a_k$  und Eigenvektoren  $|a_k\rangle_S$  gelten. Wird auf diese Gleichung beidseitig links der Operator  $\hat{U}^\dagger(t)$  angewandt, so folgt

$$\begin{aligned}
 \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}_S |a_k\rangle_S &= \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}_S \hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t) |a_k\rangle_S = a_k \hat{U}^\dagger(t) |a_k\rangle_S \\
 \iff \hat{A}_H(t) |a_k, t\rangle_H &= a_k |a_k, t\rangle_H ,
 \end{aligned}$$

dies ist für jedes  $t$  die Eigenwertgleichung für den Heisenberg-Operator  $\hat{A}_H(t)$ . Die Eigenvektoren des Heisenberg-Bilds haben wegen

$$|a_k, t\rangle_H = \hat{U}^\dagger(t, t_0)|a_k\rangle_S = \hat{U}^\dagger(t, t_0)|a_k, t_0\rangle_H$$

folglich eine inverse Zeitentwicklung. Zum Verständnis dieser Feststellung betrachte man die Entwicklungskoeffizienten eines beliebigen Zustandsvektors in beiden Bildern. Im Schrödinger-Bild gilt  $c_k^S(t) = {}_S\langle a_k|\psi, t\rangle_S$ , während sich im Heisenberg-Bild

$$|\psi\rangle_H = \sum_k |a_k, t\rangle_{HH} \langle a_k, t|\psi\rangle_H = \sum_k \underbrace{{}_H\langle a_k, t|\psi\rangle_H}_{c_k^H(t)} |a_k, t\rangle_H$$

findet. Es gilt dann

$$c_k^S(t) = {}_S\langle a_k|\psi, t\rangle_S = {}_S\langle a_k|\hat{U}(t, t_0)|\psi, t_0\rangle_S = {}_H\langle a_k, t|\psi\rangle_H = c_k^H(t) .$$

**Beispiel:** Das System befindet sich zur Zeit  $t_0$  im Eigenzustand  $|a_k\rangle_S$  des Operators  $\hat{A}_S$ . Man fragt sich, wie groß die Wahrscheinlichkeitsamplitude ist, dass sich das System zur Zeit  $t > t_0$  im Eigenzustand  $|b_l\rangle$  von  $\hat{B}$  befindet. In den beiden Bildern gilt dann

$${}_S\langle b_l|\hat{U}(t, t_0)|a_k\rangle_S \quad \text{bzw.} \quad {}_H\langle b_l, t|a_k, t_0\rangle_H$$

was gleich sein muss.

Ein weiteres wichtiges Bild der Zeitentwicklung ist das sogenannte Wechselwirkungsbild. Unter der Annahme, dass eine geringe äußere Störung vorliegt, zerlegt man dann den Hamilton-Operator in  $\hat{H} = \hat{H}_0 + V$ . Darauf gehen wir in Kapitel 18 näher ein.

### 13.2.3. Beispiele für Darstellungen und Bilder

#### Schrödinger-Bild und Orts-Darstellung

Zuerst betrachten wir die bisher verwendete Orts-Darstellung der Zustände im Schrödinger-Bild,

$$|\psi, t\rangle_S \rightarrow \begin{pmatrix} \langle \vec{r}_1|\psi, t\rangle \\ \langle \vec{r}_2|\psi, t\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \psi^{\hat{X}}(\vec{r}, t) \quad \text{wobei} \quad \hat{X}|\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle$$

gilt. Es bezeichnet nun  $\langle \vec{r}|\psi, t\rangle$  die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, das Teilchen am Ort  $\vec{r}$  im Zustand  $|\psi\rangle$  zu finden, dies ist die Einteilchen-Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t) = {}_S\langle \vec{r}|\psi, t\rangle_S = \psi^{\hat{X}}(\vec{r}, t)$ .

Der Einfachheit wegen betrachten wir nur den eindimensionalen Fall mit  $\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle$  für alle  $x \in \mathbb{R}$ . Für den Orts- und Impuls-Operator in der Orts-Darstellung gilt

$$X_{xx'}^{\hat{X}} = \langle x|\hat{X}|x'\rangle = x'\langle x|x'\rangle = x'\delta(x-x') = x\delta(x-x') \quad \text{und} \quad P_{xx'}^{\hat{X}} = \langle x|\hat{P}|x'\rangle .$$

Um das Skalarprodukt der  $X$ -Darstellung von  $\hat{P}$  auszuwerten, verwenden wir die Vertauschungsrelation  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$  und  $\frac{d}{dx}\delta(x) = -\frac{1}{x}\delta(x)$ , sodass dann

$$\begin{aligned} \langle x|[\hat{X}, \hat{P}]|x'\rangle &= \langle x|\hat{X}\hat{P}|x'\rangle - \langle x|\hat{P}\hat{X}|x'\rangle = (x-x')\langle x|\hat{P}|x'\rangle \\ &= \langle x|i\hbar|x'\rangle = i\hbar\langle x|x'\rangle = i\hbar\delta(x-x') \\ \iff \langle x|\hat{P}|x'\rangle &= i\hbar\frac{1}{x-x'}\delta(x-x') = -i\hbar\frac{d}{dx}\delta(x-x') = i\hbar\frac{d}{dx'}\delta(x-x') \end{aligned}$$

als Darstellung erhält. Für den Erwartungswert des Impulses in einem beliebigen Zustand  $|\psi\rangle$  findet man nun

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{P}|\psi\rangle &= \int dx' \int dx'' \langle\psi|x'\rangle \langle x'|\hat{P}|x''\rangle \langle x''|\psi\rangle \\ &= \int dx' \int dx'' \psi^*(x') \left( i\hbar \frac{d}{dx''} \delta(x' - x'') \psi(x'') \right) \\ &\stackrel{\text{P.I.}}{=} \int dx' \int dx'' \psi^*(x') \delta(x' - x'') \left( -i\hbar \frac{d}{dx''} \psi(x'') \right) \\ &= \int dx'' \psi^*(x'') \left( -i\hbar \frac{d}{dx''} \psi(x'') \right) \\ &= \int dx \psi^*(x) \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) . \end{aligned}$$

### Orts-Darstellung der Impuls-Eigenvektoren

Betrachten wir Impuls-Eigenvektoren  $\hat{P}|p\rangle = p|p\rangle$  mit der Normierung  $\langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$ , gesucht ist die Ortsdarstellung  $\langle x|p\rangle$ . Es folgt

$$\begin{aligned} p\langle x|p\rangle &= \langle x|\hat{P}|p\rangle = \int dx' \langle x|\hat{P}|x'\rangle \langle x'|p\rangle = \int dx' \delta(x-x') \left( -i\hbar \frac{d}{dx'} \langle x'|p\rangle \right) \\ &\iff -i\hbar \frac{d}{dx} \langle x|p\rangle - p\langle x|p\rangle = 0 , \end{aligned}$$

hierbei handelt es sich um eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung für  $\langle x|p\rangle$ . Durch Einsetzen zeigt man dann, dass  $\langle x|p\rangle = C \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)$  eine Lösung ist. Die Konstante  $C$  ergibt sich dann aus

$$\begin{aligned} \langle p|p'\rangle &= \delta(p-p') = \int dx \langle p|x\rangle \langle x|p'\rangle = |C|^2 \int dx \exp\left(-i\frac{(p-p')x}{\hbar}\right) \\ &= |C|^2 \hbar \int dy e^{-i(p-p')y} = |C|^2 2\pi\hbar \delta(p-p') , \end{aligned}$$

also folgt  $|C|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$  also erhalten wir als Orts-Darstellung der Impuls-Eigenzustände

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) .$$

### Schrödinger-Bild und Impuls-Darstellung

Es sei wieder  $\hat{P}|p\rangle = p|p\rangle$  mit  $\langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$ , wir betrachten dann die Impuls-Darstellung eines Zustands  $|\psi\rangle$  durch

$$|\psi\rangle \rightarrow \langle p|\psi, t\rangle = \psi^{\hat{P}}(p, t) = \tilde{\psi}(p, t)$$

für alle  $p \in \mathbb{R}$ . Für die Impuls-Darstellung des Impuls-Operators  $\hat{P}$  gilt  $\langle p|\hat{P}|p'\rangle = p'\delta(p-p')$  und für den Erwartungswert von  $\hat{P}$  in einem beliebigen Zustand  $|\psi\rangle$  ist

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{P}|\psi\rangle &= \int dp' \int dp'' \langle\psi|p''\rangle \langle p''|\hat{P}|p'\rangle \langle p'|\psi\rangle \\ &= \int dp' \int dp'' \tilde{\psi}^*(p'') p' \delta(p'' - p') \tilde{\psi}(p') = \int dp' \tilde{\psi}^*(p') p' \tilde{\psi}(p') = \int dp p |\tilde{\psi}(p)|^2 . \end{aligned}$$

Die Transformation zwischen  $X$ - und  $P$ -Darstellung ist durch die Basiswechselmatrix

$$S_{xp} = \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i\hbar x}{\hbar}\right)$$

gegeben, welche den Wechsel liefert zwischen den beiden Zuständen

$$\psi(x) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \tilde{\psi}(p) \quad \text{und} \quad \tilde{\psi}(p) = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \psi(x) .$$

## 13.3. Quantisierung und die Unbestimmtheitsrelation

### 13.3.1. Quantisierung von Systemen

Bisher haben wir immer irgendwelche beliebigen quantenmechanischen Systeme angenommen und dann ihre Eigenschaften betrachtet. Es stellt sich aber die Frage, wie man überhaupt konkret die Quantisierung eines klassischen Systems vornimmt. Der erste Schritt besteht in der Ermittlung der Operatoren  $\hat{A}, \hat{B}, \dots$  zu den verschiedenen Observablen  $A, B, \dots$ . Dabei genügt es die Vertauschungsrelationen, also die Kommutatoren, zwischen diesen Operatoren zu kennen, da diese die physikalischen Beziehungen bestimmen. In der Quantenmechanik von endlich vielen Freiheitsgraden ist die Darstellung der Vertauschungsrelationen bis auf unitäre Transformationen eindeutig - erst in der Quantenfeldtheorie ändert sich dies.

Der Begriff **Quantisierung** bezeichnet also die Ermittlung von Observablen-Operatoren, was mit der Ermittlung der Vertauschungsrelationen gleichzusetzen ist. Eine interessante Beobachtung lässt sich beim Vergleich klassischer Poisson-Klammern (vgl. Abschnitt 4.3) und den quantenmechanischen Kommutatoren tätigen:

$$\begin{array}{ll} \text{Klassisch:} & \{x_i, x_j\}_{\text{PB}} = 0 \quad \{p_i, p_j\}_{\text{PB}} = 0 \quad \{x_i, p_j\}_{\text{PB}} = \delta_{ij} \quad \{L_i, L_j\}_{\text{PB}} = \epsilon_{ijk} L_k \\ \text{QM:} & [\hat{X}_i, \hat{X}_j] = 0 \quad [\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0 \quad [\hat{X}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad [\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk} L_k \end{array}$$

Bis auf einen rein imaginären Vorfaktor  $i\hbar$  stimmen also quantenmechanische und klassische Vertauschungsrelationen überein. Daraus lässt sich somit eine Vorschrift zur Bestimmung der Vertauschungsrelationen von Observablen-Operatoren ableiten. Man berechnet die Poisson-Klammer für die Observablen der klassischen Mechanik, welche dann die quantenmechanischen Vertauschungsrelationen durch

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar\{\hat{A}, \hat{B}\}_{\text{PB}}$$

bestimmen. Allerdings liefert uns dies nicht die gesamte denkbare Quantenmechanik. Für Observablen, die nur im Rahmen der Quantenmechanik auftreten - beispielsweise der Spin - müssen diese Vertauschungsrelationen mit Hilfe von Symmetrieüberlegungen oder rein intuitiv bestimmt werden. Für jede Observable, die ein klassisches Analogon  $A = f_A(x_1, \dots, p_N)$  besitzt, ist

$$f_A \rightarrow \hat{f}_A = f_A(\hat{X}_1, \dots, \hat{P}_N)$$

die kanonisch quantisierte Observable. Dabei beachte man aber folgende Tatsachen:

- Es sind immer kartesische Koordinaten für das klassische System zu wählen.<sup>2</sup>

<sup>2</sup>Die Tatsache, dass eine konsistente Quantisierung in allgemeinen krummlinigen Koordinaten bisher noch gelungen ist, stellt einen der Hauptgründe für das Fehlen einer Quantentheorie der Gravitation dar, denn sonst könnte man Einsteins allgemeine Relativitätstheorie mit relativ geringem Aufwand quantisieren.

- Bei Produkte von nicht miteinander kommutierenden Größen wählt man das symmetrische Produkt der Operatoren, also beispielsweise

$$x^2p \rightarrow \hat{X}\hat{P}\hat{X} \quad \text{oder} \quad x^2p \rightarrow \frac{1}{3} \left( \hat{X}^2\hat{P} + \hat{P}\hat{X}^2 + \hat{X}\hat{P}\hat{X} \right),$$

wobei sich bei letztem Beispiel die zusätzlichen Terme aufgrund der Selbstadjungiertheit ergeben, denn  $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A} \neq \hat{A}\hat{B}$  ist nicht selbstadjungiert, aber  $\frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})$  schon.

### 13.3.2. Heisenbergsche Unschärferelation

Die Inkompatibilität zweier Observablen-Operatoren hat noch weitere tiefgreifende Auswirkungen. Man betrachte zwei nicht kompatible Observablen  $\hat{A}, \hat{B}$ , also  $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ . Sei dann  $|\psi\rangle$  ein beliebiger Zustandsvektor und definiere damit

$$\widehat{\Delta A} := \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle = \hat{A} - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad \text{und} \quad \widehat{\Delta B} := \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle,$$

wobei die beiden Operatoren  $\widehat{\Delta A}$  und  $\widehat{\Delta B}$  selbstadjungiert sind. Mit den beiden Abkürzungen  $|\alpha\rangle := \widehat{\Delta A}|\psi\rangle$  und  $|\beta\rangle := \widehat{\Delta B}|\psi\rangle$  gilt dann

$$\begin{aligned} (\Delta A)^2 &= \langle \psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \widehat{\Delta A}^2 \rangle_\psi = \langle \psi | \widehat{\Delta A} \widehat{\Delta A} | \psi \rangle = \langle \alpha | \alpha \rangle \\ &\iff (\Delta A)^2 (\Delta B)^2 = \langle \psi | \widehat{\Delta A} \widehat{\Delta A} | \psi \rangle \langle \psi | \widehat{\Delta B} \widehat{\Delta B} | \psi \rangle = \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle. \end{aligned}$$

Nach der Schwarzschen Ungleichung ist  $\|\alpha\| \cdot \|\beta\| = \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2$ , also erhalten wir die Abschätzung

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 = |\langle \psi | \widehat{\Delta A} \widehat{\Delta B} | \psi \rangle|^2,$$

wobei wir das Operatorprodukt  $\widehat{\Delta A} \widehat{\Delta B}$  in

$$\begin{aligned} \widehat{\Delta A} \widehat{\Delta B} &= \frac{1}{2} \underbrace{[\widehat{\Delta A}, \widehat{\Delta B}]}_{\text{antihermitesch}} + \frac{1}{2} \underbrace{\{\widehat{\Delta A}, \widehat{\Delta B}\}}_{\text{hermitesch}} = \frac{1}{2} (\widehat{\Delta A} \widehat{\Delta B} - \widehat{\Delta B} \widehat{\Delta A}) + \frac{1}{2} (\widehat{\Delta A} \widehat{\Delta B} + \widehat{\Delta B} \widehat{\Delta A}) \\ &= \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2} \{\widehat{\Delta A}, \widehat{\Delta B}\} \end{aligned}$$

umschreiben können. Einsetzen dieses Ergebnisses in die vorige Ungleichung liefert dann weiter

$$\begin{aligned} |\langle \psi | \widehat{\Delta A} \widehat{\Delta B} | \psi \rangle|^2 &= \left| \frac{1}{2} \underbrace{\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\psi}_{\text{rein imaginär}} + \frac{1}{2} \underbrace{\langle \{\widehat{\Delta A}, \widehat{\Delta B}\} \rangle_\psi}_{\text{rein reell}} \right|^2 = \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\psi|^2 + \frac{1}{4} \langle \{\widehat{\Delta A}, \widehat{\Delta B}\} \rangle_\psi^2 \\ &\geq \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle_\psi|^2 \end{aligned}$$

und daraus erhalten wir schließlich die **Heisenbergsche Unschärferelation**

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|. \quad (13.1)$$

**Beispiel:** Es sei  $\hat{A} = \hat{X}_i$  und  $\hat{B} = \hat{P}_j$ , dann folgt für den Kommutator  $[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{X}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij}$  und damit  $\langle [\hat{X}_i, \hat{P}_j] \rangle = i\hbar\delta_{ij}$ . Dann ist

$$\Delta X_i \cdot \Delta P_j \geq \frac{1}{2} |i\hbar\delta_{ij}| = \frac{\hbar}{2} \delta_{ij}$$

die Unbestimmtheitsrelation zwischen den Orts- und Impulskomponenten, die wir bereits bei der Wellenpaket-Betrachtung auf Seite 170 erhalten haben.

### Energie-Zeit-Unschärfe

Betrachten wir nun ein abgeschlossenes System, sodass  $\hat{H} = \hat{H}_S$  zeitlich invariant ist, eine beliebige nicht zeitabhängige Observable  $A$  und einen beliebigen Zustand  $|\psi\rangle$  des Systems. Es gilt dann allgemein

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi, t | \hat{A} | \psi, t \rangle = \langle \psi, t | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi, t \rangle$$

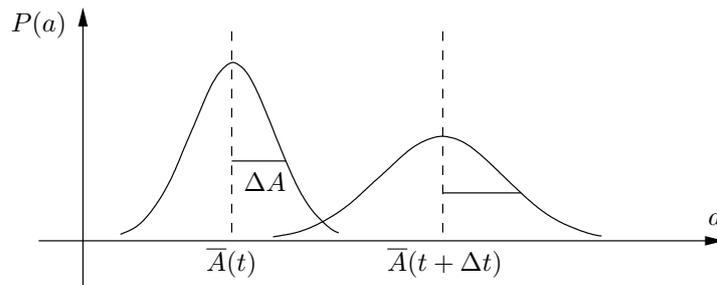
wie wir bereits wissen, andererseits aber auch

$$\Delta A \cdot \Delta H \geq \frac{1}{2} |\langle \psi, t | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi, t \rangle| = \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d}{dt} \langle \psi, t | \hat{A} | \psi, t \rangle \right|.$$

Dabei ist  $\frac{d}{dt} \langle \psi, t | \hat{A} | \psi, t \rangle$  die Geschwindigkeit, mit der sich der Erwartungswert von  $\hat{A}$  im Zustand  $|\psi\rangle$  mit der Zeit ändert. Für ein beliebig kurzes Zeitintervall  $\Delta t$  ist deshalb

$$\Delta t \cdot \frac{d}{dt} \langle \psi, t | \hat{A} | \psi, t \rangle$$

das „Wegstück“, um welches sich der Erwartungswert  $\langle A(t) \rangle_\psi$  im Lauf des Intervalls  $\Delta t$  verschiebt.



Das charakteristische Zeitintervall, welches verstreichen muss, damit sich der Mittelwert von  $A$  um mindestens  $\Delta A$  verändert, ist durch

$$\Delta t(A) = \frac{\Delta A}{\left| \frac{d}{dt} \langle \psi, t | \hat{A} | \psi, t \rangle \right|}$$

gegeben. Für  $\Delta t(A)$  ist  $\Delta s = \Delta t \cdot \left| \frac{d}{dt} \langle \psi, t | \hat{A} | \psi, t \rangle \right| \geq \Delta A$ , also ist  $\Delta t(A)$  das Zeitintervall, in dem sich  $\bar{A}$  signifikant ändert, also jenes Zeitintervall, welches die Zeitentwicklung des Systems (manifestiert anhand der Observablen  $A$ ) charakterisiert:

$$\frac{\Delta A \cdot \Delta H}{\left| \frac{d}{dt} \langle \psi, t | \hat{A} | \psi, t \rangle \right|} \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Longrightarrow \quad \Delta t(A) \cdot \Delta H \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Setzen wir dann weiter  $\Delta t := \min_A t(A)$ , dann lässt sich die obige Gleichung kurz als

$$\Delta t \cdot \Delta H \geq \frac{\hbar}{2}$$

formulieren. Dies verknüpft die Energieunbestimmtheit mit der typischen zeitlichen Änderungsrate des Zustands, wobei  $\Delta t$  das charakterisierende Zeitintervall der zeitlichen Entwicklung des betrachteten Systems ist. Im Extremfall, dass  $A$  eine Erhaltungsgröße ist, gilt folglich  $\frac{d}{dt} \langle \psi, t | \hat{A} | \psi, t \rangle = 0$ , und damit  $\Delta t(A) = \infty$ . Auch bei einem stationären Zustand gilt  $\Delta t = \infty$ , da  $\Delta H = 0$  ist.

**Bemerkung:** Auch wenn sich die Energieunbestimmtheit mit der typischen Änderungsrate in einer zur allgemeinen Unbestimmtheitsrelation (13.1) sehr ähnlichen Form darstellen lässt, bestehen doch große Unterschiede. Der wichtigste Tatsache dabei ist, dass die Zeit keine Observable des Systems ist, sondern wir in der Quantenmechanik von der Existenz einer Newtonschen Universalzeit ausgehen.<sup>3</sup>

### 13.4. Verallgemeinerung auf gemischte Zustände

Jedes System besitzt einen maximalen Satz von kompatiblen Observablen. Wenn die Werte aller dieser Observablen gleichzeitig fixiert sind, dann befindet sich das System in einem reinen Zustand  $|a_k, b_l, \dots, v_t\rangle$ , der durch einen Ket-Vektor beschrieben ist. Dann ist der Zustand des Systems maximal möglich spezifiziert und alle Erwartungswerte und Wahrscheinlichkeiten sind mittels  $|\psi\rangle$  ausdrückbar. Operativ wird der quantenmechanische Erwartungswert dabei durch Mittelung über die Messergebnisse einer großen Anzahl identisch präparierter Systeme im Zustand  $|\psi\rangle$  definiert, d.h. man kann sich den Zustand durch ein ganzes Ensemble von Systemen repräsentiert vorstellen. Oft ist aber der Zustand eines Systems nicht vollständig spezifiziert.

**Beispiel:** Betrachte ein Photon mit gegebenem Impuls aber unbestimmter Polarisation. Eine solche Situation entsteht wie folgt: Zwei Quellen  $Q_1$  und  $Q_2$  (oder auch beliebig viele mehr) emittieren stochastisch Photonen mit der Polarisation  $|\Phi_1\rangle$  bzw.  $|\Phi_2\rangle$ , jeweils mit der Quellstärke  $np_1$  bzw.  $np_2$ , wobei  $n$  groß und  $p_1 + p_2 = 1$  sei. Die emittierten Photonen werden dann in einem Punkt gebündelt und bewegen sich in einem Strahl weiter. Dann kennt man aber den Polarisationszustand eines beliebig herausgegriffenen Photons nicht mehr.

Ein solches Photon wie im Beispiel befindet sich in einem gemischten Zustand, der durch ein gedachtes Ensemble von  $n$  identisch zusammengesetzten Systemen repräsentiert ist. Davon sind  $np_1$  im Zustand  $|\psi_1\rangle$  und  $np_2$  im Zustand  $|\psi_2\rangle$  präpariert, sodass sich für den Mittelwert einer beliebigen Observablen des Systems

$$\bar{O} = p_1 \langle \psi_1 | \hat{O} | \psi_1 \rangle + p_2 \langle \psi_2 | \hat{O} | \psi_2 \rangle = \sum_i \sum_k p_i |\langle o_k | \psi_i \rangle|^2 o_k$$

ergibt, wobei  $o_k$  die Eigenwerte von  $\hat{O}$  seien. Sei dann weiter  $\{|a_k\rangle\}$  ein vollständiger Satz von Eigenvektoren eines anderen selbstadjungierten Operators  $\hat{A}$ , dann formt man

$$\bar{O} = \sum_i p_i \langle \psi_i | \hat{O} | \psi_i \rangle = \sum_{i,k,k'} p_i \langle \psi_i | a_k \rangle \langle a_k | \hat{O} | a_{k'} \rangle \langle a_{k'} | \psi_i \rangle$$

um. Zur Abkürzung wird dann den statistische **Dichte-Operator**  $\hat{\rho}$  durch

$$\hat{\rho} := \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$$

definiert, wobei man beachte, dass die  $|\psi_i\rangle$  im Allgemeinen keinen vollständigen Satz von Vektoren bilden. Mit  $\langle a_{k'} | \hat{\rho} | a_k \rangle = \sum_i p_i \langle a_{k'} | \psi_i \rangle \langle \psi_i | a_k \rangle$  gilt schließlich

$$\bar{O} = \sum_{k,k'} \langle a_{k'} | \hat{\rho} | a_k \rangle \langle a_k | \hat{O} | a_{k'} \rangle = \sum_{k'} \langle a_k | \hat{\rho} \hat{O} | a_{k'} \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{O}) .$$

<sup>3</sup>In der Quantenfeldtheorie wird die Quantenmechanik mit der speziellen Relativitätstheorie verknüpft, wobei die treibende Kraft die Suche nach einer quantisierten Theorie der Elektrodynamik war.

Der Dichteoperator enthält also alle physikalischen Informationen über den (gemischten) Zustand des Systems - insofern erlaubt er, alle physikalischen Eigenschaften des Systems auszudrücken. Man beschreibt also einen gemischten Zustand durch den zugehörigen Dichteoperator. Der Dichteoperator  $\hat{\rho}$  weist eine Reihe von Eigenschaften auf:

- *Selbstadjungiertheit*: Wie bei Observablen ist der Dichte-Operator selbstadjungiert:

$$\hat{\rho}^\dagger = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \hat{\rho} .$$

- *Spur Eins*: Für die Spur  $\text{Sp}(\hat{\rho}) = \sum_k \langle a_k | \hat{\rho} | a_k \rangle$  des Dichteoperators gilt

$$\begin{aligned} \text{Sp}(\hat{\rho}) &= \sum_k \langle a_k | \hat{\rho} | a_k \rangle = \sum_k \sum_i p_i \langle a_k | \psi_i \rangle \langle \psi_i | a_k \rangle \\ &= \sum_i p_i \sum_k \langle \psi_i | a_k \rangle \langle a_k | \psi_i \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | \psi_i \rangle = 1 \end{aligned}$$

Mit dem Dichte-Operator sind außerdem auch reine Zustände beschreibbar. Sei dazu  $|\psi\rangle$  ein reiner Zustand, dann definiert der Projektionsoperator  $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$  den Dichte-Operator dieses Zustands, und wegen

$$\text{Sp}(\hat{\rho}\hat{O}) = \sum_k \langle a_k | \hat{\rho}\hat{O} | a_k \rangle = \sum_k \langle a_k | \psi \rangle \langle \psi | \hat{O} | a_k \rangle = \sum_k \langle \psi | \hat{O} | a_k \rangle \langle a_k | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle$$

erhält man dann üblichen Ausdruck für den Erwartungswert. Insbesondere gilt in diesem Spezialfall

$$\hat{\rho}^2 = (|\psi\rangle\langle\psi|)(|\psi\rangle\langle\psi|) = |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{\rho} ,$$

was insbesondere  $\text{Sp}(\hat{\rho}^2) = \text{Sp}(\hat{\rho}) = 1$  impliziert. Man kann zeigen (darauf soll aber verzichtet werden), dass dies bereits eine allgemeine Bedingung dafür liefert:  $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$  oder  $\text{Sp}(\hat{\rho}^2) = 1$  bedeutet also, dass der Dichte-Operator  $\hat{\rho}$  einen reinen Zustand beschreibt. Im Allgemeinen wird dagegen  $0 < \text{Sp}(\hat{\rho}^2) \leq 1$  sein. Dies liefert nun:

**1. Axiom der Quantenmechanik (verallgemeinert):** Zu jedem Zustand (rein oder gemischt) des Systems gehört ein hermitescher Dichte-Operator  $\hat{\rho}$  mit  $\text{Sp}(\hat{\rho}) = 1$ .

Berechnen wir dann die Wahrscheinlichkeit, mit der man bei einer Messung der Observable  $A$  mit den Eigenwerten  $a_k$  im Zustand  $\hat{\rho}$  den Wert  $a_l$  erhält, so gilt

$$\begin{aligned} P^A(a_l) &= \sum_i p_i |\langle a_l | \psi_i \rangle|^2 = \sum_i p_i \langle \psi_i | a_l \rangle \langle a_l | \psi_i \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i | \hat{P}^{\hat{A}}(a_l) | \psi_i \rangle \\ &= \sum_i p_i \sum_{k,k'} \langle \psi_i | a_k \rangle \langle a_k | \hat{P}^{\hat{A}}(a_l) | a_{k'} \rangle \langle a_{k'} | \psi_i \rangle \\ &= \sum_{i,k,k'} p_i \langle a_{k'} | \psi_i \rangle \langle \psi_i | a_k \rangle \langle a_k | \hat{P}^{\hat{A}}(a_l) | a_{k'} \rangle = \sum_{k,k'} \langle a_{k'} | \hat{\rho} | a_k \rangle \langle a_k | \hat{P}^{\hat{A}}(a_l) | a_{k'} \rangle \\ &= \sum_{k'} \langle a_{k'} | \hat{\rho} \hat{P}^{\hat{A}}(a_l) | a_{k'} \rangle = \text{Sp} \left( \hat{\rho} \hat{P}^{\hat{A}}(a_l) \right) . \end{aligned}$$

Ein wichtiger noch zu klärender Punkt ist die Zeitentwicklung des statistischen Operators. Wenn das System sich selbst überlassen ist, so ändern sich die Überlagerungswahrscheinlichkeiten  $p_i$  nicht, d.h. es gilt

$$\hat{\rho}(t_0) = \sum_i p_i |\psi_i, t_0\rangle \langle t_0, \psi_i| \quad \rightarrow \quad \rho(t) = \sum_i p_i |\psi_i, t\rangle \langle \psi_i, t| .$$

Für die Zeitentwicklung der einzelnen überlagerten Zustände  $|\psi_i, t\rangle$  gilt nach der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_i, t\rangle = \hat{H} |\psi_i, t\rangle ,$$

also folgt für die Zeitentwicklung des Dichte-Operators im Schrödinger-Bild

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(t) = -[\hat{\rho}(t), \hat{H}] .$$

# 14. Quantenmechanische Eigenarten am Beispiel eindimensionaler Probleme

## 14.1. Die Schrödinger-Gleichung der Wellenmechanik

Das erste Mal ist uns die Schrödinger-Gleichung in Abschnitt 12.5 ab Seite 162 begegnet, wo wir sie aus de-Broglie-Relationen, ebenen Wellen und der klassischen Energie hergeleitet haben. Wir wissen inzwischen, dass wir dadurch die Bestimmungsgleichung der Zustandsvektoren des Schrödinger-Bilds in Orts-Darstellung erhalten haben. Ausgehend vom abstrakten vierten Axiom (vgl. Seite 185) soll die Schrödinger-Gleichung nun noch einmal abgeleitet werden.

Es sei nun  $|\psi, t\rangle_S$  ein beliebiger Zustand im Schrödinger-Bild, worauf wir aber in der Notation verzichten. Nach dem vierten Axiom

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi, t\rangle = \hat{H} |\psi, t\rangle$$

folgt dann in Orts-Darstellung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{r} | \psi, t \rangle = \langle \vec{r} | \hat{H} | \psi, t \rangle = \iiint d^3 \vec{r}' \langle \vec{r} | \hat{H} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi, t \rangle .$$

Sei dann weiter  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{1}{2m} \hat{\vec{P}}^2 + V(\hat{\vec{X}}) = \frac{1}{2m} \sum_i \hat{P}_i \hat{P}_i + V(\hat{\vec{X}})$  der Hamilton-Operator der Gesamtenergie, dann hat man weiter

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \hat{T} | \vec{r}' \rangle &= \frac{1}{2m} \sum_i \langle \vec{r} | \hat{P}_i \hat{P}_i | \vec{r}' \rangle = \frac{1}{2m} \sum_i \iiint d^3 \vec{r}'' \langle \vec{r} | \hat{P}_i | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' | \hat{P}_i | \vec{r}' \rangle \\ &= \frac{1}{2m} \sum_i \iiint d^3 \vec{r}'' \left[ (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x_i} \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}'') \right] \left[ (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x_i''} \delta^{(3)}(\vec{r}'' - \vec{r}') \right] \\ &\stackrel{\text{P.I.}}{=} \frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \iiint d^3 \vec{r}'' \left( \frac{\partial}{\partial x_i''} \frac{\partial}{\partial x_i} \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}'') \right) \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_i'^2} \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') \end{aligned}$$

für die Ortsdarstellung der kinetischen Energie, während für den Potentialterm

$$\langle \vec{r} | \hat{V} | \vec{r}' \rangle = \langle \vec{r} | V(\hat{\vec{X}}) | \vec{r}' \rangle = V(\vec{r}') \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}')$$

gilt. Damit lautet die Ortsdarstellung des Hamilton-Operators

$$\langle \vec{r} | \hat{H} | \vec{r}' \rangle = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}') \right) \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') = H_{\vec{r}\vec{r}'}^{\hat{X}}$$

und für die Zeitentwicklungsgleichung folgt daraus die **zeitabhängige Schrödinger-Gleichung**

$$\begin{aligned} \iiint d^3\vec{r}' \langle \vec{r} | \hat{H} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi, t \rangle &= \iiint d^3\vec{r}' \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') \psi(\vec{r}', t) \\ &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t) . \end{aligned}$$

Sei nun speziell  $|\psi, t_0\rangle = |E, t_0\rangle$  mit  $\hat{H}|E, t_0\rangle = E|E, t_0\rangle$  ein Energie-Eigenzustand, dann gilt

$$|\psi, t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi, t_0\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E(t - t_0)\right) |E, t_0\rangle = |E, t\rangle$$

mit der zugehörigen Wellenfunktion in Ortsdarstellung (beachte  $\Psi_E$  und  $\psi_E$ )

$$\Psi_E(\vec{r}, t) := \langle \vec{r} | \psi, t \rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E(t - t_0)\right) \langle \vec{r} | E, t_0 \rangle = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi_E(\vec{r}) .$$

Setzt man  $\Psi_E(\vec{r}, t)$  dann in die Schrödinger-Gleichung ein, so erhält man

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_E(\vec{r}, t) &= \hat{H} \Psi_E(\vec{r}, t) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \hat{H} \psi_E(\vec{r}) \\ \iff i\hbar \left[-\frac{i}{\hbar}E\right] \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi_E(\vec{r}) &= \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \hat{H} \psi_E(\vec{r}) \\ \iff \hat{H} \psi_E(\vec{r}) &= E \psi_E(\vec{r}) , \end{aligned}$$

letztere ist die **zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung**. Die Wellenfunktion eines stationären Zustands ist also gleich dem Produkt  $\Psi_E(\vec{r}, t) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi_E(\vec{r})$ , wobei  $\psi_E(\vec{r})$  der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung genügt. Im Eindimensionalen gilt dann

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi_E(x) = E \psi_E(x) ,$$

wobei es sich um eine gewöhnliche lineare homogene Differentialgleichung zweiter Ordnung handelt.

## 14.2. Stückweise konstante eindimensionale Potentiale

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns nun den Lösungen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung, vorzugsweise anhand von eindimensionalen Situationen, da sich diese deutlich einfacher explizit lösen lassen.

### 14.2.1. Stufenpotentiale

Der einfachste Fall eines stückweise konstanten eindimensionalen Potentials ist ein einzelner Sprung in der Funktion, d.h. wir betrachten ein Stufenpotential

$$V(x) = V_0 \Theta(x) = \begin{cases} V_0 & : x \geq 0 \\ 0 & : x < 0 \end{cases} \quad \text{mit der Ableitung} \quad -\frac{d}{dx}V(x) = -V_0 \delta(x) .$$

Klassisch ergibt sich für die Energie und damit den Impuls leicht

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \iff p = \sqrt{2m(E - V(x))} ,$$

man muss also drei Situationen in Abhängigkeit der Energie  $E$  unterscheiden:

- $E < 0$  ist für alle  $x$  nicht möglich, d.h. wir müssen für die Gültigkeit des Systems eine gewisse Mindestenergie haben.
- $0 < E < V_0$  ist mit  $p = \sqrt{2mE}$  nur für den Bereich  $x < 0$  möglich.
- $E > V_0$  führt zu zwei Bereichen mit  $p^I = \sqrt{2mE}$  für  $x < 0$  und  $p^{II} = \sqrt{2m(E - V_0)}$  für  $x \geq 0$ , die wir durch römische Zahlen nummerieren.

Wir ermitteln nun quantenmechanisch für gegebenes  $E$  die Lösung der zugehörigen zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung, wobei wir wie folgt vorgehen: Zuerst wird die stückweise Lösung in den einzelnen Bereichen  $x < 0$  und  $x \geq 0$  bestimmt. Durch Verwendung von Stetigkeit und Differenzierbarkeit werden diese Teillösungen zusammengefügt und schließlich die resultierende Wellenfunktion normiert.

### Erste Situation: Energie $0 < E < V_0$

Zuerst sei die Energie so, dass aus klassischer Sicht nur im Bereich  $x < 0$  ein Aufhalten des Teilchens möglich ist, dann gilt für die Schrödinger-Gleichung in diesem Bereich

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_E^I(x) = E \psi_E^I(x) .$$

Mit dem Lösungsansatz  $\psi_E^I(x) = A e^{ik^I x}$  erhalten wir durch Einsetzen zur Bestimmung der Konstanten  $k^I = \pm k$  die allgemeine Lösung

$$\psi_E^I(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} \quad \text{mit} \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$

für  $A_1, A_2 \in \mathbb{C}$ . Analog betrachte man dann den Bereich  $x \geq 0$ , wo  $V(x) = V_0$  gilt. Für die Schrödinger-Gleichung hat man hier

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_E^{II}(x) + V_0 \psi_E^{II}(x) = E \psi_E^{II}(x) \iff -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_E^{II}(x) = (E - V_0) \psi_E^{II}(x) ,$$

wobei man als Lösungsansatz erneut  $\psi_E^{II}(x) = B e^{ik^{II} x}$  wählt. Einsetzen liefert dann sofort

$$k^{II} = \pm \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)} = \pm i\kappa \quad \text{mit} \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)} ,$$

wonach die allgemeine Lösung durch  $\psi_E^{II}(x) = B_1 e^{-\kappa x} + B_2 e^{\kappa x}$  für  $B_1, B_2 \in \mathbb{C}$  gegeben ist. Damit jedoch die zusammengesetzte Lösung normierbar ist, muss der Faktor  $B_2 = 0$  sein, sodass  $\psi_E^{II}(x) = B_1 e^{-\kappa x}$  ist. Um nun die Koeffizienten  $A_1, A_2$  und  $B_1$  zu bestimmen verwendet man, dass die Wellenfunktion in  $x = 0$  eine stetige, differenzierbare Funktion sein muss. Aus

$$\begin{aligned} \text{Stetigkeit:} \quad \psi_E^I(x=0) &= \psi_E^{II}(x=0) \implies A_1 + A_2 = B_1 \\ \text{Differenzierbarkeit:} \quad \left. \frac{d}{dx} \psi_E^I \right|_{x=0} &= \left. \frac{d}{dx} \psi_E^{II} \right|_{x=0} \implies ik(A_1 - A_2) = -i\kappa B_1 \end{aligned}$$

erhalten wir dann die bestimmenden Gleichungen für die Koeffizienten, die wir schließlich zu

$$A_1 = \frac{1}{2} \left( 1 + i \frac{\kappa}{k} \right) B_1 , \quad A_2 = \frac{1}{2} \left( 1 - i \frac{\kappa}{k} \right) B_1 \quad \text{und} \quad \frac{\kappa}{k} = \sqrt{\frac{V_0}{E} - 1}$$

auffösen. Der Parameter  $B_1$  wird dann noch durch die Forderung der Normiertheit einer Wellenfunktion festgelegt, also durch  $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$ . Wählen wir die Normierung so, dass  $A_1 = 1$  ist, so findet man dann

$$\psi_E(x) = \begin{cases} A_1 \left( e^{ikx} + \frac{1 - i\sqrt{\frac{V_0}{E} - 1}}{1 + i\sqrt{\frac{V_0}{E} - 1}} e^{-ikx} \right) & : x < 0 \\ \frac{2A_1}{1 + i\sqrt{\frac{V_0}{E} - 1}} e^{-\kappa x} & : x \geq 0 \end{cases}$$

und damit für die Wellenfunktion

$$\Psi_E(x, t) = e^{-i\omega t} \psi_E(x, t) = \begin{cases} A_1 \left( e^{-i(\omega t - kx)} + \frac{1 - i\sqrt{\frac{V_0}{E} - 1}}{1 + i\sqrt{\frac{V_0}{E} - 1}} e^{-i(\omega t + kx)} \right) & : x < 0 \\ \frac{2A_1}{1 + i\sqrt{\frac{V_0}{E} - 1}} e^{-i\omega t} e^{-\kappa x} & : x \geq 0 \end{cases} .$$

Man beachte, dass im Falle von  $x < 0$  es sich um eine nach rechts laufende Welle (zur Stufe hin einlaufende) und eine nach links laufende Welle (reflektiert) handelt. Betrachte wir dann den **Reflektionskoeffizienten**  $R$ , der durch

$$R := \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} = \left| \frac{1 - i\sqrt{\frac{V_0}{E} - 1}}{1 + i\sqrt{\frac{V_0}{E} - 1}} \right|^2 = 1$$

gegeben ist, also wird alles reflektiert. Der überraschende quantenmechanische Effekt ist aber nun, dass die Wellenfunktion auch bei  $x \geq 0$ , also im klassisch verbotenen Bereich, nicht vollständig verschwindet. Man definiert die **Eindringtiefe** als  $\Delta x = \frac{1}{\kappa}$ , denn dann gilt in der Exponentialfunktion  $e^{-\kappa \Delta x} = \frac{1}{e} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$ . Für die Amplitude der Wellenfunktion gilt

$$|\psi_E(x, t)|^2 = \left| \frac{2}{1 + i\sqrt{\frac{V_0}{E} - 1}} \right|^2 e^{-2\kappa x} ,$$

d.h. das Teilchen kann auch in einen klassisch verbotenen Bereich eindringen. Man beachte, dass für  $V_0 \rightarrow \infty$  die Eindringtiefe  $\Delta x \rightarrow 0$  geht, dann ist auch keine Stetigkeit der Ableitung von  $\psi_E(x)$  bei  $x = 0$  verlangbar.

### Zweite Situation: Energie $E > V_0$

Die Energie  $E > V_0$  sei nun so, dass sich das Teilchen klassisch im gesamten Raum befinden kann. Für den Bereich  $x < 0$  lässt sich die Lösung direkt aus der vorigen Situation übernehmen, während man für  $x \geq 0$  die Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_E^{\text{II}}(x) = (E - V_0) \psi_E^{\text{II}}(x)$$

hat. Der übliche Exponentialansatz  $\psi_E^{\text{II}}(x) = B e^{ik^{\text{II}}x}$  führt durch Einsetzen dann auf  $k^{\text{II}} = \pm \bar{k}$  und so auf die allgemeine Lösung

$$\psi_E^{\text{II}}(x) = B_1 e^{i\bar{k}x} + B_2 e^{-i\bar{k}x} \quad \text{mit} \quad \bar{k} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}$$

für alle  $B_1, B_2 \in \mathbb{C}$ . Man wähle nun die Randbedingungen so, dass im Bereich  $x > 0$  nur noch nach rechts laufende Wellen sind, d.h. man wähle  $B_2 = 0$ , also  $\psi_E^{\text{II}}(x) = B_1 e^{i\bar{k}x}$ . Auf Grund von Stetigkeit und Differenzierbarkeit der Wellenfunktion müssen dann  $A_1 + A_2 = B_1$  und  $ik(A_1 - A_2) = i\bar{k}B_1$  gelten, diese beiden Bedingungen führen zu

$$A_1 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\bar{k}}{k}\right) B_1, \quad A_2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\bar{k}}{k}\right) B_1 \quad \text{und} \quad \frac{\bar{k}}{k} = \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}.$$

Der Faktor  $B_1$  lässt sich dann wieder durch die Normiertheit bestimmen, und man erhält abschließend die Wellenfunktion

$$\Psi_E(x, t) = \begin{cases} A_1 \left( e^{-i(\omega t - kx)} + \frac{1 - i\sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{1 + i\sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}} e^{-i(\omega t + kx)} \right) & : x < 0 \\ \frac{2A_1}{1 + i\sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}} e^{-i(\omega t - \bar{k}x)} & : x \geq 0 \end{cases}.$$

Ein Teil der einlaufenden Wellen wird also bei  $x = 0$  reflektiert, während ein Teil mit geänderter Wellenzahl nach rechts weiterläuft. Betrachten wir auch hier den Reflexionskoeffizienten  $R$  und **Transmissionskoeffizienten**  $T$ , so findet sich

$$R = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2} = \left( \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 + \frac{V_0}{E}}} \right)^2 \quad \text{und} \quad T := 1 - R = \frac{\bar{k}}{k} \left( \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}} \right)^2,$$

wobei  $R \rightarrow 0$  für  $E \gg V_0$  geht. Dieses Ergebnis ist im Vergleich zur klassischen Mechanik sicherlich überraschend, da aus einem Teilchen gewissermaßen zwei Wellenpakete werden.

Fassen wir noch einmal zusammen: Für ein Stufenpotential gibt es zu jedem Energiewert mit  $E > 0$  eine normierbare Lösung, d.h. eine Energieeigenfunktion, also ist das Spektrum von  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}_{\text{Stufenpot.}}$  die kontinuierliche Menge  $E \geq 0$ . Für  $E < 0$  gibt es hingegen keine Lösungen.

### 14.2.2. Rechteckige Potentialbarrieren

Als nächstes betrachten wir ein rechteckige Potentialbarriere endlicher Höhe, die um  $x = 0$  zentriert ist, das Potential hat also die Form

$$V(x) \begin{cases} 0 & : |x| > a \\ V_0 & : |x| \leq a \end{cases}.$$

Klassisch gilt für den Impuls des Teilchens dann  $p = \sqrt{2m(E - V(x))}$ , man kann deshalb wieder zwei klassische Fälle unterscheiden: Für  $0 < E < V_0$  kann die Bewegung nur im Bereich  $|x| > a$  stattfinden, während für  $E > V_0$  die Bewegung prinzipiell überall möglich ist, im Bereich  $|x| \leq a$  liegt allerdings ein Teil der Energie als potentielle Energie vor, was zu einer Verlangsamung der Bewegung führt.

#### 14. Quantenmechanische Eigenarten am Beispiel eindimensionaler Probleme

Quantenmechanisch ist wieder die Schrödinger-Gleichung zu diesem Potential zu lösen, welches wir in drei Stücke unterteilen. Im Folgenden sei daher mit I der Bereich  $]-\infty, -a]$  bezeichnet, mit II dann  $[-a, a]$  und mit III das Intervall  $[a, \infty[$ . Man betrachte dann zunächst den Fall, dass  $0 < E < V_0$  ist, mit dem bereits bekannten Ansatz findet man dann die Funktionen

$$\begin{aligned} \psi_E^{\text{I}}(x) &= A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} \\ \psi_E^{\text{II}}(x) &= B_1 e^{-\kappa x} + B_2 e^{\kappa x} \\ \psi_E^{\text{III}}(x) &= C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} \end{aligned} \quad \text{mit} \quad \begin{aligned} k &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \bar{k} &= \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} = i\kappa \end{aligned}$$

Man beachte, dass die Normierbarkeitsbedingung keine Einschränkung für die Koeffizienten darstellt, da die reelle Exponentialfunktion nur auf dem endlichen Intervall  $[-a, a]$  zu betrachten ist. Aufgrund von Stetigkeit und Differenzierbarkeit der Gesamtlösung in  $x = -a$  und  $x = a$  findet man die Gleichungen

$$\begin{aligned} x = -a : \quad \psi_E^{\text{I}}(-a) &= \psi_E^{\text{II}}(-a) &\implies A_1 e^{-ika} + A_2 e^{ika} &= B_1 e^{\kappa a} + B_2 e^{-\kappa a} \\ \frac{d}{dx} \psi_E^{\text{I}} \Big|_{x=-a} &= \frac{d}{dx} \psi_E^{\text{II}} \Big|_{x=-a} &\implies ik(A_1 e^{-ika} - A_2 e^{ika}) &= \kappa(-B_1 e^{\kappa a} + B_2 e^{-\kappa a}) \\ x = a : \quad \psi_E^{\text{II}}(a) &= \psi_E^{\text{III}}(a) &\implies B_1 e^{-\kappa a} + B_2 e^{\kappa a} &= C_1 e^{ika} + C_2 e^{-ika} \\ \frac{d}{dx} \psi_E^{\text{II}} \Big|_{x=a} &= \frac{d}{dx} \psi_E^{\text{III}} \Big|_{x=a} &\implies -\kappa(B_1 e^{-\kappa a} - B_2 e^{\kappa a}) &= ik(C_1 e^{ika} - C_2 e^{-ika}) \end{aligned}$$

zusammen mit der Normiertheitsbedingung finden sich also fünf Bestimmungsgleichungen für die sechs Koeffizienten, demnach ist die Wahl einer Randbedingung frei. Man wähle dann  $C_2 = 0$ , d.h. man hat eine von links einlaufende Welle. Im Folgenden berechnen wir dann die Quotienten  $\frac{A_2}{A_1}$  und  $\frac{C_1}{A_1}$ , die uns dann den Reflexions- und Transmissionskoeffizienten liefern. Dazu ermitteln wir aus den obigen Gleichungen jeweils  $B_1$  und  $B_2$ , und setzen die erhaltenen Ausdrücke gleich. Durch elementare Rechnungen findet man

$$\begin{aligned} C_1 e^{ika} \left( \frac{(1 - i\frac{k}{\kappa})^2}{(1 + i\frac{k}{\kappa})^2} e^{2\kappa a} - \frac{(1 + i\frac{k}{\kappa})^2}{(1 - i\frac{k}{\kappa})^2} e^{-2\kappa a} \right) &= A_1 e^{-ika} \left( \frac{(1 - i\frac{k}{\kappa})^2 - (1 + i\frac{k}{\kappa})^2}{1 - i\frac{k}{\kappa}} \right) \\ \iff \frac{C_1}{A_1} &= e^{-2ika} \frac{(1 - i\frac{k}{\kappa})^2 - (1 + i\frac{k}{\kappa})^2}{(1 - i\frac{k}{\kappa})^2 e^{2\kappa a} - (1 + i\frac{k}{\kappa})^2 e^{-2\kappa a}} \\ &= e^{-2ika} \frac{-4i\frac{k}{\kappa}}{(1 - \frac{k^2}{\kappa^2})(e^{2\kappa a} - e^{-2\kappa a}) - 2i\frac{k}{\kappa}(e^{2\kappa a} + e^{-2\kappa a})} \\ &= e^{-2ika} \frac{2i\kappa k}{2i\kappa k \cosh(2\kappa a) + (k^2 - \kappa^2) \sinh(2\kappa a)} \\ \implies \left| \frac{C_1}{A_1} \right|^2 &= T = \frac{4\kappa^2 k^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(2\kappa a) + 4\kappa^2 k^2} = \left[ \left( \frac{k^2 + \kappa^2}{2\kappa^2 k^2} \right)^2 \sinh^2(2\kappa a) + 1 \right]^{-1}, \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt die allgemeine Identität  $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$  verwendet wurde. Ganz analog verfährt man auch zur Berechnung des Reflexionskoeffizienten. Man sieht also, dass es für jede Energie  $E$  mit  $0 < E < V_0$  eine Lösung für  $A_1, A_2, B_1, B_2$  und  $C_1$  gibt. Insbesondere aber ist bei allen Energien im Bereich  $[a, \infty[$

$$\psi_E^{\text{III}}(x) = C_1 e^{ikx} \neq 0,$$

d.h. die Teilchen können die Potentialbarriere durchdringen, die nennt man den quantenmechanischen **Tunneleffekt**. Man betrachte nun speziell den Fall, dass  $\kappa a \gg 1$  ist, dann ist

$$\sinh(2\kappa a) \propto \frac{1}{2}e^{2\kappa a} \quad \implies \quad T \propto \frac{2k\kappa}{k^2 + \kappa^2}e^{-4a\kappa} \xrightarrow{E \approx \frac{V_0}{2}} e^{-4a\kappa} = e^{-2\Delta a\kappa},$$

wobei  $\Delta a$  für die Breite der Potentialbarriere steht. Man bemerke dabei, dass  $T$  relativ zu Eins nur dann groß ist, wenn  $\Delta a$  klein und/oder  $\kappa$  klein ist, d.h. für  $E \leq V_0$  können Teilchen geringer Energie nur sehr dünne Barrieren durchdringen.

Man betrachte dann noch den Fall, dass  $E > V_0$  ist. Man erhält durch analoge Rechnungen dann zu jedem Energiewert eine Lösung der Schrödinger-Gleichung, d.h. das Spektrum von  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}_{\text{Barriere}}$  ist kontinuierlich.

### 14.2.3. Rechteckiger Potentialtopf endlicher Tiefe

Jetzt betrachten wir die zum vorigen Punkt invertierte Situation, das Potential habe als nun eine Vertiefung um  $x = 0$  statt einer Barriere, also

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & : |x| > a \\ 0 & : |x| \leq a \end{cases}.$$

Klassisch erwartet man für  $E < V_0$  den alleinigen Aufenthalt des Teilchens im Bereich  $[-a, a]$ , die Bewegung ist also eingeschränkt. Für  $E > V_0$  kann sich das Teilchen überall aufhalten, wegen der Umwandlung von kinetischer in potentielle Energie in den Bereichen  $|x| > a$  bewegt sich das Teilchen dort aber langsamer.

Die Lösung der quantenmechanischen Situation erfolgt ebenso wie im vorigen Abschnitt, man findet erneut

$$\begin{aligned} \psi_E^{\text{I}}(x) &= B_1 e^{i\bar{k}x} + B_2 e^{-i\bar{k}x} & k &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \psi_E^{\text{II}}(x) &= A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} & \text{mit} & \\ \psi_E^{\text{III}}(x) &= C_1 e^{i\bar{k}x} + C_2 e^{-i\bar{k}x} & \bar{k} &= \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} = i\kappa \end{aligned}$$

als stückweise Lösungen, wobei im Fall  $0 < E < V_0$  die Stücke  $\psi^{\text{I}}$  und  $\psi^{\text{III}}$  in

$$\psi_E^{\text{I}}(x) = B_1 e^{-\kappa x} + B_2 e^{\kappa x} \quad \text{und} \quad \psi_E^{\text{III}}(x) = C_1 e^{-\kappa x} + C_2 e^{\kappa x}$$

übergehen. Auf Grund der Normierbarkeit sieht man an dieser Stelle direkt, dass  $B_1 = 0$  und  $C_2 = 0$  gelten muss, da die zugehörigen Exponentialfunktionen sonst divergieren würden. Verwendet man dann weiter die Stetigkeitsbedingungen, so erhält man zusammen mit der Normierbarkeit bereits fünf Bestimmungsgleichungen für vier Koeffizienten, das System ist somit überbestimmt und nur für spezielle Werte der Energie lösbar.

Man verwende nun folgende technische Tricks: Zum einen betrachten wir nur reelle Lösungen, da wir nur die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung betrachten und diese eine Differentialgleichung mit reellen Koeffizienten ist. Es müssen also hier  $A_2 = A_1^*$  und  $B_2, C_1 \in \mathbb{R}$  sein, man setze  $A_1 = |A_1|e^{i\tilde{\varphi}}$  und damit  $A_2 = |A_1|e^{-i\tilde{\varphi}}$ , dann folgt

$$\psi_E^{\text{II}}(x) = |A_1|(e^{i(kx+\tilde{\varphi})} + e^{-i(kx+\tilde{\varphi})}) = 2|A_1|\cos(kx + \tilde{\varphi}).$$

Setzt man dann noch  $\tilde{\varphi} = \varphi + \frac{\pi}{2}$ , so ergibt sich für das mittlere Stück die Lösung

$$\psi_E^{\text{II}}(x) = A \sin(kx + \varphi).$$

Verwendet man dann weiter als Stetigkeitsbedingungen die Stetigkeit der Funktion sowie der logarithmischen Ableitung<sup>1</sup>, dann findet man

$$\begin{aligned} \ln \psi_E^{\text{I}}(x) = \ln B_2 + \kappa x &\implies \frac{d}{dx} \ln \psi_E^{\text{I}}(x) = \kappa \\ \ln \psi_E^{\text{II}}(x) = \ln A + \ln \sin(kx + \varphi) &\implies \frac{d}{dx} \ln \psi_E^{\text{II}}(x) = k \cot(kx + \varphi) \\ \ln \psi_E^{\text{III}}(x) = \ln C_1 - \kappa x &\implies \frac{d}{dx} \ln \psi_E^{\text{III}}(x) = -\kappa \end{aligned}$$

als logarithmische Ableitungen. Auf Grund von Stetigkeit und Differenzierbarkeit erhalten wir dann die Gleichungen

$$x = -a: \quad \psi_E^{\text{I}}(-a) = \psi_E^{\text{II}}(-a) \implies B_2 e^{-\kappa a} = A \sin(-ka + \varphi) \quad (a)$$

$$\frac{d}{dx} \ln \psi_E^{\text{I}}|_{x=-a} = \frac{d}{dx} \ln \psi_E^{\text{II}}|_{x=-a} \implies \kappa = k \cot(-ka + \varphi) \quad (a')$$

$$x = a: \quad \psi_E^{\text{II}}(a) = \psi_E^{\text{III}}(a) \implies A \sin(ka + \varphi) = C_1 e^{-\kappa a} \quad (b)$$

$$\frac{d}{dx} \ln \psi_E^{\text{II}}|_{x=a} = \frac{d}{dx} \ln \psi_E^{\text{III}}|_{x=a} \implies k \cot(ka + \varphi) = \kappa \quad (b')$$

Aus den Gleichungen (a), (b) sowie der Normierbarkeitsbedingung lassen sich die Koeffizienten  $A$ ,  $B_2$  und  $C_1$  bestimmen. Die Gleichungen (a') und (b') hingegen liefern Bedingungen für  $k$ ,  $\kappa$  und  $\varphi$ , führen also auf  $E$  zurück. Aus eben diesen Gleichungen folgt nun

$$(a'): \quad \operatorname{arccot} \frac{\kappa}{k} = -ka + \varphi \iff \operatorname{arccot} \frac{\kappa}{k} + n_1 \pi = -ka + \varphi$$

$$\iff \varphi = ka + \operatorname{arccot} \frac{\kappa}{k} + n_1 \pi$$

$$(b'): \quad \operatorname{arccot} \left( -\frac{\kappa}{k} \right) = ka + \varphi \iff \operatorname{arccot} \left( -\frac{\kappa}{k} \right) + n_2 \pi = ka + \varphi$$

$$\iff \varphi = -ka - \operatorname{arccot} \frac{\kappa}{k} + n_2 \pi$$

für  $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$  und Gleichsetzen der beiden Ergebnisse für  $\varphi$  liefert dann

$$\begin{aligned} ka + \operatorname{arccot} \frac{\kappa}{k} + n_1 \pi &= -ka - \operatorname{arccot} \frac{\kappa}{k} + n_2 \pi \\ \iff (n_1 - n_2) \pi &=: -n\pi = -2ka - 2 \operatorname{arccot} \frac{\kappa}{k}. \end{aligned}$$

Setzt man dann weiter die Variable  $k$  gleich

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \sqrt{\frac{E}{V_0}} =: \alpha \varepsilon,$$

so ergibt sich für den Quotienten  $\frac{\kappa}{k}$  im Argument der Arcus-Cotangens-Funktion

$$\frac{\kappa}{k} = \frac{\kappa}{\frac{1}{\hbar} \sqrt{2mV_0}} \frac{\frac{1}{\hbar} \sqrt{2mV_0}}{k} = \frac{\alpha}{\alpha \varepsilon} \frac{\frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}}{\alpha} = \frac{1}{\varepsilon} \sqrt{1 - \frac{E}{V_0}} = \frac{\sqrt{1 - \varepsilon^2}}{\varepsilon},$$

womit obige Gleichung zu

$$\begin{aligned} -n\pi + 2\alpha \varepsilon &= -2 \operatorname{arccot} \left( \frac{\sqrt{1 - \varepsilon^2}}{\varepsilon} \right) = -2 \operatorname{arctan} \left( \frac{\varepsilon}{\sqrt{1 - \varepsilon^2}} \right) = -2 \operatorname{arcsin} \varepsilon \\ \iff -n\pi + 2\alpha \varepsilon &= -2 \operatorname{arcsin} \varepsilon \end{aligned}$$

<sup>1</sup>Die Stetigkeit der logarithmischen Ableitung  $\frac{d}{dx} \ln f(x)$  ist in der betrachteten Situation äquivalent zur Stetigkeit der Ableitung  $\frac{d}{dx} f(x)$ , im Allgemeinen muss man aber wegen negativer Funktionswerte und der mathematischen Wahl des Zweigs des Logarithmus vorsichtig sein, es sei auf die Funktionentheorie verwiesen.

wird. Hierbei handelt es sich um eine transzendente Gleichung<sup>2</sup> in  $\varepsilon$ , die sich nur numerisch lösen lässt. Die Lösungswerte seien durch  $\varepsilon_{-s}, \dots, \varepsilon_{-1}, \varepsilon_0, \varepsilon_1, \dots, \varepsilon_s$  bezeichnet, wobei  $\varepsilon_s < 2$  und  $\varepsilon_{s+1} > 2$  ist. Da es sich bei der linken und rechten Seite der Gleichung um ungerade Funktionen in  $\varepsilon$  handelt, muss die Asymmetrie  $\varepsilon_{-k} = -\varepsilon_k$  gelten. Die zugehörigen Energie-Werte ergeben sich dann aus  $E_k = V_0 \varepsilon_k^2$  mit  $k = 0, \pm 1, \dots, \pm s$ , wobei hier  $E_k = E_{-k}$  ist.

**Bemerkung:** Man beachte, dass  $\varepsilon_0 = 0$  keine physikalische Lösung der Schrödinger-Gleichung liefert, da die zugehörige Wellenfunktion identisch gleich Null ist, also nicht normiert werden kann.

Für ein gegebenes  $\varepsilon_n$  folgende dann die Koeffizienten  $k^{(n)}$ ,  $\kappa^{(n)}$  und  $\varphi^{(n)}$  und daraus dann auch die Vorfaktoren  $A^{(n)}$ ,  $B_2^{(n)}$  und  $C_1^{(n)}$  über die Gleichungen (a) und (b), sodass wir als stückweise Lösungen schließlich

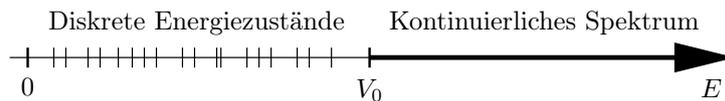
$$\psi_E^{\text{I}}(x) = B_2^{(n)} e^{\kappa^{(n)}x} \quad \psi_E^{\text{II}}(x) = A^{(n)} \sin(k^{(n)}x + \varphi^{(n)}) \quad \psi_E^{\text{III}}(x) = C_1^{(n)} e^{-\kappa^{(n)}x}$$

für jedes  $E_n$  erhalten.

Betrachten wir dann noch den Fall der Energie  $E > V_0$ , wobei erneut der übliche Exponentialansatz

$$\begin{aligned} \psi_E^{\text{I}}(x) &= B_1 e^{ik^{\text{I}}x} - B_2 e^{-ik^{\text{I}}x} \\ \psi_E^{\text{II}}(x) &= A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} \\ \psi_E^{\text{III}}(x) &= C_1 e^{i\bar{k}x} + C_2 e^{-i\bar{k}x} \end{aligned} \quad \text{mit} \quad \begin{aligned} k &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ k^{\text{I}} = \bar{k} &= \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

verwendet wird. Normierbarkeit liefert außer einer zusätzlichen Bestimmungsgleichung keine weiteren Bedingungen, man hat also unter Hinzunahme der Stetigkeitsbedingungen fünf Gleichungen für sechs Koeffizienten, d.h. für jedes  $E > V_0$  findet man eine Lösung, das Spektrum nimmt also (rein qualitativ) die folgende Form an:



Dabei heißen die diskret verteilten  $E_n$ -Energiewerte **Bindungsenergien** und ihre Zustände entsprechend **Bindungszustände**, während man bei den kontinuierlich verteilten  $E$ -Werten von **Streuzuständen** spricht.

#### 14.2.4. Unendlich tiefer Potentialtopf

Interessant ist der Grenzfall unendlich hoher Potentialwände des vorigen Abschnitts. Eine solche Konfiguration liefert beispielsweise eine idealisierte Modellierung des oftmals verwendeten Konzepts eines abgeschlossenen endlichen Systems. Da es sich um den Limes  $V_0 \rightarrow \infty$  des vorigen Beispiels handelt, und deshalb immer  $E < V_0$  gilt, erhalten wir direkt

$$\psi_E^{\text{I}}(x) = B_2 e^{\kappa x} \rightarrow 0 \quad \psi_E^{\text{III}}(x) = C_1 e^{-\kappa x} \rightarrow 0 \quad \psi_E^{\text{II}}(x) = A \sin(kx + \varphi) .$$

<sup>2</sup>Man unterscheidet in der Algebra zwischen algebraischen und transzendenten Gleichungen. Der Unterschied besteht darin, dass (gegebenenfalls nach einer Taylor-Entwicklung) algebraische Gleichungen von der Form  $P(x) = 0$  für ein Polynom  $P$  von  $n$ -ter Ordnung sind, transzendente Gleichungen aber unendlich viele Terme  $a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n + \dots = 0$  enthalten.

Man beachte, dass die Ableitungen in diesem Beispiel nicht stetig sein können, dies ist aber auch nicht erforderlich da  $V \rightarrow \infty$  geht. Deshalb liegen die Energie-Werte  $E_n$  nur diskret in der Form

$$E_n = \frac{\pi \hbar^2}{2m(2a)^2} n^2$$

für  $n = 1, 2, 3, \dots$  vor, d.h. wir erhalten ein reines Punktspektrum, welches proportional zu  $n^2$  anwächst.

### 14.2.5. Beliebige Stufenpotential

Als Verallgemeinerung des ersten eindimensionalen Beispiels betrachten wir ein allgemeines Stufenpotential in der Form

$$V(x) = \begin{cases} V_- & : x \leq a \\ 0 & : |x| < a \\ V_+ & : x \geq a \end{cases} \quad \text{mit} \quad V_- > V_+ .$$

Zur Lösung verfährt man hier ganz analog wie in allen vorigen Beispielen, dies soll daher nicht noch einmal explizit durchgeführt werden. Als allgemeines Lösungskonzept halten wir aber die einzelnen Schritte noch einmal fest:

1. Lösung der Schrödinger-Gleichung auf den einzelnen Bereichen mit dem Exponentialansatz  $\psi(x) = e^{ikx}$ .
2. Verwendung der Normierbarkeitsbedingung insofern, dass man überprüft, ob die auftretenden reellen Exponentialfunktionen auf ihren Definitionsbereichen normierbar sind. Ist dem stets so, dann ergibt sich keine weitere Bedingung, andernfalls ist der zu diesem Term gehörende Koeffizient Null zu setzen.
3. Verwendung der Stetigkeits- und Differenzierbarkeitsbedingungen, man erhält doppelt so viele Bedingungen wie man Übergangsstellen hat, im Allgemeinen zwei weniger als die Anzahl der zu bestimmenden Koeffizienten.
4. Verwendung der Normierbarkeitsbedingung liefert eine letzte Gleichung.

Für das oben definierte Stufenpotential ergeben sich für die drei zu betrachtenden Fälle folgende Ergebnisse, das Nachprüfen dieser sei als Übung empfohlen:

- $0 < E < V_+$ : Man erhält fünf Gleichungen für vier Unbekannte, die Gleichung ist also nur für diskrete Energiezustände (Bindungszustände) lösbar.
- $V_+ < E < V_-$ : Hier ergeben sich fünf Gleichungen für fünf Unbekannte, die Gleichung ist also für vorgegebenes  $E$  stets lösbar, das Spektrum ist somit kontinuierlich.
- $E > V_+$ : In diesem Fall erhält man fünf Gleichungen für sechs Unbekannte, die Gleichung ist also stets lösbar.

### 14.2.6. Allgemeines Potential

Im allgemeinsten Fall ist das Potential  $V = V(x)$  durch eine Funktion gegeben, wobei die beiden Randbedingungen

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} V(x) = V_- \quad \text{und} \quad \lim_{x \rightarrow \infty} V(x) = V_+$$

gelten, wobei auch  $V_{\pm} = \infty$  zugelassen sind. Dann kann  $E$  für  $V_{\min} < E < \min(V_+, V_-)$  nur diskrete Werte annehmen (Bindungszustände), während das Spektrum für  $E > \max(V_+, V_-)$  kontinuierlich ist (Streuzustände). Für den Bereich dazwischen lässt sich keine allgemeine Aussage ohne nähere Kenntnis des konkreten Potentials treffen.

## 14.3. Der eindimensionale harmonische Oszillator

Ganz am Anfang der klassischen Mechanik haben wir in Abschnitt 1.2.3 ab Seite 8 den klassischen harmonischen Oszillator ohne Reibung untersucht und die Bewegungsgleichung gelöst. Dabei war  $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$  das Potential zur Kraft  $F_x = -\frac{dV}{dx} = -kx$ , womit wir später (Abschnitt 4.4.3 ab Seite 58) im Rahmen des klassischen Hamilton-Formalismus die Hamilton-Funktion aufgestellt haben:

$$H(x, p) = T + V = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{k}{2}x^2 .$$

### 14.3.1. Quantisierung des Systems

Dieses System wollen wir nun vom quantenmechanischen Standpunkt aus betrachten. Der Hamilton-Operator ergibt sich direkt aus

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{k}{2}\hat{X}^2 ,$$

wobei im Folgenden  $\frac{k}{2} = \frac{m}{2}\omega^2$  und  $m = 1$  sei. Verwendet man dann weiter die Vertauschungsrelation  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$ , so folgt

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2} \left( \hat{P}^2 + \omega^2 \hat{X}^2 \right) = \frac{1}{2} \left( -i\hat{P} + \omega\hat{X} \right) \left( i\hat{P} + \omega\hat{X} \right) - \frac{1}{2}i\omega[\hat{X}, \hat{P}] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\omega\hbar}} \left( \omega\hat{X} - i\hat{P} \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\omega\hbar}} \left( \omega\hat{X} + i\hat{P} \right) \hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega \\ &= \hbar\omega \left[ \frac{1}{\sqrt{2\omega\hbar}} \left( \omega\hat{X} - i\hat{P} \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\omega\hbar}} \left( \omega\hat{X} + i\hat{P} \right) + \frac{1}{2} \right] \end{aligned}$$

für den Hamilton-Operator. Man definiere dann weiter die beiden nicht selbstadjungierten Operatoren

$$\hat{a} := \frac{1}{\sqrt{2\omega\hbar}} \left( \omega\hat{X} + i\hat{P} \right) \quad \text{und} \quad \hat{a}^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2\omega\hbar}} \left( \omega\hat{X} - i\hat{P} \right)$$

mit denen wir umgekehrt (aber nur hier in diesem Beispiel) den Orts- und Impuls-Operator durch

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \left( \hat{a} + \hat{a}^\dagger \right) \quad \text{und} \quad \hat{P} = -i\omega\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \left( \hat{a} - \hat{a}^\dagger \right)$$

ausdrücken können. Damit lässt sich der Hamilton-Operator des eindimensionalen, quantenmechanischen, reibungsfreien, harmonischen Oszillators kurz als

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) =: \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right)$$

schreiben, wobei  $\hat{N} := \hat{a}^\dagger \hat{a}$  sei. Die Eigenschaften dieser neu definierten Operatoren werden durch ihre Vertauschungsrelationen deutlich, also berechnen wir die Kommutatoren:

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \frac{1}{2\omega\hbar} \left( \omega^2 [\hat{X}, \hat{X}] + i\omega [\hat{P}, \hat{X}] - i\omega [\hat{X}, \hat{P}] + [\hat{P}, \hat{P}] \right) = \frac{1}{2\omega\hbar} \cdot 2\omega\hbar = 1 \\ [\hat{N}, \hat{a}] &= [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] \hat{a} = -\hat{a} \quad \text{und} \quad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \\ \implies [\hat{H}, \hat{a}] &= -\hbar\omega \hat{a} \quad \text{und} \quad [\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega \hat{a}^\dagger . \end{aligned}$$

### 14.3.2. Oszillator-Eigenzustände

Als nächstes konstruieren wir die Eigenvektoren von  $\hat{H}$  und  $\hat{N}$ . Dazu sei der Ket-Vektor  $|n\rangle$  mit vorläufig beliebigem  $n$  ein Eigenvektor zu  $\hat{N}$  mit Eigenwert  $n$ , also  $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$ . Man betrachte dann, dass für den neuen Vektor  $\hat{a}^\dagger|n\rangle$  die Eigenvektor-Eigenschaft

$$\hat{N} \left( \hat{a}^\dagger|n\rangle \right) = \hat{a}^\dagger \hat{a} \left( \hat{a}^\dagger|n\rangle \right) = [\hat{N}, \hat{a}^\dagger]|n\rangle + \hat{a}^\dagger \hat{N}|n\rangle = \hat{a}^\dagger|n\rangle + \hat{a}^\dagger n|n\rangle = (n+1) \left( \hat{a}^\dagger|n\rangle \right)$$

gilt, also ist auch  $\hat{a}^\dagger|n\rangle$  ein Eigenvektor von  $\hat{N}$ , allerdings zum Eigenwert  $n+1$ . Völlig analog findet man dann

$$\hat{N} \left( \hat{a}|n\rangle \right) = [\hat{N}, \hat{a}]|n\rangle + \hat{a} \hat{N}|n\rangle = (n-1) \left( \hat{a}|n\rangle \right) ,$$

sodass  $\hat{a}|n\rangle$  ein  $\hat{N}$ -Eigenvektor zum Eigenwert  $n-1$  ist. Per Induktion folgt dann natürlich, dass diese Eigenschaft auch durch wiederholte Anwendung der Operatoren nicht verlorengeht -  $(\hat{a}^\dagger)^2|n\rangle$  ist folglich ein  $\hat{N}$ -Eigenvektor zum Eigenwert  $n+2$ , usw. Man hat also allgemein

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = d_n|n+1\rangle \quad \text{und} \quad \hat{a}|n\rangle = c_n|n-1\rangle ,$$

wobei wir die Normierungsforderung  $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$  für alle  $n, n'$  zur Bestimmung der Vorfaktoren  $c_n$  und  $d_n$  verwenden, also

$$1 = \langle n+1|n+1\rangle = \frac{1}{|d_n|^2} \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \frac{1}{|d_n|^2} \langle n|[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = \frac{n+1}{|d_n|^2} .$$

Somit erhalten wir  $|d_n|^2 = n+1 \iff d_n = \sqrt{n+1}$  bei geeigneter Phasenwahl. Völlig analog findet man den Faktor  $c_n = \sqrt{n}$  für den anderen Operator, sodass wir

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad \text{und} \quad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

erhalten. Mehrmaliges Anwenden der Operatoren  $\hat{a}$  bzw.  $\hat{a}^\dagger$  führt bei der bestimmten Normierung dann zu  $(\hat{a}^\dagger)^2|n\rangle = \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}|n+2\rangle$  bzw.  $\hat{a}^2|n\rangle = \hat{a}\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\sqrt{n-1}|n-2\rangle$ .

Durch den Operator  $\hat{a}$  werden die Eigenwerte von  $\hat{N}$  durch sukzessives Anwenden jeweils um Eins erniedrigt. Die Eigenwerte dieses Operators  $\hat{N}$  können aber nicht negativ sein, sodass für jeden beliebigen seiner Eigenwerte  $\alpha$  gilt

$$\alpha = \langle \alpha|\hat{N}|\alpha\rangle = \langle \alpha|\hat{a}^\dagger \hat{a}|\alpha\rangle = (\hat{a}|\alpha\rangle, \hat{a}|\alpha\rangle) = \|\hat{a}|\alpha\rangle\|^2 \geq 0 .$$

Folglich muss es also einen kleinsten Eigenwert  $n_0$  geben, sodass  $\hat{a}|n_0\rangle = 0$  gilt. Die Normierung der  $\hat{N}$ -Eigenvektoren erzwingt dann, dass  $n_0 = 0$  ist, denn für jeden Eigenzustand  $|n\rangle$  gilt

$$1 = \langle n-1|n-1\rangle = \langle n-1|\hat{a}|n\rangle \frac{1}{\sqrt{n}} \iff \langle n-1|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n} ,$$

für  $n_0$  gilt also einerseits  $\langle n_0-1|\hat{a}|n_0\rangle = \sqrt{n_0}$ , andererseits aber  $\langle n_0-1|\hat{a}|n_0\rangle = 0$ , da es der kleinste Eigenzustand ist, also hat man  $n_0 = 0$ . Der Vektor  $|n_0\rangle =: |0\rangle$  wird als **Grundzustandsvektor** bezeichnet, wobei  $\langle 0|0\rangle = 1$  die Normierung ist. Dann ergeben sich alle Eigenvektoren durch von  $\hat{N}$  ausgehend von  $|0\rangle$  durch sukzessive Anwendung von  $\hat{a}^\dagger$ , also

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \quad \text{für } n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Damit sind alle Eigenwerte und Eigenvektoren von  $\hat{N}$  konstruiert, und man kann durch sie über

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\hat{N}|n\rangle + \hbar\omega\frac{1}{2}|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle =: E_n|n\rangle$$

direkt auf die Eigenwerte und -Vektoren von  $\hat{H}$  schließen. Wegen ihrer Eigenschaft bezüglich der  $\hat{N}$ - und  $\hat{H}$ -Eigenwerte werden die Operatoren  $\hat{a}$  und  $\hat{a}^\dagger$  oft als **Leiter-Operatoren** bezeichnet. Im Rahmen der Quantenfeldtheorie tauchen sie in ähnlicher Form als Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren wieder auf, umgekehrt bezeichnet man sie hier deshalb auch als „Vernichtungs- und Erzeugungs-Operatoren vom Anregungsquantum  $\hbar\omega$ “. Mit

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

erhalten wir jedenfalls, dass ein rein diskretes Spektrum vorliegt, was aber nach den Potentialbeispielen des vorigen Abschnitts nicht weiter überrascht.

### 14.3.3. Konkrete Darstellungen

Nachdem wir die Zustände des quantenmechanischen harmonischen Oszillators kennen, wollen wir nun konkreten Darstellungen der Wellenfunktionen ermitteln. In der Ortsdarstellung gilt  $|n\rangle \rightarrow \langle x|n\rangle =: \psi_{E_n}(x)$  mit  $\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle$ . Man betrachte dabei speziell den Grundzustand  $n = 0$ , hier gilt

$$\psi_{E_0}(x) = \psi_0(x) = \langle x|0\rangle .$$

Da aber  $|0\rangle$  durch die Eigenschaft  $\hat{a}|0\rangle = 0$  definiert war, folgt  $\langle x|\hat{a}|0\rangle = 0$  und mit der Definition  $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\omega\hbar}}(\omega\hat{X} + i\hat{P})$  des Operators folgt

$$\sqrt{2\omega\hbar} \int dx' \langle x|\hat{a}|x'\rangle \langle x'|0\rangle = \int dx' \langle x|\omega\hat{X} + i\hat{P}|x'\rangle \psi_0(x') = 0 .$$

Mit den Ortsdarstellungen  $\langle x|\hat{X}|x'\rangle = x'\delta(x-x')$  und  $\langle x|\hat{P}|x'\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\delta(x-x')$  gilt

$$\begin{aligned} 0 &= \int dx' \left[ \omega(x'\delta(x-x')) + i\left(\hbar\frac{d}{dx'}\delta(x-x')\right) \right] \psi_0(x') = 0 \\ &\stackrel{\text{P.I.}}{=} \int dx' \delta(x-x') \left( \omega x' + \hbar\frac{d}{dx'} \right) \psi_0(x') = \left( \omega x + \hbar\frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) \\ &\iff \frac{d}{dx}\psi_0(x) = -\frac{\omega}{\hbar}x\psi_0(x) , \end{aligned}$$

dies ist eine lineare Differentialgleichung erster Ordnung. Im Ansatz  $\psi_0(x) = C \exp\left(-\frac{\omega}{\hbar} \frac{x^2}{2}\right)$  lässt sich die Konstante  $C$  aus der Normierungsbedingung zu

$$\begin{aligned} 1 = \langle 0|0 \rangle &= \int dx \langle 0|x \rangle \langle x|0 \rangle = \int dx |\psi_0(x)|^2 = |C|^2 \int dx \exp\left(-\frac{\omega}{\hbar} \frac{x^2}{2}\right) \\ &= |C|^2 \int dy e^{-y^2} \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}} = |C|^2 \sqrt{\frac{\pi \hbar}{\omega}} \iff C = \sqrt[4]{\frac{\omega}{\hbar \pi}} \end{aligned}$$

bestimmen, die Wellenfunktion des Grundzustands lautet in Ortsdarstellung also

$$\psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{\omega}{\hbar \pi}} \exp\left(-\frac{\omega}{\hbar} \frac{x^2}{2}\right),$$

dies ist eine Gauß-Funktion um  $x = 0$  mit der Breite  $\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}}$ . Die angeregten Zustände ergeben sich durch die Anwendung des Leiter-Operators  $\hat{a}^\dagger$  dann mittels  $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle$  aus diesem Zustand, man erhält in Ortsdarstellung

$$\begin{aligned} \langle x|n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x|(\hat{a}^\dagger)^n |0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \int dx' \langle x|(\hat{a}^\dagger)^n |x' \rangle \langle x'|0 \rangle \\ \iff \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{2^n n! \cdot x_0}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left[\frac{x}{x_0}\right]^2\right) H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \quad \text{mit} \quad x_0 := \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}}, \end{aligned}$$

wobei  $H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)$  die sogenannten Hermiteschen Polynome bezeichnet, die durch

$$H_n(x) := \frac{n!}{2\pi i} \oint e^{-t^2+2tx} t^{-n-1} dt = \left[ e^{x^2} \frac{d^n}{dt^n} e^{-(x-t)^2} \right] \Big|_{t=0} = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

definiert sind.

**Bemerkung:** Die betrachteten Eigenzustände  $|n\rangle$  waren Energie-Eigenzustände, also insbesondere stationär und deshalb mit trivialer Zeitentwicklung  $|\psi, t\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) |E_n\rangle$ . Der Erwartungswert  $\langle n|\hat{O}|n\rangle$  einer beliebigen Observablen ist deshalb zeitlich konstant. Durch geeignete Überlagerung verschiedener  $|n\rangle$ -Vektoren kann man aber wellenartige Zustände konstruieren, die zeitlich oszillieren.

# 15. Symmetrien in der Quantenmechanik und der Drehimpuls

## 15.1. Allgemeines über Symmetrietransformationen

In der klassischen Mechanik haben wir bereits ausführlich (vgl. Kapitel 3 ab Seite 42) Symmetrien und Erhaltungssätze behandelt. Eines der wichtigsten Bindeglieder ist dabei das Noether-Theorem, welches mathematischen Symmetriegruppen Erhaltungsgrößen zuordnet. Man fragt sich jetzt natürlich, inwieweit sich diese Ergebnisse auf die Quantenmechanik übertragen lassen.

### 15.1.1. Darstellung von Symmetrietransformationen im Zustandsraum

Man betrachte eine beliebige Transformation des Systems. Operativ bedeutet dies, dass die Apparate, die den Zustand des Systems präparieren bzw. die Observablen definieren (Messgeräte) entsprechend transformiert werden, z.B. durch eine Verschiebung um  $\vec{a}$ , eine Drehung um die Achse  $\hat{n}$  mit Winkel  $\varphi$ , eine Spiegelung am Ursprung, die Vertauschung aller Ladungen, etc. Man formuliert dies in der Quantenmechanik allgemein als

$$|\psi\rangle \rightarrow T[|\psi\rangle] =: |\psi'\rangle \quad \hat{O} \rightarrow T[\hat{O}] =: \hat{O}' .$$

Genau wie in der klassischen Mechanik ist  $T$  eine Symmetrietransformation, wenn sich dabei alle physikalischen Eigenschaften des Systems nicht ändern, d.h. wenn alles Messbare invariant ist, also  $|\langle\varphi|\psi\rangle|^2 = |\langle\varphi'|\psi'\rangle|^2$ . Betrachten wir dies genauer.

Ein Zustand wird durch den Zustandsstrahl  $|\tilde{\psi}\rangle := \{e^{i\varphi}|\psi\rangle : \varphi \in \mathbb{R}\}$  beschrieben, sodass eine Transformation  $T$  im Grunde eine Transformation

$$|\tilde{\psi}\rangle \rightarrow T[|\tilde{\psi}\rangle] =: |\tilde{\psi}'\rangle$$

zwischen Strahlen ist. Die Übergangswahrscheinlichkeiten  $|\langle\varphi|\psi\rangle|^2$  werden ermittelt, indem man aus den Strahlen  $|\tilde{\varphi}\rangle$  und  $|\tilde{\psi}\rangle$  jeweils einen repräsentativen Ket-Vektor auswählt und das Skalarprodukt dieser bildet. Man beachte, dass es ohne weiteres nicht trivial ist, aus der Zuordnung von Strahlen Aussagen über die Zuordnung einzelner Ket-Vektoren zu treffen. Aus der Funktionalanalysis ist aber bekannt:

**Satz 21 (Wigner):** *Wenn zwischen den Strahlen des Hilbertraums  $\mathcal{H}$  eine bijektive Zuordnung  $|\tilde{\psi}\rangle \rightarrow |\tilde{\psi}'\rangle \subset \mathcal{H}$  existiert, sodass für zwei beliebige Strahlen  $|\langle\varphi|\psi\rangle|^2 = |\langle\varphi'|\psi'\rangle|^2$  gilt, so kann durch geeignete Phasenwahl innerhalb des jeweiligen Strahls eine Zuordnung der einzelnen Vektoren des Hilbertraums durch*

$$|\varphi\rangle \rightarrow |\varphi'\rangle \quad \text{und} \quad |\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle$$

definiert werden, welche entweder durch einen linear-unitären Operator  $\hat{U}$  oder einen antilinear-antiunitären Operator  $\hat{\mathcal{U}}$  beschrieben wird. Diese Operatoren  $\hat{U}$  bzw.  $\hat{\mathcal{U}}$  sind bis auf eine Phase eindeutig.

**Bemerkung:** Der Unterschied zwischen linear-unitären und antilinear-antiunitären Operatoren sieht wie folgt aus:

- Linear-unitär: Es gilt  $\hat{U}(\alpha_1|\psi_1\rangle + \alpha_2|\psi_2\rangle) = \alpha_1\hat{U}(|\psi_1\rangle) + \alpha_2\hat{U}(|\psi_2\rangle)$  und  $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$ , wobei der adjungierte Operator durch

$$\langle\varphi|(\hat{U}|\psi\rangle) = \left(\langle\psi|(\hat{U}^\dagger|\varphi\rangle)\right)^*$$

definiert ist, es folgt  $\langle\varphi'|\psi'\rangle = \langle\varphi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle$ , also gilt  $|\langle\varphi'|\psi'\rangle|^2 = |\langle\varphi|\psi\rangle|^2$ .

- Antilinear-antiunitär: Hier ist  $\hat{\mathfrak{U}}(\alpha_1|\psi_1\rangle + \alpha_2|\psi_2\rangle) = \alpha_1^*\hat{\mathfrak{U}}(|\psi_1\rangle) + \alpha_2^*\hat{\mathfrak{U}}(|\psi_2\rangle)$  und  $\hat{\mathfrak{U}}^{-1} = \hat{\mathfrak{U}}^\dagger$ , wobei der Adjungierte durch

$$\langle\varphi|(\hat{\mathfrak{U}}|\psi\rangle) = \langle\psi|(\hat{\mathfrak{U}}^\dagger|\varphi\rangle)$$

definiert ist, und deshalb  $\langle\varphi'|\psi'\rangle = \langle\varphi'|\hat{\mathfrak{U}}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{\mathfrak{U}}^\dagger|\varphi'\rangle = \langle\psi|\hat{\mathfrak{U}}^\dagger\hat{\mathfrak{U}}|\varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle$  gilt, also gilt auch hier folglich die Gleichheit  $|\langle\varphi'|\psi'\rangle|^2 = |\langle\varphi|\psi\rangle|^2$ .

### 15.1.2. Eigenschaften linear-unitärer Symmetrietransformationen

Ab jetzt wollen wir nur noch linear-unitäre Symmetrietransformationen betrachten. Da die Erwartungswerte von Observablen unter Symmetrietransformationen erhalten bleiben sollen,

$$\langle\psi'|\hat{O}'|\psi'\rangle \stackrel{!}{=} \langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle,$$

muss dann wegen  $\langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{O}'\hat{U}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle$  für alle Zustände  $|\psi\rangle$  offenbar die Transformationsbeziehung  $\hat{U}^\dagger\hat{O}'\hat{U} = \hat{O} \iff \hat{O}' = \hat{U}\hat{O}\hat{U}^\dagger$  gelten. Da das Spektrum eines selbstadjungierten Operators unter einer unitären Transformation erhalten bleibt, hat dann folglich auch  $\hat{O}'$  dasselbe Spektrum wie  $\hat{O}$ .

Ein weiterer Aspekt ist die Zeitentwicklung: Transformierte Zustandsvektoren müssen dieselbe Zeitentwicklung zeigen, wie die ursprünglichen, d.h. aus der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi, t_0; t\rangle = \hat{H}|\psi, t_0; t\rangle \quad \text{muss folgen} \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi', t_0; t\rangle = \hat{H}|\psi', t_0; t\rangle.$$

Mit  $|\psi', t\rangle = \hat{U}|\psi, t\rangle$  ist dann durch Einsetzen und Nachrechnen gemäß

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi', t\rangle &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}|\psi, t\rangle = \hat{U}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi, t\rangle = \hat{U}\hat{H}|\psi, t\rangle = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi, t\rangle \\ &= \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger|\psi', t\rangle \stackrel{!}{=} \hat{H}|\psi', t\rangle \end{aligned}$$

schnell die Bedingung  $\hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger = \hat{H} \iff \hat{U}\hat{H} = \hat{H}\hat{U} \iff [\hat{H}, \hat{U}] = 0$  gefunden. Der zu einer beliebigen Symmetrietransformation  $T$  gehörende unitäre Operator  $\hat{U} = \hat{U}(T)$  muss also mit dem Hamilton-Operator  $\hat{H}$  kommutieren.

### 15.1.3. Symmetriegruppen und das quantenmechanische Noether-Theorem

Wie schon in der klassischen Mechanik treten Symmetrietransformationen im Allgemeinen gruppenweise auf, d.h. es gibt im Allgemeinen eine ganze Symmetriegruppe  $G = \{T_1, \dots, T_k, \dots\}$ . Die zugehörigen unitären Operatoren erfüllen dabei

$$\hat{U}(T_i)\hat{U}(T_j) = \hat{U}(T_k)e^{i\omega(T_i, T_j, T_k)} \quad \text{und} \quad \hat{U}(T_i^{-1}) = \hat{U}^{-1}(T_i)$$

Die Zuordnung  $T_i \mapsto \hat{U}(T_i)$  ist dann eine lineare **unitäre Darstellung** der Gruppe  $G$ , nähere Details finden sich in der Darstellungstheorie<sup>1</sup> oder Abhandlungen über Lie-Gruppen in der Mathematik. Es gibt dann zwei Möglichkeiten:

- $\hat{U}(T)$  *selbstadjungiert*: Ist jeder Operator  $\hat{U}(T)$  auch selbstadjungiert, also  $\hat{U}(T) = \hat{U}^\dagger(T)$ , dann würde  $\hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^2 = \mathbb{1}$  folgen, d.h. die Operatoren beschreiben Spiegelungen und die Symmetriegruppe  $G = \{\hat{U}, \mathbb{1}\}$  besteht nur aus zwei Elementen.

$G$  ist also eine endliche Symmetriegruppe, und weiter  $U$  eine Observable, da durch einen selbstadjungierten Operator  $\hat{U}$  beschrieben. Insbesondere ist  $U$  dann wegen  $[\hat{U}, \hat{H}] = 0$  eine Erhaltungsgröße.

**Beispiel:** Sei  $T$  die Transformation der Raumspiegelung, die klassisch durch  $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$  definiert ist. Der zugehörige unitäre Operator  $\hat{U}(T) = \hat{\mathcal{P}}$  ist dann entsprechend durch  $\hat{\mathcal{P}}|\vec{r}\rangle = |-\vec{r}\rangle$  definiert, was

$$\hat{\mathcal{P}}^2|\vec{r}\rangle = |\vec{r}\rangle$$

impliziert. Diese Symmetrietransformation wird oft als *Parität* bezeichnet und hat in der Elementarteilchenphysik wichtige Bedingung.

- $\hat{U}(T)$  *nicht selbstadjungiert*: Ist der dargestellte unitäre Operator nicht automatisch selbstadjungiert, dann muss die Gruppe  $G$  kontinuierlich-unendlich sein, es handelt sich also um eine  $s$ -dimensionale Lie-Gruppe, die durch  $G = \{T(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_s) : \varepsilon_j \in \mathbb{R}\}$  parametrisiert wird. Zur Abkürzung definieren wir

$$\hat{U}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_s) := \hat{U}(T(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_s)) \quad \text{mit} \quad \hat{U}(0, \dots, 0) = \mathbb{1} .$$

Man kann dann auch infinitesimale Transformationen betrachten, wobei wir uns der Einfachheit wegen auf eine eindimensionale Betrachtung beschränken. Durch Taylorentwicklung gilt

$$\hat{U}(\varepsilon) = \hat{U}(0) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \varepsilon \hat{A} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{A} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) ,$$

für infinitesimales  $\varepsilon$  gilt also  $\hat{U}(\varepsilon) = 1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{A}$ . Außerdem ist der Operator  $\hat{A}$  selbstadjungiert, wie man durch

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{A}\right) \left(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{A}^\dagger\right) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon (\hat{A} - \hat{A}^\dagger) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \stackrel{!}{=} \mathbb{1}$$

schnell überprüft, es muss also  $\hat{A} - \hat{A}^\dagger = 0 \iff \hat{A} = \hat{A}^\dagger$  sein. Also ist  $\hat{A}$  insbesondere eine Observable und da außerdem  $0 = [\hat{U}, \hat{H}] = [(1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{A}), \hat{H}] = -\frac{i}{\hbar} \varepsilon [\hat{A}, \hat{H}] \iff [\hat{A}, \hat{H}] = 0$  gilt, ist  $A$  auch eine Erhaltungsgröße. Ist dann die Dimension der Lie-Gruppe  $s > 1$ , so findet man ganz analog

$$\hat{U}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_s) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \left(\varepsilon_1 \hat{A}_1 + \dots + \varepsilon_s \hat{A}_s\right) ,$$

wobei alle  $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_s$  ebenfalls selbstadjungiert sind und wegen  $[\hat{A}_i, \hat{H}] = 0$  für alle  $i$  Erhaltungsgrößen darstellen. Man bezeichnet diese Operatoren  $\hat{A}_i$  dann auch als **Generatoren der Symmetrie**.

<sup>1</sup>Für nähere Informationen siehe beispielsweise das Vorlesungsskript „Symmetrien in der Physik“, zu finden unter der Webadresse <http://www.study.brimspark.de>.

**Satz 22 (Quantenmechanisches Noether-Theorem):** Zu jeder  $s$ -parametrisierten kontinuierlichen Symmetrie-Lie-Gruppe  $G$  gehören  $s$  Erhaltungsgrößen, die durch die Generatoren  $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_s$  repräsentiert werden.

**Bemerkung:** Man beachte noch, dass sich eine endliche kontinuierliche Transformation umgekehrt aus den infinitesimalen Transformationen durch Exponentiation ergibt, also

$$\hat{U}(\varepsilon) = \hat{U}\left(\frac{\varepsilon}{N}\right) \cdots \hat{U}\left(\frac{\varepsilon}{N}\right) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \frac{\varepsilon}{N} \hat{A} \right)^N = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{A}\right).$$

## 15.2. Anwendungsbeispiel: Translationen und Rotationen

Wie wir es bereits in der klassischen Mechanik tätigten, werden wir nun die klassischen Beispiele für Symmetrietransformationen noch einmal im Rahmen der Quantenmechanik untersuchen.

### 15.2.1. Räumliche Translationen

Das System sei invariant unter der Symmetriegruppe der räumlichen Translationen, also unter  $G = \{T_{\vec{a}} : \vec{a} \in \mathbb{R}^3\}$ , wobei klassisch  $\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \vec{a}$  gilt. Der zugehörige unitäre Operator sei  $\hat{U}(T_{\vec{a}}) =: \hat{T}_{\vec{a}}$ , wobei der Operator  $\hat{T}_{\vec{a}}$  durch seine Wirkung auf die Ortseigenvektoren gemäß

$$\hat{T}_{\vec{a}}|\vec{r}\rangle = |\vec{r} + \vec{a}\rangle$$

für alle  $\vec{a}$  definiert sei. Für die Wirkung auf beliebige Ket-Vektoren  $|\psi\rangle$  folgt durch Basiswechsel

$$\hat{T}_{\vec{a}}|\psi\rangle = \hat{T}_{\vec{a}} \iiint d^3\vec{r}' |\vec{r}'\rangle \langle \vec{r}' | \psi \rangle = \iiint d^3\vec{r}' \hat{T}_{\vec{a}}|\vec{r}'\rangle \langle \vec{r}' | \psi \rangle \stackrel{\vec{r}' + \vec{a} = \vec{r}''}{=} \iiint d^3\vec{r}'' |\vec{r}''\rangle \langle \vec{r}'' - \vec{a} | \psi \rangle,$$

in Ortsdarstellung gilt also für einen transformierten Zustandsvektor  $|\psi'\rangle =: |\psi\rangle_{\vec{a}}$

$$\psi_{\vec{a}}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle_{\vec{a}} = \iiint d^3\vec{r}'' \langle \vec{r} | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' - \vec{a} | \psi \rangle = \langle \vec{r} - \vec{a} | \psi \rangle = \psi(\vec{r} - \vec{a}).$$

Wir berechnen dann den Erwartungswert  $\hat{T}_{\vec{a}}$  für den Zustand  $|\psi\rangle$ , es findet sich

$$\langle \psi | \hat{T}_{\vec{a}} | \psi \rangle = \iiint d^3\vec{r} \langle \psi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \hat{T}_{\vec{a}} | \psi \rangle = \iiint d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r} - \vec{a}).$$

Falls nun die Translation  $\vec{a}$  infinitesimal ist, so erhält man mit Taylorentwicklung

$$\psi(\vec{r} - \vec{a}) = \psi(\vec{r}) - \vec{a} \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) + \mathcal{O}(\vec{a}^2) \stackrel{\text{inf.}}{=} \psi(\vec{r}) - \frac{i}{\hbar} \vec{a} \left( -i\hbar \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) \right), \quad (15.1)$$

und Einsetzen in den vorigen Term liefert für den Erwartungswert somit

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{T}_{\vec{a}} | \psi \rangle &= \iiint d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) + \iiint d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \left( -\frac{i}{\hbar} \vec{a} \right) \left( -i\hbar \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) \right) \\ &= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \vec{a} \iiint d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \left( -i\hbar \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) \right) = \left\langle \psi \left| \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \vec{a} \hat{P} \right) \right| \psi \right\rangle \end{aligned}$$

Aus der klassischen Mechanik wissen wir, dass die zur Translationsinvarianz gehörende Erhaltungsgröße der Gesamtimpuls ist. In Ortsdarstellung hat der quantenmechanische Impuls-Operator die Form des in (15.1) ausgeklammerten Terms, es gilt also

$$\hat{P} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad \Longrightarrow \quad \hat{P}_{\vec{r}\vec{r}'}^{\hat{X}} = -i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{r}} \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}').$$

Durch die Zusammensetzungsregeln  $T_{a_x} T_{a_y} = T_{a_y} T_{a_x}$  von Translationen in verschiedene Richtungen erhalten wir dann die Vertauschungsrelationen  $[\hat{P}_x, \hat{P}_y] = 0$  für die einzelnen Komponenten des Impuls-Operators.

### 15.2.2. Räumliche Drehungen, Drehimpuls und Spin

Drehungen des Raumes werden entweder durch Angabe einer Drehachse  $\hat{n}$  und dem Winkel  $\varphi$  oder die drei Eulerwinkel  $\alpha, \beta, \gamma$  parametrisiert. Klassisch sind Drehungen als  $\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = R\vec{r}$  definiert, wobei  $R = R_{\hat{n}, \varphi} = R_{\hat{n}}(\varphi) \in \text{SO}(3)$  eine orthogonale  $3 \times 3$ -Drehmatrix ist, also gilt  $R^t R = \mathbb{1} \iff R^{-1} = R^t$ . Für eine Drehung mit Winkel  $\varphi$  um die  $z$ -Achse erhält man so

$$R = R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{infinitesimal: } \varphi \rightarrow \varepsilon} \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

und analog ergeben sich auch die infinitesimalen Rotationsmatrizen für die  $x$ - und  $y$ -Achse

$$R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad R_y(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{pmatrix}.$$

Man beachte dabei, dass es bei der Hintereinanderschaltung von Drehungen um verschiedene Achsen auf die Reihenfolge ankommt. Betrachten wir beispielsweise den Kommutator der infinitesimalen Rotationen um die  $x$ - und  $y$ -Achse, so gilt

$$\begin{aligned} [R_x(\varepsilon), R_y(\varepsilon)] &= R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon) - R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon) \\ &= \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^4}{2} & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 1 - \frac{\varepsilon^4}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \mathbb{1} = R_z(\varepsilon^2) - \mathbb{1}. \end{aligned}$$

Eine Drehung wird im quantenmechanischen Formalismus durch einen unitären Operator  $\hat{U}(T_\varphi) =: \hat{D}(R_\varphi) =: \hat{D}(\varphi)$  beschrieben. Empirisch zeigt sich, dass die Wirkung des Rotationsoperators  $\hat{D}$  bzw. die Darstellung von  $\hat{D}$  im Raum der Wellenfunktionen von der Natur der Teilchen abhängt. Dabei gilt, dass man den meisten Mikrosystemen (also einzelnen Teilchen) einen Drehimpuls zuschreiben muss, der auch im Ruhezustand des Systems nicht verschwindet. Dieser Ruhe-Drehimpuls wird als **Eigendrehimpuls** des Teilchen, **innerer Drehimpuls** oder **Spin** bezeichnet, er äußert sich empirisch durch das magnetische Moment geladener Teilchen. Der Gesamtdrehimpuls  $\vec{J}$  eines solchen Teilchens - dies ist die eigentliche Erhaltungsgröße - ist dann

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S},$$

wobei  $\vec{L}$  den Bahndrehimpuls und  $\vec{S}$  den Spin bezeichnet.

#### Teilchen mit Spin 0

Der Drehungs-Operator  $\hat{D}(R)$  zur  $\text{SO}(3)$ -Drehmatrix  $R$  wird ähnlich wie der Translationsoperator im vorigen Beispiel durch seine Wirkung auf Orts-Eigenvektoren  $|\vec{r}\rangle$  definiert, wobei  $\hat{D}(R)|\vec{r}\rangle = |R\vec{r}\rangle$  gilt. Dabei sei  $|R\vec{r}\rangle$  der Orts-Eigenvektor zum Eigenwert  $R\vec{r}$ . Für die Wirkung auf einen beliebigen Zustandsvektor findet man dann

$$\begin{aligned} \hat{D}(R)|\psi\rangle &= \hat{D}(R) \iiint d^3\vec{r}' |\vec{r}'\rangle \langle \vec{r}' | \psi \rangle = \iiint d^3\vec{r}' \langle \vec{r}' | \psi \rangle |R\vec{r}'\rangle \\ &= \iiint d^3\vec{r}'' \langle R^{-1}\vec{r}'' | \psi \rangle |\vec{r}''\rangle =: |\psi\rangle_R \end{aligned}$$

als gedrehten Zustand. Betrachten wir dann die Ortsdarstellung dieses Zustands, so finden wir

$$\psi_R(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle_R = \iiint d^3\vec{r}'' \langle R^{-1}\vec{r}'' | \psi \rangle \langle \vec{r} | \vec{r}'' \rangle = \langle R^{-1}\vec{r} | \psi \rangle = \psi(R^{-1}\vec{r}) ,$$

für den Erwartungswert des Drehungs-Operators gilt dann insbesondere weiter

$$\langle \psi | \hat{D}(R) | \psi \rangle = \iiint d^3\vec{r} \langle \psi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \hat{D}(R) | \psi \rangle = \iiint d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \psi(R^{-1}\vec{r}) .$$

Speziell für den Fall einer infinitesimalen Rotations-Transformation um die  $z$ -Achse mit der Matrix

$$R_z^{-1}(\varepsilon) = R_z^t(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & \varepsilon & 0 \\ -\varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \implies R_z^{-1}(\varepsilon)\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \varepsilon \begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix}$$

und einer Taylor-Entwicklung der Wellenfunktion in Orts-Darstellung

$$\psi(R_z^{-1}(\varepsilon)\vec{r}) = \psi(\vec{r}) + \varepsilon y \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}) - \varepsilon x \frac{\partial}{\partial y} \psi(\vec{r}) = \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \left[ y \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) - x \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] \right) \psi(\vec{r})$$

folgt dann für den Erwartungswert der  $z$ -Rotation

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{D}(R_z) | \psi \rangle &= \iiint d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \left[ y \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) - x \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] \right) \psi(\vec{r}) \\ &= \iiint d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \left[ \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \left( \hat{X} \hat{P}_y - \hat{Y} \hat{P}_x \right) \right] \psi(\vec{r}) = \left\langle \psi \left| \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_z \right) \right| \psi \right\rangle , \end{aligned}$$

wobei  $\hat{J}_z$  der Generator der Drehungen um die  $z$ -Achse ist. Insbesondere ist dann durch Identifikation des Bahndrehimpulses als Generator von Rotationen aus der klassischen Mechanik  $\hat{J}_z = \hat{L}_z$  der Operator des Bahndrehimpulses, analoges gilt für die Herleitung von  $\hat{L}_x$  und  $\hat{L}_y$ . Für endliche Drehungen um die  $z$ -Achse um einen Winkel  $\varphi$  gilt dann die Exponentialdarstellung

$$\hat{D}(R_z(\varphi)) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{L}_z\right) \quad \text{und allgemein} \quad \hat{D}(R_{\hat{n}}(\varphi)) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{n} \hat{L}\right) .$$

### Teilchen mit Spin ungleich 0

Untersuchen wir nun was sich ändert, wenn der Eigendrehimpuls eines betrachteten Teilchens nicht verschwindet. Tatsache ist, dass man zu jedem Spin  $s$  eine andere unitäre Darstellung der Symmetriegruppe der Drehungen erhält. Allgemein gilt

$$|\psi\rangle \rightarrow \hat{D}(R_\varphi) |\psi\rangle = \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{J} \right) |\psi\rangle ,$$

und bei Symmetrie unter Drehungen ist der Gesamtdrehimpuls eine Erhaltungsgröße. Man kann dann die Vertauschungsrelationen der  $\hat{J}_i$ -Operatorkomponenten bestimmen, die folgen aus der Zusammensetzungsregel

$$R_y(\varepsilon) R_x(\varepsilon) - R_x(\varepsilon) R_y(\varepsilon) = R_z(\varepsilon^2) - \mathbb{1}$$

infinitesimaler Drehungen, also gilt auch analog für die Operatoren

$$\begin{aligned}
 \hat{D}(R_y(\varepsilon))\hat{D}(R_x(\varepsilon)) - \hat{D}(R_y(\varepsilon))\hat{D}(R_x(\varepsilon)) &= \hat{D}(R_z(\varepsilon^2)) - \mathbb{1} \\
 \iff \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{J}_y \right) \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{J}_x \right) - \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{J}_x \right) \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{J}_y \right) \\
 &= \left[ \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon(\hat{J}_y + \hat{J}_x) - \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2}\hat{J}_y\hat{J}_x \right] - \left[ \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon(\hat{J}_x + \hat{J}_y) - \frac{\varepsilon^2}{\hbar^2}\hat{J}_x\hat{J}_y \right] = -\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2}[\hat{J}_x, \hat{J}_y] \\
 &\stackrel{!}{=} \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\varepsilon^2\hat{J}_z - \mathbb{1} \quad \implies \quad [\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z \quad \text{bzw. allgemein} \quad [\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k .
 \end{aligned}$$

Außerdem kann man den Bahndrehimpuls als  $\hat{L}_i = \epsilon_{imn}\hat{X}_m\hat{P}_n$  schreiben, wobei sich für die Vertauschungsrelationen mit dem Orts- und Impulsoperator

$$[\hat{L}_i, \hat{X}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{X}_k \quad \text{und} \quad [\hat{L}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{P}_k$$

ergibt. Aus  $R\hat{X} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\vec{L}\right)\hat{X}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\vec{L}\right)$  folgt dann über

$$\sum_j R_j r_j \left[ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\vec{L}\right) |\vec{r}\rangle \right] = \hat{X} \left[ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\vec{L}\right) |\vec{r}\rangle \right]$$

ebenfalls die Darstellung  $\hat{D}(R(\vec{\varphi})) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\vec{L}\right)$  für  $s = 0$ .

Bei einer Symmetrietransformation transformieren sich die Observablen-Operatoren gemäß  $\hat{O}' = \hat{U}(T)\hat{O}\hat{U}^\dagger(T)$ , bei Drehung also durch  $\hat{O}' = \hat{D}(R)\hat{O}\hat{D}^\dagger(R)$ . Man bezeichnet insbesondere eine Observable als **drehinvariant**, wenn

$$\hat{O} = \hat{D}(R)\hat{O}\hat{D}^\dagger(R) \quad \text{oder} \quad [\hat{O}, \hat{D}(R)] = 0 \iff [\hat{O}, \hat{J}_i] = 0 \quad \text{für } i = 1, 2, 3$$

gilt. Demnach folgt aus  $[\hat{H}, \hat{J}_i] = 0$  also nicht nur, dass die Drehimpulskomponente  $J_i$  eine Erhaltungsgröße ist, sondern auch, dass der Hamilton-Operator drehinvariant ist.

## 15.3. Eigenwerte und Eigenvektoren des Drehimpulses

### 15.3.1. Inkompatibilität der Komponenten, Leiteroperatoren

Die Bestimmung der Eigenzustände des Drehimpulses verläuft ähnlich wie beim harmonischen Oszillator durch Konstruktion von Leiter-Operatoren. Wir betrachten dazu ganz allgemein einen Satz von drei Operatoren  $\hat{J}_1, \hat{J}_2$  und  $\hat{J}_3$  mit den Vertauschungsrelationen

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k .$$

Es gilt dann unter Verwendung dieser Kommutatoren ebenfalls allgemein, dass das Längenquadrat  $\hat{J}^2 := \hat{J}^2 = \hat{J}_m\hat{J}_m$  dieses Operators mit jeder Komponente  $\hat{J}_i$  kommutiert, denn es gilt

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = [\hat{J}_m\hat{J}_m, \hat{J}_i] = \hat{J}_m[\hat{J}_m, \hat{J}_i] + [\hat{J}_m, \hat{J}_i]\hat{J}_m = i\hbar\epsilon_{mik}(\hat{J}_m\hat{J}_k + \hat{J}_k\hat{J}_m) = 0 ,$$

da  $\epsilon_{mik}$  antisymmetrisch unter Vertauschung von  $m$  und  $k$  ist, während  $\hat{J}_m\hat{J}_k + \hat{J}_k\hat{J}_m$  symmetrisch ist. Demnach kann man gemeinsame Eigenvektoren von  $\hat{J}^2$  und einer beliebigen Komponente  $\hat{J}_i$  bilden. Man wähle  $\hat{J}_i = \hat{J}_z$ , d.h. wir betrachten die gemeinsamen Eigenvektoren  $|\lambda, j_z\rangle$  von  $\hat{J}^2$  und  $\hat{J}_z$ , sodass

$$\hat{J}^2|\lambda, j_z\rangle = \hbar^2\lambda|\lambda, j_z\rangle \quad \text{und} \quad \hat{J}_z|\lambda, j_z\rangle = \hbar j_z|\lambda, j_z\rangle$$

gilt. Man bestimme nun die möglichen Werte von  $\lambda$  und  $j_z$  und konstruiere die zugehörigen Eigenvektoren  $|\lambda, j_z\rangle$  dann orthonormiert. Dazu definieren wir die Operatoren

$$\hat{J}^\pm := \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \quad \text{mit} \quad (\hat{J}^+)^\dagger = \hat{J}^- ,$$

welche den folgenden Vertauschungsrelationen genügen:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_z, \hat{J}^\pm] &= [\hat{J}_z, \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y] = [\hat{J}_z, \hat{J}_x] \pm i[\hat{J}_z, \hat{J}_y] = \pm\hbar\hat{J}^\pm , \\ [\hat{J}^2, \hat{J}^\pm] &= 0 \quad \text{und} \quad [\hat{J}^+, \hat{J}^-] = 2\hbar\hat{J}_z . \end{aligned}$$

Man betrachte dann einen beliebigen gemeinsamen Eigenvektor  $|\lambda, j_z\rangle$  von  $\hat{J}^2$  und  $\hat{J}_z$  und bilde  $\hat{J}^\pm|\lambda, j_z\rangle$ . Für das Längenquadrat gilt dann

$$\hat{J}^2 \left( \hat{J}^\pm |\lambda, j_z\rangle \right) = \left( [\hat{J}^2, \hat{J}^\pm] + \hat{J}^\pm \hat{J}^2 \right) |\lambda, j_z\rangle = \hbar^2 \lambda \left( \hat{J}^\pm |\lambda, j_z\rangle \right) ,$$

also ist auch  $\hat{J}^\pm|\lambda, j_z\rangle$  ein Eigenvektor von  $\hat{J}^2$  zum Eigenwert  $\lambda$ . Für die Anwendung des Operators  $\hat{J}_z$  auf diesen Vektor findet man

$$\hat{J}_z \left( \hat{J}^\pm |\lambda, j_z\rangle \right) = \left( [\hat{J}_z, \hat{J}^\pm] + \hat{J}^\pm \hat{J}_z \right) |\lambda, j_z\rangle = \hbar(j_z \pm 1) \left( \hat{J}^\pm |\lambda, j_z\rangle \right) ,$$

d.h. die Operatoren  $\hat{J}^\pm$  erhöhen bzw. verringern den Eigenwert von  $\hat{J}_z$  um Eins. Daher werden die Operatoren  $\hat{J}^\pm$  analog zum harmonischen Oszillator auch **Leiter-Operatoren** genannt, und für einen Eigenvektor  $|\lambda, j_z\rangle$  hat man

$$\dots \xleftarrow{\hat{J}^-} |\lambda, j_z - 1\rangle \xleftarrow{\hat{J}^-} |\lambda, j_z\rangle \xrightarrow{\hat{J}^+} |\lambda, j_z + 1\rangle \xrightarrow{\hat{J}^+} |\lambda, j_z + 2\rangle \xrightarrow{\hat{J}^+} \dots$$

### 15.3.2. Normierung der gemeinsamen Eigenvektoren

Als nächstes kümmern wir uns um die Normierung. Dazu betrachte wir die Wirkung der  $\hat{J}^\pm$ -Operatoren auf die gemeinsamen Eigenvektoren als

$$\hat{J}^\pm |\lambda, j_z\rangle = N_\pm |\lambda, j_z \pm 1\rangle .$$

Die  $N_\pm$  lassen sich aus der Normierungsbedingung  $\langle \lambda, j_z | \lambda', j'_z \rangle = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{j_z j'_z}$  über

$$|N_\pm|^2 = \langle \lambda, j_z \pm 1 | \lambda, j_z \pm 1 \rangle = \langle \lambda, j_z | \hat{J}^\mp \hat{J}^\pm | \lambda, j_z \rangle$$

bestimmen. Verwendet man dazu die Identität

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 = (\hat{J}_x \mp i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y) \mp i[\hat{J}_x, \hat{J}_y] + \hat{J}_z^2 = \hat{J}^\mp \hat{J}^\pm \pm \hbar\hat{J}_z + \hat{J}_z^2 ,$$

also  $\hat{J}^\mp \hat{J}^\pm = \hat{J}^2 \mp \hbar\hat{J}_z - \hat{J}_z^2$ , so ergibt sich weiter für die Normierungsfaktoren

$$|N_\pm|^2 = \langle \lambda, j_z | \hat{J}^2 \mp \hbar\hat{J}_z - \hat{J}_z^2 | \lambda, j_z \rangle = \hbar^2 (\lambda - j_z^2 \mp j_z) \langle \lambda, j_z | \lambda, j_z \rangle$$

und damit nach der Phasenwahl von Condon und Shortley  $N_\pm = \hbar\sqrt{\lambda - j_z^2 \mp j_z}$ . Damit lautet die Wirkung der passend normierten Drehimpuls-Leiteroperatoren

$$\hat{J}^\pm |\lambda, j_z\rangle = \hbar\sqrt{\lambda - j_z^2 \mp j_z} |\lambda, j_z \pm 1\rangle$$

Andererseits gilt aber auch

$$|N_{\pm}|^2 = \langle \lambda, j_z | \hat{J}^{\mp} (\hat{J}^{\pm} |\lambda, j_z\rangle) = \|\hat{J}^{\pm} |\lambda, j_z\rangle\|^2 \geq 0,$$

also ist  $\lambda - j_z^2 - j_z \geq 0$  und gleichzeitig  $\lambda - j_z^2 + j_z \geq 0$ . Man gehe zunächst davon aus, dass  $\lambda \geq 0$  ist und setze dann  $\lambda := j(j+1)$  für geeignetes  $j \geq 0$ . Dann muss gelten

$$\begin{aligned} & j(j+1) - j_z(j_z+1) \geq 0 & j(j+1) - j_z(j_z-1) \geq 0 \\ \iff & j(j+1) + \frac{1}{4} \geq j_z(j_z+1) + \frac{1}{4} & j(j+1) + \frac{1}{4} \geq j_z(j_z-1) + \frac{1}{4} \\ \iff & (j + \frac{1}{2})^2 \geq (j_z + \frac{1}{2})^2 & (j + \frac{1}{2})^2 \geq (j_z - \frac{1}{2})^2 \\ \iff & -|j + \frac{1}{2}| \leq j_z + \frac{1}{2} \leq j + \frac{1}{2} & -|j + \frac{1}{2}| \leq j_z - \frac{1}{2} \leq j + \frac{1}{2} \\ \iff & -j - \frac{1}{2} \leq j_z + \frac{1}{2} \leq j + \frac{1}{2} & -j - \frac{1}{2} \leq j_z - \frac{1}{2} \leq j + \frac{1}{2} \\ \iff & -j - 1 \leq j_z \leq j & -j \leq j_z \leq j + 1 \end{aligned},$$

insgesamt also  $-j \leq j_z \leq j$ . Mit anderen Worten muss also bei vorgegebenem  $\lambda = j(j+1)$  bzw.  $j$  kann  $j_z$  nicht beliebig groß bzw. beliebig klein werden. Betrachtet man andererseits erneut die Wirkung der Leiteroperatoren  $\hat{J}^{\pm}$

$$\dots \xleftarrow{\hat{J}^-} |\lambda, j_z - 1\rangle \xleftarrow{\hat{J}^-} |\lambda, j_z\rangle \xrightarrow{\hat{J}^+} |\lambda, j_z + 1\rangle \xrightarrow{\hat{J}^+} |\lambda, j_z + 2\rangle \xrightarrow{\hat{J}^+} \dots,$$

so kann dies nur dann konsistent sein, wenn bei fortgesetzter Anwendung des Leiter-Operators  $\hat{J}^+$  irgendwann die Reihe abbricht. Dies wieder kann beim Aufstieg nach oben nur so erreicht werden, dass irgendwann der Normierungsfaktor  $N_+ = 0$  wird, also wenn  $j_z(j_z+1) = j(j+1)$  ist, d.h.  $j_z = j$ . Umgekehrt muss auch beim Abstieg, also nach wiederholter Anwendung von  $\hat{J}^-$ , irgendwann einmal  $N_- = 0$  gelten, d.h. es muss  $j_z(j_z-1) = j(j+1)$  und somit  $j_z = -j$  gelten.

Also gibt es bei festem  $\lambda = j(j+1)$  nur die Möglichkeiten  $j_z = -j, -j+1, \dots, j-1, j$  für die  $z$ -Komponente des Drehimpulses, diese repräsentieren  $n$  Schritte, d.h. es muss aus der Breite  $(j_z)_{\max} - (j_z)_{\min} = j - (-j) = n \iff 2j = n$  folgen. Demnach gibt es für  $j$  nur die Möglichkeiten  $j = \frac{n}{2}$  mit  $n = 0, 1, 2, \dots$ , also kann  $j$  nur die Werte  $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$  annehmen, und bei gegebenem  $j$  kann  $j_z$  die Werte  $j_z = -j, -j+1, \dots, j-1, j$  annehmen - man spricht von der **Quantisierung des Drehimpulses**.

### 15.3.3. Allgemeine Form der gemeinsamen Eigenvektoren

Damit ist ein Weg gefunden, um alle gemeinsamen Eigenvektoren  $|\lambda, j_z\rangle =: |j, j_z\rangle$  des Drehimpulsquadrats  $\hat{J}^2$  und der  $z$ -Komponente  $\hat{J}_z$  zu konstruieren:

- $j = 0$ :  $|0, 0\rangle$
- $j = \frac{1}{2}$ :  $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$  und  $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
- $j = 1$ :  $|1, -1\rangle$  und  $|1, 0\rangle$  und  $|1, 1\rangle$
- $j = \frac{3}{2}$ :  $|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$  und  $|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$  und  $|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$  und  $|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$ , usw.

Allgemein gibt es zu jedem  $j$  stets  $2j+1$  verschiedene Eigenvektoren.

Man ermittle nun die Erwartungswerte der restlichen Drehimpuls-Komponenten in diesen Eigenzuständen. Für die  $x$ -Komponente gilt

$$\begin{aligned} \langle j, j_z | \hat{J}_x | j, j_z \rangle &= \frac{1}{2} \langle j, j_z | \hat{J}^+ + \hat{J}^- | j, j_z \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left( N_+ \underbrace{\langle j, j_z | j, j_z + 1 \rangle}_0 + N_- \underbrace{\langle j, j_z | j, j_z - 1 \rangle}_0 \right) = 0, \end{aligned}$$

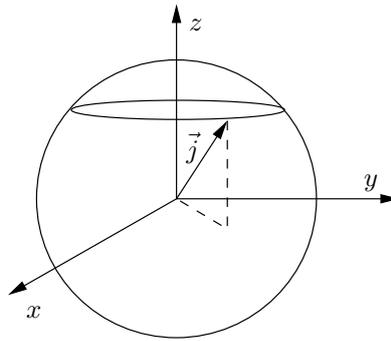
ebenso ist auch die  $y$ -Komponente  $\langle j, j_z | \hat{J}_y | j, j_z \rangle = 0$ . Betrachten wir dann das Quadrat der  $x$ -Komponente, so gilt

$$\langle j, j_z | \hat{J}_x^2 | j, j_z \rangle = \langle j, j_z | \hat{J}_x \hat{J}_x | j, j_z \rangle = \langle j, j_z | \hat{J}_x^+ \hat{J}_x^- | j, j_z \rangle = \|\hat{J}_x | j, j_z \rangle\|^2 \geq 0$$

und mit  $\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2$  gilt außerdem

$$\begin{aligned} \langle j, j_z | \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 | j, j_z \rangle &= \langle j, j_z | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 | j, j_z \rangle = (\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 j_z^2) \langle j, j_z | j, j_z \rangle \\ &= \hbar^2 (j^2 + j - j_z^2) > 0. \end{aligned}$$

Der Drehimpuls-Vektor im Zustand  $|j, j_z\rangle$  lässt sich graphisch wie folgt veranschaulichen:



Der Eigenvektor bewegt sich dabei auf einer Kreisbahn um die  $z$ -Achse, sein Erwartungswert im Bezug auf die übrigen Komponenten ist demnach Null.

## 15.4. Der Bahndrehimpuls

### 15.4.1. Drehimpuls-Operator in Kugelkoordinaten

Die Eigenschaften des Drehimpulses bzw. allgemein eines Satzes von drei Operatoren mit den Vertauschungsrelationen

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k \quad \text{und} \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$$

haben wir im vorigen Abschnitt detailliert untersucht. Die gemeinsamen Eigenvektoren von  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$  sind dabei durch  $|\ell, \ell_z\rangle$  gegeben, sodass man die Eigenwertgleichungen

$$\hat{L}^2 |\ell, \ell_z\rangle = \hbar^2 \ell(\ell+1) |\ell, \ell_z\rangle \quad \text{und} \quad \hat{L}_z |\ell, \ell_z\rangle = \hbar \ell_z |\ell, \ell_z\rangle$$

erhält. Speziell für die Bahndrehimpuls-Komponenten  $\hat{L}_i$  gelten wegen  $\hat{L}_i = \epsilon_{imn}\hat{X}_m\hat{P}_n$  noch die zusätzlichen Vertauschungsrelationen

$$[\hat{L}_i, \hat{X}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{X}_k \quad \text{und} \quad [\hat{L}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{P}_k$$

mit Orts- und Impuls-Operator. Das Ziel soll nun sein, die Orts-Darstellung der gemeinsamen Eigenvektoren  $|\ell, \ell_z\rangle$  zu bestimmen, wobei für dieses Problem hilfreich ist, sphärische Kugelkoordinaten zu verwenden. Die gesuchten Eigenfunktionen sind dann von der Form

$$\psi_{\ell, \ell_z}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \ell, \ell_z \rangle = \langle r, \vartheta, \varphi | \ell, \ell_z \rangle = \psi_{\ell, \ell_z}(r, \vartheta, \varphi) ,$$

wobei für die Darstellung in Kugelkoordinaten bekanntlich der folgende Zusammenhang gilt:

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi \quad z = r \cos \vartheta .$$

Drückt man dann weiter die partiellen Ableitung nach  $x$ ,  $y$  und  $z$  durch jene der Kugelkoordinaten nach  $r$ ,  $\vartheta$  und  $\varphi$  aus, so erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \vartheta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{1}{r} \frac{\sin \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \vartheta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \sin \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r} \frac{\cos \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \vartheta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi} = \cos \vartheta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \end{aligned}$$

Damit erhält man für die Darstellung der Bahndrehimpuls-Operatoren  $\hat{L}_i$  im Bereich der Wellenfunktionen folglich

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = -i\hbar \left( -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_y &= -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cot \vartheta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} , \end{aligned}$$

sie wirken auf Funktionen  $\vec{r} = (r, \vartheta, \varphi)$ , wobei man beachte, dass in Kugelkoordinaten keine Ableitung nach  $r$  auftritt. Man setzt deshalb

$$\psi_{\ell, \ell_z}(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) ,$$

wobei die Radius-Funktion  $R(r)$  beliebig gewählt sein kann, also nicht für die Eigenwertgleichung für  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$  bestimmt ist. Außerdem gilt in Kugelkoordinaten für das Längenquadrat

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x \hat{L}_x + \hat{L}_y \hat{L}_y + \hat{L}_z \hat{L}_z = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) , \quad (15.2)$$

wobei wir und die explizite Kennzeichnung der Orts-Darstellung der Operatoren sparen.

### 15.4.2. Lösung des Eigenwert/-vektor-Problems

Für die Eigenwertgleichung der  $z$ -Komponente  $\hat{J}_z$  ergibt sich in Kugelkoordinaten somit

$$\hat{L}_z Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) = \hbar \ell_z Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) \iff -i \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) = \ell_z Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) .$$

Mit dem Separationsansatz  $Y(\vartheta, \varphi) = \Phi(\varphi)\Theta(\vartheta)$  ergibt sich dann die Lösung

$$Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) = e^{i\ell_z \varphi} \Theta_{\ell, \ell_z}(\vartheta) .$$

Mit dem oben bestimmten Operator  $\hat{L}^2$  des Quadrats des Drehimpulsvektors ergibt sich dann analog als Eigenwertgleichung für  $\hat{L}^2$

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) &= \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) \\ \iff \left( \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\ell_z^2}{\sin^2 \vartheta} + \ell(\ell+1) \right) \Theta_{\ell, \ell_z}(\vartheta) &= 0 \\ \xleftrightarrow{t=\cos \vartheta} \left[ (1-t^2) \frac{d^2}{dt^2} - 2t \frac{d}{dt} + \ell(\ell+1) - \frac{\ell_z^2}{1-t^2} \right] \Theta_{\ell, \ell_z}(t) &= 0, \end{aligned} \quad (15.3)$$

wobei für die partiellen Ableitungen die Umformulierung

$$\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right)$$

verwendet wurde. Diese Differentialgleichung (15.3) ist die Bestimmungsgleichung für die Legendre-Polynome  $P_{\ell, \ell_z}(t)$ , auf die wir gleich zurückkommen werden. Insgesamt erhalten wir also

$$Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) = c_{\ell, \ell_z} e^{i \ell_z \varphi} P_{\ell, \ell_z}(\cos \vartheta)$$

als Lösung des Eigenwertproblems, wobei sich für den Normierungs-Faktor nach längerer Rechnung unter Berücksichtigung der Legendre-Polynome schließlich

$$Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) = (-1)^{\ell_z} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell+\ell_z)!}{(\ell-\ell_z)!}} e^{i \ell_z \varphi} P_{\ell, \ell_z}(\cos \vartheta)$$

ergibt. Hierbei handelt es sich um die sogenannte **Kugelflächenfunktionen**.

**Bemerkung:** Man beachte, dass bisher für  $\ell$  die halbzahligen Werte  $\ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$  möglich waren. Anschaulich lässt nun leicht mit Hilfe der eben ermittelten Form der  $Y_{\ell, \ell_z}$  argumentieren, dass  $\ell_z$  ganzzahlig sein muss, damit die Wellenfunktion unter Drehung von  $\varphi = 2\pi$  eindeutig ist, d.h. es soll

$$Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) = Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi + 2\pi) \quad \implies \quad e^{2\pi i \ell_z} = 1$$

gelten. Also muss  $\ell_z$  ganzzahlig sein - diese einfache Argumentation ist allerdings unvollständig, da nach unseren vorigen Definitionen der gesamte Strahl von Wellenfunktionen physikalisch äquivalent ist, und wir alleine durch eine Phasenwahl argumentieren. Die korrekte Argumentation erfolgt über die zusätzlichen Vertauschungsrelationen der  $\hat{L}_i$  mit den  $\hat{X}_i$  und  $\hat{P}_i$ .

Der Bahndrehimpuls  $\ell$  ist also ganzzahlig und entsprechend dann auch jedes  $\ell_z = -\ell, \dots, \ell$ . Für die einzelnen Bahndrehimpulse wählt man die Bezeichnungen

$$\ell = 0 : S \quad \ell = 1 : P \quad \ell = 2 : D \quad \ell = 3 : F \quad \dots$$

### 15.4.3. Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen

**Definition 23:** Man bezeichnet jeden Satz von drei Operatoren  $\hat{V}_i$  mit  $i = 1, 2, 3$  als **Vektor-Operatoren**, falls für  $\vec{V}_i$  die Vertauschungsrelationen

$$[\hat{L}_i, \hat{V}_j] = i \hbar \epsilon_{ijk} \hat{X}_k$$

mit dem Drehimpuls-Operator erfüllt sind.

Betrachten wir nun weiter die gesamte Eigenfunktion des  $|\ell, \ell_z\rangle$ -Drehimpuls-Zustands

$$\psi_{\ell, \ell_z}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \ell, \ell_z \rangle = \langle r, \vartheta, \varphi | \ell, \ell_z \rangle = Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) \cdot R(r) = N_{\ell, \ell_z} e^{i\ell_z \varphi} P_{\ell, \ell_z}(\cos \vartheta) ,$$

wobei hier die **Legendre-Polynome** durch

$$P_{\ell, m}(t) = \frac{(-1)^m}{2^\ell \ell!} \sqrt{1-t^2} \frac{d^{\ell+m}}{dt^{\ell+m}} (t^2 - 1)^\ell$$

gegeben sind. Zum einen gilt die Beziehung  $Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) = (-1)^{\ell_z} Y_{\ell, \ell_z}^*(\vartheta, \varphi)$  bei Wahl der entgegengesetzten  $z$ -Ausrichtung, sowie für das Verhalten unter Spiegelung  $\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = -\vec{r}$ , d.h.  $\vartheta \rightarrow \pi - \vartheta$  und  $\varphi \rightarrow \varphi + \pi$  in Kugelkoordinaten,

$$Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) = (-1)^{\ell_z} Y_{\ell, \ell_z}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) .$$

Die Menge  $\{Y_{\ell, \ell_z} : \ell = 0, 1, 2, \dots \text{ mit } -\ell \leq \ell_z \leq \ell\}$  bildet einen vollständigen Funktionensatz im Raum der  $(\vartheta, \varphi)$ -abhängigen Wellenfunktionen, d.h. für beliebige Funktionen  $f(\vartheta, \varphi)$  gilt

$$f(\vartheta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{\ell_z=-\ell}^{\ell} a_{\ell, \ell_z} Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) \quad \text{mit} \quad a_{\ell, \ell_z} = \iint d\Omega Y_{\ell, \ell_z}^*(\vartheta, \varphi) f(\vartheta, \varphi) ,$$

wobei  $d\Omega = d(\cos \vartheta) d\varphi$  ist. Für die Kugelflächenfunktionen  $Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi)$  mit  $m := \hbar \ell_z$  gelten also die folgenden Eigenschaften:

$$\text{Orthonormalität:} \quad \iint Y_{\ell m}^*(\Omega) Y_{\ell' m'}(\Omega) d\Omega = \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'}$$

$$\text{Vollständigkeit:} \quad \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}^*(\vartheta_1, \varphi_1) Y_{\ell m}(\vartheta_2, \varphi_2) = \delta(\varphi_1 - \varphi_2) \delta(\vartheta_1 - \vartheta_2) \frac{1}{\sin \vartheta_1}$$

$$\text{Additionstheorem:} \quad P_{\ell}(\cos \vartheta) = \frac{4\pi}{2\ell + 1} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\vartheta_1, \varphi_1) Y_{\ell m}(\vartheta_2, \varphi_2) ,$$

wobei hier  $\vartheta = \hat{n}_1 \cdot \hat{n}_2$ , d.h.  $\cos \vartheta = \cos \vartheta_1 \cos \vartheta_2 + \sin \vartheta_1 \sin \vartheta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)$ , ist.

**Beispiel:** Eine explizite Spezialfälle der Kugelflächenfunktionen sind die Folgenden:

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin \vartheta \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta \quad Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\varphi} \sin \vartheta$$

$$Y_{2,2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{2i\varphi} \sin^2 \vartheta \quad Y_{2,1} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{i\varphi} \sin \vartheta \cos \vartheta \quad Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$$

Allgemein gilt, dass die Kugelflächenfunktion  $Y_{\ell, \ell_z}$  ein Produkt aus  $e^{i\ell_z \varphi} (\sin \vartheta)^{|\ell_z|}$  und einem Polynom vom Grad  $\ell - |\ell_z|$  in  $\cos \vartheta$  ist. Je größer  $\ell$  ist, desto mehr ist  $Y_{\ell, \ell_z}$  in die  $x$ - $y$ -Ebene konzentriert.

## 15.5. Der Spin

### 15.5.1. Eigenschaften der Spin-Operatoren

Die meisten Teilchen haben auch im Ruhezustand einen Drehimpuls, den sogenannten **inneren Drehimpuls, Eigendrehimpuls** oder **Spin**, der sich empirisch beispielsweise als magnetisches Moment manifestiert.

In der nichtrelativistischen Quantenmechanik ist dieser Spin-Freiheitsgrad unabhängig von den Freiheitsgraden der räumlichen Bewegung, also insbesondere mit diesen gleichzeitig messbar. Mit  $\hat{S}_i$  seien die Operatoren des Spins bezeichnet, diese erfüllen die Vertauschungsrelationen

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_k \quad \text{und} \quad [\hat{S}^2, \hat{S}_i] = 0 .$$

Zur vollständigen Spezifikation des Zustands eines Teilchens sind noch (zusätzlich zu den mit der räumlichen Bewegung verknüpften Observablen) die Angabe des Wertes von  $\hat{S}^2$  und  $\hat{S}_z$  notwendig, wobei die möglichen Werte von  $\hat{S}^2$  durch

$$\hbar^2 s(s+1) \quad \text{für} \quad s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

gegeben sind, und wie beim Bahndrehimpuls  $-s \leq -s_z \leq s$  gilt. Der maximale Satz von kompatiblen Operatoren ist dann beispielweise  $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$  sowie  $\hat{S}^2$  und  $\hat{S}_z$ . Man beachte, dass anders als beim Bahndrehimpuls für die Vertauschungsrelationen mit Orts- und Impuls-Operator

$$[\hat{S}_i, \hat{X}_j] = 0 \quad \text{und} \quad [\hat{S}_i, \hat{P}_j] = 0$$

gilt, der Spin ist also von diesen Größen unabhängig.

In der Teilchenphysik gilt nun, dass der Wert von  $s$  für die Art des Teilchens bezeichnend ist, d.h. alle Teilchen derselben Art haben auch den gleichen Spin  $s$ .

**Beispiel:** Elektron:  $s = \frac{1}{2}$ , Proton:  $s = \frac{1}{2}$ , Neutron:  $s = \frac{1}{2}$ , die Materiebausteine haben also alle den gleichen Spin. Pion:  $s = 0$ ,  $W^\pm/Z^0$ -Boson:  $s = 1$ , Photon:  $s = 1$ , Graviton:  $s = 2$

Bei zusammengesetzten Objekten (Kernen, Atomen, etc.) ergibt sich der Spin  $s$  als Gesamtspin der Bestandteile und Bahndrehimpulse ihrer Relativbewegung, wobei die genaue Addition von Drehimpulsen vergleichsweise kompliziert ist, wir kommen später darauf zurück.

### 15.5.2. Spin 1/2 und Darstellungsarten

Ist also die Teilchenart (und damit der Spin  $\hat{S}^2$ ) vorgegeben, so ist der maximale Observablensatz  $\hat{X}_i, \hat{S}_z$ , und es existieren wegen der Kompatibilität der Observablen gemeinsame Eigenvektoren  $|\vec{r}, \sigma\rangle$ , wobei

$$\hat{X}_i |\vec{r}, \sigma\rangle = \vec{r} |\vec{r}, \sigma\rangle \quad \text{und} \quad \hat{S}_z |\vec{r}, \sigma\rangle = \hbar\sigma |\vec{r}, \sigma\rangle$$

gilt. Man betrachte nun im Weiteren nur Teilchen mit  $s = \frac{1}{2}$ , d.h. für die  $z$ -Komponente des Spins sind lediglich die beiden Möglichkeiten  $s_z := \sigma = +\frac{1}{2}$  und  $-\frac{1}{2}$  möglich. Sei dann  $|\psi\rangle$  ein beliebiger Zustand eines solchen Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchens, dann kann der Zustand in der  $\hat{X}$ - $\hat{S}_z$ -Darstellung

$$|\psi\rangle \rightarrow \psi(\vec{r}, \sigma) := \langle \vec{r}, \sigma | \psi \rangle = \begin{pmatrix} \psi(\vec{r}, \sigma = \frac{1}{2}) \\ \psi(\vec{r}, \sigma = -\frac{1}{2}) \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \psi_\uparrow(\vec{r}) \\ \psi_\downarrow(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

formuliert werden. Bei der zweikomponentigen Größe handelt es sich um einen sogenannten **Spinor**. Die physikalische Bedeutung der Komponentenfunktionen  $\psi_\pm(\vec{r})$  ergibt sich aus

$$|\psi_+(\vec{r})|^2 = |\psi(\vec{r}, \frac{1}{2})|^2 = |\langle \vec{r}, \sigma = \frac{1}{2} | \psi \rangle|^2 ,$$

dies ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Teilchen am Ort  $\vec{r}$  mit dem Spinzustand  $s_z = \frac{1}{2}$  vorgefunden wird. Weiter muss dann

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle = 1 &= \iiint d^3\vec{r} \sum_{\sigma} \langle \psi | \vec{r}, \sigma \rangle \langle \vec{r}, \sigma | \psi \rangle = \sum_{\sigma=\pm\frac{1}{2}} \iiint d^3\vec{r} |\psi(\vec{r}, \sigma)|^2 \\ &= \iiint d^3\vec{r} (|\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2) \end{aligned}$$

für die Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit gelten. Ein allgemeiner Spin- $\frac{1}{2}$ -Zustand ist durch

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma=\pm\frac{1}{2}} \iiint d^3\vec{r} c_{\sigma}(\vec{r}) |\vec{r}, \sigma\rangle$$

gegeben. Man beachte, dass wir zur Spezifikation des Spinzustands bisher immer die  $z$ -Komponente des Spins und das Längenquadrat des Spinvektors gewählt haben. Man kann das Konzept auch auf eine beliebige  $\hat{X}$ - $\hat{S}_{\hat{n}}$ -Basis verallgemeinern, wobei  $\hat{S}_{\hat{n}}$  die Komponente des Spins in Richtung  $\hat{n}$  ist, also  $S_{\hat{n}} = \vec{S}\hat{n}$ . Die zugehörigen gemeinsamen Eigenvektoren seien dann

$$|\vec{r}; \hat{n}, \sigma\rangle := |\vec{r}\rangle |\hat{n}, \sigma\rangle,$$

wobei  $|\vec{r}\rangle \in \mathcal{H}_{\text{Ortsraum}}$  und  $|\hat{n}, \sigma\rangle \in \mathcal{H}_{\text{Spin}} \cong \mathbb{C}^2$  liegen. Dann lässt sich ein beliebiger Zustandsvektor  $|\chi\rangle$  im Spinraum durch

$$|\chi\rangle = \sum_{\sigma=\pm\frac{1}{2}} \alpha_{\sigma}^{(\hat{n})} |\hat{n}, \sigma\rangle = \alpha_+^{(\hat{n})} |\hat{n}, +\rangle + \alpha_-^{(\hat{n})} |\hat{n}, -\rangle = \langle \hat{n}, + | \chi \rangle |\hat{n}, +\rangle + \langle \hat{n}, - | \chi \rangle |\hat{n}, -\rangle$$

darstellen. Alternativ kann  $|\chi\rangle$  auch als spinorielle Größe in  $\hat{S}_{\hat{n}}$ -Darstellung

$$|\chi\rangle \xrightarrow{\hat{S}_{\hat{n}}\text{-Basis}} \begin{pmatrix} \langle \hat{n}, + | \chi \rangle \\ \langle \hat{n}, - | \chi \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_+^{(\hat{n})} \\ \alpha_-^{(\hat{n})} \end{pmatrix}$$

geschrieben werden. Man wähle ab jetzt wieder  $\hat{n} = \hat{z}$  und bezeichne  $|\hat{n}, \sigma\rangle = |\hat{z}, \sigma\rangle =: |\sigma\rangle$  als den Spin- $z$ -Zustand, dies ist die allgemein übliche Wahl der unabhängigen Drehimpulskomponente. Es gilt also

$$|\chi\rangle \xrightarrow{\hat{S}_z\text{-Basis}} \begin{pmatrix} \alpha_+^{(\hat{z})} \\ \alpha_-^{(\hat{z})} \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle + | \chi \rangle \\ \langle - | \chi \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \uparrow | \chi \rangle \\ \langle \downarrow | \chi \rangle \end{pmatrix}$$

In dieser Darstellung hat man  $|\sigma = +\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  und  $|\sigma = -\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ , und in  $\hat{S}_z$ -Darstellung erhält man für den  $\hat{S}_z$ -Operator

$$(\hat{S}_z)_{\sigma\sigma'}^{\hat{S}_z} = \langle \sigma | \hat{S}_z | \sigma' \rangle = \begin{pmatrix} \langle + | \hat{S}_z | + \rangle & \langle + | \hat{S}_z | - \rangle \\ \langle - | \hat{S}_z | + \rangle & \langle - | \hat{S}_z | - \rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Um die  $\hat{S}_z$ -Darstellung der übrigen Komponente-Operatoren  $\hat{S}_x$  und  $\hat{S}_y$  zu bestimmen, verwendet man die Vertauschungsrelation  $[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y$  der Spin-Komponenten. Damit lassen sich dann die einzelnen Matrixeinträge bestimmen: Aus

$$\begin{aligned} \langle + | [\hat{S}_z, \hat{S}_x] | - \rangle &= \langle + | \hat{S}_z \hat{S}_x | - \rangle - \langle + | \hat{S}_x \hat{S}_z | - \rangle = \frac{\hbar}{2} (\langle + | \hat{S}_x | - \rangle + \langle + | \hat{S}_x | - \rangle) \\ &= \hbar \langle + | \hat{S}_x | - \rangle \stackrel{!}{=} i\hbar \langle + | \hat{S}_y | - \rangle \end{aligned}$$

folgt zuerst  $\langle +|\hat{S}_x|-\rangle = i\langle +|\hat{S}_y|-\rangle$  und analog  $\langle -|\hat{S}_x|+\rangle = i\langle -|\hat{S}_y|+\rangle$ . Aus

$$\langle +|[\hat{S}_z, \hat{S}_x]|+\rangle = \langle +|\hat{S}_z\hat{S}_x|+\rangle - \langle +|\hat{S}_x\hat{S}_z|+\rangle = 0 \stackrel{!}{=} i\hbar\langle +|\hat{S}_y|+\rangle$$

ergibt sich  $\langle +|\hat{S}_x|+\rangle = \langle +|\hat{S}_y|+\rangle = 0$  und analog  $\langle -|\hat{S}_x|-\rangle = \langle -|\hat{S}_y|-\rangle = 0$  für die  $\hat{S}_z$ -Darstellung. Als nächstes folgt aus der Vertauschungsrelation  $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z$  dann

$$\begin{aligned} \langle +|[\hat{S}_x, \hat{S}_y]|+\rangle &= i\hbar\langle +|\hat{S}_z|+\rangle = i\frac{\hbar^2}{2} \quad \text{und} \\ \langle +|\hat{S}_x\hat{S}_y|+\rangle - \langle +|\hat{S}_y\hat{S}_x|+\rangle &= \sum_{\sigma} \left( \langle +|\hat{S}_x|\sigma\rangle\langle\sigma|\hat{S}_y|+\rangle - \langle +|\hat{S}_y|\sigma\rangle\langle\sigma|\hat{S}_x|+\rangle \right) \\ &= \langle +|\hat{S}_x|-\rangle\langle -|\hat{S}_y|+\rangle - \langle +|\hat{S}_y|-\rangle\langle -|\hat{S}_x|+\rangle = 2i\langle +|\hat{S}_x|-\rangle\langle -|\hat{S}_x|+\rangle = 2i|\langle +|\hat{S}_x|-\rangle|^2, \end{aligned}$$

und daraus erhalten wir  $|\langle +|\hat{S}_x|-\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{4}$  was nach Phasenwahl zu  $\langle +|\hat{S}_x|-\rangle = \frac{\hbar}{2}$  führt. Damit sind alle Matrixeinträge der  $\hat{S}_z$ -Darstellung bestimmt, und wir erhalten so

$$\hat{S}_x \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_y \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_z \rightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Zur vereinfachten Notation definiert man weiter die sogenannte **Pauli-Spin-Matrizen**

$$\sigma_x := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

die wir dann in einem Vektor  $\vec{\sigma} := (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  zusammenfassen. Der Vektor der einzelnen Spin-Operatoren kann dann als

$$\hat{\vec{S}} \xrightarrow{\hat{S}_z\text{-Darstellung}} \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$$

geschrieben werden - man beachte aber dass  $\hat{\vec{S}}$  nicht der Operator des Spin-Vektors ist, da die einzelnen Komponenten nicht unabhängig voneinander sind. Die Pauli-Matrizen haben dabei die Eigenschaften  $\sigma_i^2 = \mathbb{1}$ ,  $\det \sigma_i = -1$  und  $\text{Sp}(\sigma_i) = 0$ . Außerdem sind sie wegen  $\sigma_i^\dagger = \sigma_i$  selbstadjungiert und erfüllen die Beziehungen

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k \quad \text{und} \quad \{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}\mathbb{1},$$

sodass sich daraus  $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k$  ergibt. Für einen beliebigen Vektor  $\vec{a}$  hat die Matrix des Skalarprodukts dann die Form

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{a} = \sigma_x a_x + \sigma_y a_y + \sigma_z a_z = \begin{pmatrix} a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & a_3 \end{pmatrix},$$

und mit  $\hat{S}^2 = \frac{1}{4}\hbar^2\vec{\sigma}^2 = \frac{1}{4}\hbar^2(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3}{4}\hbar^2\mathbb{1} = \hbar^2\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)\mathbb{1}$  gilt ebenfalls wieder die Form  $s(s+1)$  für das Längenquadrat des Spins.

Der Operator zu Drehungen  $R(\vec{\varphi})$  ist  $\hat{D}(R(\vec{\varphi})) = \exp(-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\hat{\vec{S}})$ , wie wir von Seite 220 wissen. Daraus ergeben sich nun die Drehungen im Hilbertraum  $\mathcal{H}_{\text{Spin}} \cong \mathbb{C}^2$  der Spinoren zu Spin- $\frac{1}{2}$ -Zuständen, denn dort ist  $\vec{J} = \vec{S}$ . Eine Drehung ist dort also durch

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\hat{\vec{S}}\right)$$

beschrieben. In der  $\hat{S}_z$ -Darstellung gilt also

$$\begin{aligned}\hat{D}(R(\vec{\varphi})) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}\right) = \exp\left(-i\frac{\varphi}{2}\vec{\sigma}\right) = \mathbb{1}\cos\frac{\varphi}{2} - i(\hat{\varphi}\vec{\sigma})\sin\frac{\varphi}{2} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} & 0 \\ 0 & \cos\frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} - i\sin\frac{\varphi}{2}\begin{pmatrix} \hat{\varphi}_3 & \hat{\varphi}_1 - i\hat{\varphi}_2 \\ \hat{\varphi}_1 + i\hat{\varphi}_2 & -\hat{\varphi}_3 \end{pmatrix},\end{aligned}$$

und die Wirkung des Drehungs-Operators äußert sich durch  $\hat{D}(R(\vec{\varphi}))|\hat{n}, \sigma\rangle = |R\hat{n}, \sigma\rangle$ .

**Beispiel:** Betrachten wir den Zustand  $|\hat{n} = \hat{z}, \sigma = +\frac{1}{2}\rangle = |+\rangle$ -Zustand. Dann beschreibt in  $\hat{S}_z$ -Darstellung die Anwendung des Drehoperators

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{Rotation mit } R(\vec{\varphi})} \hat{D}(R(\vec{\varphi}))\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} - i\hat{\varphi}_z\sin\frac{\varphi}{2} \\ (-i\hat{\varphi}_x + \hat{\varphi}_y)\sin\frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}$$

den Spin-Zustand eines Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchens, wo die Spin-Komponente in  $R(\vec{\varphi})\hat{z}$ -Richtung den Wert  $\sigma = \frac{1}{2}$  hat.

Umgekehrt kann man auch fragen, was die physikalische Bedeutung eines Spinors  $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$  mit  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$  und  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  ist. Dieser beschreibt ein Teilchen wo die Spinkomponenten in  $\hat{n}$ -Richtung gleich  $\sigma = \frac{1}{2}$  sind, d.h. es ist ein Eigenzustand des  $\hat{S}_{\hat{n}}$ -Operators mit dem Eigenwert  $\frac{1}{2}$ , in Zeichen

$$\hat{S}_{\hat{n}}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = (\hat{S}\hat{n})\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}.$$

Dabei ist  $\hat{n}$  jene Richtung, die man aus  $\hat{z}$  durch Drehung des Zustands um  $R(\vec{\varphi})$  erhält, wobei  $\varphi := |\vec{\varphi}|$ ,  $\hat{\varphi}_x := \frac{\varphi_x}{\varphi}$ ,  $\hat{\varphi}_y := \frac{\varphi_y}{\varphi}$  und  $\hat{\varphi}_z := \frac{\varphi_z}{\varphi}$  durch die Gleichung

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} - i\hat{\varphi}_z\sin\frac{\varphi}{2} \\ (-i\hat{\varphi}_x + \hat{\varphi}_y)\sin\frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}$$

bestimmt sind.

## 15.6. Addition von Drehimpulsen

Die klassische Addition von Drehimpulsen gestaltet sich durch  $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$  sehr trivial als komponentenweise Addition von Vektoren. Da wir aber bei quantenmechanischen Drehimpulsen wegen der Inkompatibilität der einzelnen Koordinaten niemals den kompletten Drehimpulsvektor vollständig spezifiziert haben, verläuft die Addition deutlich komplizierter.

Die beiden Drehimpulse  $\vec{J}_1$  und  $\vec{J}_2$  seien unabhängig voneinander, also gleichzeitig messbar. Für die einzelnen Operatoren gilt also

$$[\hat{J}_{1,i}, \hat{J}_{2,j}] = 0 \quad \text{für alle } i, j$$

Für die Vertauschungsrelationen der einzelnen Gesamtdrehimpuls-Komponenten  $J_i = J_{1,i} + J_{2,i}$  folgt dann

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = [\hat{J}_{1,i} + \hat{J}_{2,i}, \hat{J}_{1,j} + \hat{J}_{2,j}] = i\hbar\epsilon_{ijk}(\hat{J}_{1,k} + \hat{J}_{2,k})$$

und  $[\hat{J}_{1,i}, \hat{J}_j] = [\hat{J}_{1,i}, \hat{J}_{1,j} + \hat{J}_{2,j}] = [\hat{J}_{1,i}, \hat{J}_{1,j}] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_{1,k} \neq 0$  sowie  $[\hat{J}_{1,i}, \hat{J}^2] = 0$ , analoges gilt entsprechend auch für den zweiten beteiligten Drehimpuls  $\hat{J}_2$ . Die einzelnen Längenquadrate der Drehimpulse sind wegen

$$\begin{aligned} [\hat{J}_1^2, \hat{J}^2] &= [\hat{J}_1^2, \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_1\hat{J}_2 + \hat{J}_2\hat{J}_1] = [\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1,r}\hat{J}_{2,r}] + [\hat{J}_1^2, \hat{J}_{2,r}\hat{J}_{1,r}] \\ &= \hat{J}_{1,r}[\hat{J}_1^2, \hat{J}_{2,r}] + [\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1,r}]\hat{J}_{2,r} + \hat{J}_{2,r}[\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1,r}] + [\hat{J}_1^2, \hat{J}_{2,r}]\hat{J}_{1,r} = 0 \end{aligned}$$

und analog auch  $[\hat{J}_2^2, \hat{J}^2] = 0$  mit dem Längenquadrat des Gesamtdrehimpulses kompatibel. Als letzte Vertauschungsrelation betrachten wir dann noch

$$[\hat{J}_1^2, \hat{J}_z] = [\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1,z}] + [\hat{J}_1^2, \hat{J}_{2,z}] = 0 \quad \text{und} \quad [\hat{J}_2^2, \hat{J}_z] = 0 ,$$

d.h. wenn wir die vorigen Ergebnisse noch einmal zusammenfassen, dann kommutieren sowohl die Operatoren  $\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{1,z}, \hat{J}_{2,z}$  als auch  $\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$  miteinander, sie bilden jeweils einen maximalen Satz von kompatiblen Observablen. Entsprechend existieren auch zwei mögliche Sätze von Basisvektoren für den Drehimpuls-Freiheitsgrad, zum einen der Satz der getrennten Einzeldrehimpulse  $\{|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle\} = \{|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle\}$  mit

$$\begin{aligned} \hat{J}_{1/2}^2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= \hbar^2 j_{1/2}(j_{1/2} + 1) |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ \hat{J}_{1,z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= \hbar m_1 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ \hat{J}_{2,z} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= \hbar m_2 |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle , \end{aligned}$$

und zum anderen der gemischte Satz  $\{|j_1, j_2, J, M\rangle\}$  mit

$$\begin{aligned} \hat{J}_{1/2}^2 |j_1, j_2, J, M\rangle &= \hbar^2 j_{1/2}(j_{1/2} + 1) |j_1, j_2, J, M\rangle \\ \hat{J}^2 |j_1, j_2, J, M\rangle &= \hbar J(J + 1) |j_1, j_2, J, M\rangle \\ \hat{J}_z |j_1, j_2, J, M\rangle &= \hbar M |j_1, j_2, J, M\rangle . \end{aligned}$$

Die Frage ist nun, welche Werte  $J$  und  $M$  bei gegebenen Werten  $j_1$  und  $j_2$  annehmen können. Da je nach Ausrichtung sich der Gesamtdrehimpuls  $J$  maximal addieren kann, also  $J = j_1 + j_2$ , oder aber maximal entgegengesetzt stehen kann, d.h.  $J = |j_1 - j_2|$ , gilt folglich, dass für  $J$  alle sich um Eins unterscheidenden Werte

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$$

in Frage kommen, und für festes  $J$  gilt dann  $M = -J, -J + 1, \dots, +J$ .

**Beispiel:** Seien  $j_1 = \frac{3}{2}$  und  $j_2 = 5$  gegeben, dann gilt  $|j_1 - j_2| = \frac{7}{2}$  und  $j_1 + j_2 = \frac{13}{2}$ , gibt es für den Gesamtdrehimpuls die Möglichkeiten  $J = \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}, \frac{13}{2}$ . Für  $J = \frac{9}{2}$  läuft die  $z$ -Komponenten dann im Bereich  $M = -\frac{9}{2}, -\frac{7}{2}, \dots, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}$ .

Um nun zwei gegebene Drehimpuls-Zustände  $|j_1, m_1\rangle$  und  $|j_2, m_2\rangle$  zu addieren, müssen wir folglich den Basiswechsel von  $\{|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle\} \rightarrow \{|j_1, j_2; J, M\rangle\}$  durchführen. Bei gegebenem  $j_1$  und  $j_2$  gibt es  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$  Zustandsvektoren der Form  $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ , da  $-j_1 \leq m_1 \leq j_1$  ist - also gibt es  $2j_1 + 1$  Möglichkeiten für den ersten Drehimpuls und analog  $2j_2 + 1$  Möglichkeiten für den zweiten, und da die beiden Drehimpulse unabhängig voneinander sind, erhalten wir das Produkt der Möglichkeiten.

Man fragt sich dann, wie viele Zustandsvektoren  $|j_1, j_2, J, M\rangle$  es gibt. Dazu sei ohne Beschränkung der Allgemeinheit  $j_1 \geq j_2$  angenommen, dann gilt

$$\begin{aligned} \sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J+1) &= \frac{1}{2} (j_1 + j_2 - |j_1 - j_2| + 1) \left( (2|j_1 - j_2| + 1) + (2(j_1 + j_2) + 1) \right) \\ &= \frac{1}{2} (2j_2 + 1)(4j_1 + 2) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1), \end{aligned}$$

in der anderen Basis gibt es also genauso viele Zustände. Rein formal ist der Basiswechsel von  $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$  nach  $|j_1, j_2, J, M\rangle$  dann durch

$$|j_1, j_2, J, M\rangle = \sum_{j'_1, m'_1} \sum_{j'_2, m'_2} \underbrace{\langle j'_1, j'_2, m'_1, m'_2 | j_1, j_2, J, M \rangle}_{\text{Basiswechsel-Koeffizienten}} |j'_1, j'_2, m'_1, m'_2\rangle$$

gegeben, wobei die Skalarprodukte  $\langle j'_1, j'_2, m'_1, m'_2 | j_1, j_2, J, M \rangle$  als **Clebsch-Gordan-Koeffizienten** bezeichnet werden. Wir können die vier Summationen noch ein wenig verkürzen, in dem wir gewissen Bedingungen bzw. Symmetrien dieser Koeffizienten betrachten. Aus der Selbstadjungiertheit von  $\hat{J}_1^2$  folgt über

$$\begin{aligned} \langle j'_1, j'_2, m'_1, m'_2 | \hat{J}_1^2 | j_1, j_2, J, M \rangle &= \hbar^2 j'_1(j'_1 + 1) \langle j'_1, j'_2, m'_1, m'_2 | j_1, j_2, J, M \rangle \\ &= \hbar^2 j_1(j_1 + 1) \langle j'_1, j'_2, m'_1, m'_2 | j_1, j_2, J, M \rangle \end{aligned}$$

dann die notwendige Gleichheit  $j'_1 = j_1$  und analog  $j'_2 = j_2$ . Ganz ähnlich erhält man aus

$$\begin{aligned} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | \hat{J}_z | j_1, j_2, J, M \rangle &= \hbar(m_1 + m_2) \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, J, M \rangle \\ &= \hbar M \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, J, M \rangle \end{aligned}$$

noch die Beziehung  $M = m_1 + m_2$ . Damit verkürzt sich die Vierfach-Summe über die Clebsch-Gordan-Koeffizienten im oberen Basiswechsel zu

$$\begin{aligned} |j_1, j_2, J, M\rangle &= \sum_{m_1+m_2=M} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, J, M \rangle |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ &= \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 = M - m_1 | j_1, j_2, J, M \rangle |j_1, j_2, m_1, m_2 = M - m_1\rangle. \end{aligned}$$

Die eigentliche Berechnung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten ist relativ kompliziert und erfolgt über rekursive Methoden, deshalb werden die Koeffizienten üblicherweise in Tabellen nachgeschlagen, die es unter <http://pdg.lbl.gov/2005/reviews/clebrpp.pdf> bzw. im Anhang zu finden gibt. Das eigentliche Resultat ist nun, dass im Rahmen der Quantenmechanik die Addition von Drehimpulsen keine eindeutigen Ergebnisse im Sinne eines eindeutig definierten Drehimpulszustands liefert, sondern eine Superposition verschiedener Drehimpulszustände, deren Gewichtung durch die Clebsch-Gordan-Koeffizienten gegeben ist.

**Beispiel:** Wir betrachten einige explizite Beispiele für die Addition von Drehimpulsen, wobei wir zur Abkürzung die Notation  $|m_1, m_2\rangle$  für die Summanden benutzen:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 0 \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \right) \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right) \end{aligned}$$

## 15. Symmetrien in der Quantenmechanik und der Drehimpuls

---

In der Atomphysik tauchen des öfteren die folgenden wichtigen Gesamtzustände als Addition der Drehimpulse von Zwei-Elektronen-Systemen mit  $j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$  auf:

$$\begin{array}{ll}
 |J = 0, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) & \text{Singulett-Zustand} \\
 \left. \begin{array}{l}
 |J = 1, M = 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\
 |J = 1, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\
 |J = 1, M = -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle
 \end{array} \right\} & \text{Triplet-Zustand}
 \end{array}$$

Die Bezeichnung dieser Summen rührt daher, dass eine genauere quantitative Untersuchung dieser Zustände unter Berücksichtigung relativistischer Korrekturen einen einzelnen und drei sehr nahe beieinander liegende Spektrallinien liefert.

**Bemerkung:** Fassen wir noch einmal die wesentlichen Dinge zusammen: Bei der Addition zweier Drehimpulse  $j_1$  und  $j_2$  erhält man Zustände mit dem Gesamtdrehimpuls

$$J = |j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2$$

und bei gegebenem  $J$  gilt für die  $z$ -Komponente  $-J \leq M \leq J$ . Den Zustandsvektor für gegebenes  $J$  und  $M$  erhält man schließlich unter Verwendung der Clebsch-Gordan-Koeffizienten durch die Summation

$$|j_1, j_2, J, M\rangle = \sum_{m=-j_1}^{j_1} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 = M - m_1 | j_1, j_2, J, M \rangle |j_1, j_2, m_1, m_2 = M - m_1\rangle .$$

# 16. Potentialprobleme im Dreidimensionalen

In diesem Kapitel wollen wir uns mit der konkreten Lösung dreidimensionaler Probleme beschäftigen, wobei wir vornehmlich vom Vorhandensein von Zentralkräften ausgehen. Die Beispiele sollen dabei Probleme aus der Atomphysik sein, wobei wir schließlich eine vollständige Beschreibung des Wasserstoffatoms erhalten werden.

## 16.1. Teilchen in sphärisch-symmetrischen Potentialen

### 16.1.1. Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten

Wir betrachten ein Teilchen ohne Spin in einem sphärisch-symmetrischen Potential  $V = V(r)$ , der Hamilton-Operator ist dann durch

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + V(\hat{X}) \xrightarrow{\hat{X}\text{-Darstellung}} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r)$$

gegeben. In der klassischen Mechanik bleibt der Drehimpuls stets erhalten, wir erwarten also, dass auch der quantenmechanische Drehimpuls erhalten bleibt. Zunächst drücken wir das Längenquadrat des Drehimpulses durch

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_i \hat{L}_i = \epsilon_{ikl} \hat{X}_k \hat{P}_l \cdot \epsilon_{imn} \hat{X}_m \hat{P}_n = \epsilon_{ikl} \epsilon_{imn} \hat{X}_k \hat{P}_l \hat{X}_m \hat{P}_n$$

aus, wobei allgemein  $\epsilon_{ikl} \epsilon_{imn} = \delta_{km} \delta_{ln} - \delta_{kn} \delta_{lm}$  gilt, also erhalten wir unter Verwendung der Vertauschungsrelationen der Operatoren

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 &= \hat{X}_k \hat{P}_l \hat{X}_k \hat{P}_l - \hat{X}_k \hat{P}_l \hat{X}_l \hat{X}_k = \hat{X}_k \hat{X}_k \hat{P}_l \hat{P}_l - i\hbar \hat{X}_k \hat{P}_k - i\hbar \hat{X}_k \hat{P}_k - \hat{X}_k \hat{P}_l \hat{P}_k \hat{X}_l \\ &= \hat{X}^2 \hat{P}^2 - 2i\hbar (\hat{X} \cdot \hat{P}) - (\hat{X} \cdot \hat{P}) \hat{P}_l \hat{X}_l = \hat{X}^2 \hat{P}^2 - 2i\hbar (\hat{X} \cdot \hat{P}) - (\hat{X} \hat{P})(\hat{X} \hat{P}) + 3i\hbar (\hat{X} \hat{P}) \\ &= \hat{X}^2 \hat{P}^2 - (\hat{X} \hat{P})(\hat{X} \hat{P}) + i\hbar (\hat{X} \hat{P}) . \end{aligned}$$

Man definiere nun neue Operatoren  $\hat{R} := \sqrt{\hat{X}^2}$  und  $\hat{P}_r := \hat{R}^{-1}(\hat{X} \hat{P})$ , sodass wir das Abstandsquadrat und das Skalarprodukt von Orts- und Impuls-Operator als

$$\hat{R}^2 = \hat{X}^2 \quad \text{und} \quad \hat{R} \hat{P}_r = \hat{X} \hat{P}$$

schreiben können. Das Längenquadrat des Bahndrehimpulses wird damit zu

$$\hat{L}^2 = \hat{R}^2 \hat{P}^2 - (\hat{R} \hat{P}_r)(\hat{R} \hat{P}_r) + i\hbar \hat{R} \hat{P}_r \iff \hat{R}^{-2} \hat{L}^2 = \hat{P}^2 - \hat{R}^{-1} \hat{P}_r (\hat{R} \hat{P}_r) + i\hbar \hat{R}^{-1} \hat{P}_r .$$

Durch die Definition entspricht  $\hat{R} = \sqrt{\hat{X}^2 + \hat{Y}^2 + \hat{Z}^2}$  dem Radius  $r$  im Wellenfunktionsraum, während für das Skalarprodukt von Orts- und Impulsoperator in Kugelkoordinaten

$$\begin{aligned} \hat{X} \hat{P} &= \hat{X} \hat{P}_x + \hat{Y} \hat{P}_y + \hat{Z} \hat{P}_z \rightarrow i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ &= -i\hbar \left[ r \sin \vartheta \cos \varphi \left( \sin \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \dots \right] \end{aligned}$$

als Wirkung im Wellenfunktionsraum folgt. Schließlich ist noch die Wirkung von  $\hat{P}_r$  als

$$\hat{P}_r = \hat{R}^{-1}(\hat{X}\hat{P}) \rightarrow (-i\hbar)\frac{\partial}{\partial r} \quad \Longrightarrow \quad [\hat{R}, \hat{P}_r] \rightarrow (-i\hbar)\left(r\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\partial}{\partial r}r\right) = i\hbar$$

zu finden. Betrachten wir dann die Identität

$$\begin{aligned} \hat{R}^{-2}\hat{L}^2 &= \hat{P}^2 - \hat{R}^{-1}\hat{P}_r\hat{R}\hat{P}_r + i\hbar\hat{R}^{-1}\hat{P}_r = \hat{P}^2 - \hat{P}_r^2 + i\hbar\hat{R}^{-1}\hat{P}_r + i\hbar\hat{R}^{-1}\hat{P}_r \\ &\iff \hat{P}^2 = \hat{P}_r^2 - 2i\hbar\hat{R}^{-1}\hat{P}_r + \hat{R}^{-2}\hat{L}^2 \quad \rightarrow \quad (-\hbar^2)\frac{\partial^2}{\partial r^2} - 2i\hbar\frac{1}{r}(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\hat{L}^2 \end{aligned}$$

und verwendet schließlich noch die bereits in (15.2) genannte Darstellung des Längenquadrats

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\vartheta^2} + \cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

in Kugelkoordinaten, so erhalten wir schließlich durch

$$\hat{P}^2 = -\hbar^2\Delta \quad \rightarrow \quad -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\frac{1}{\hbar^2}\hat{L}^2\right)$$

den Impuls ausgedrückt durch den Drehimpuls. Insbesondere aber liefert uns dies den Laplace-Operator  $\Delta$  in Kugelkoordinaten. Damit erhalten wir die **Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten**

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) &= \hat{H}\psi(\vec{r}, t) \quad \text{bzw. zeitunabhängig} \quad E\psi_E(\vec{r}) = \hat{H}\psi_E(\vec{r}) \\ \text{mit} \quad \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\frac{1}{\hbar^2}\hat{L}^2\right) + V(r) \end{aligned}$$

**Bemerkung:** • Die Definition des radialen Impulsoperators  $\hat{P}_r = \hat{R}^{-1}(\hat{X}, \hat{P})$  ist nicht eindeutig. Außerdem ist  $\hat{P}_r$  nicht selbstadjungiert, eine andere Möglichkeit zur Definition ist daher

$$\hat{P}_r = \frac{1}{2}\left(\hat{R}^{-1}(\hat{X}\hat{P}) + (\hat{X}\hat{P})\hat{R}^{-1}\right),$$

die selbstadjungiert ist und zur selben Schrödinger-Gleichung führt.

- Die Transformation zu Kugelkoordinaten gilt nur für  $r \neq 0$ , d.h. der oben erhaltene Laplace-Operator  $\Delta$  ist nur für  $r \neq 0$  gültig und entsprechend dann auch die damit definierte Schrödinger-Gleichung für  $\psi_E(\vec{r})$  nur für  $r \neq 0$ . Der Wert  $\psi_E(0)$  ergibt sich dann aus der Forderung, dass der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)$$

selbstadjungiert sein muss, daher darf die Lösung  $\psi_E(\vec{r})$  bei  $r \rightarrow 0$  nicht singulär sein.

### 16.1.2. Bahndrehimpuls-Eigenzustände

Falls das Potential  $V = V(r)$  nur vom Radius abhängt, so gilt  $[\hat{H}, \hat{L}_i] = [\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$  für alle  $i = 1, 2, 3$ , d.h. die einzelnen Drehimpuls-Komponenten sind Erhaltungsgrößen, da im Hamilton-Operator nur der Anteil  $\frac{1}{r^2}\hat{L}^2$  auf  $\vartheta$  und  $\varphi$  wirkt. Die Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung in Kugelkoordinaten erfolgt durch einen Separationsansatz von

$$\psi_E(r, \vartheta, \varphi) = \langle r, \vartheta, \varphi | E, \ell, \ell_z \rangle .$$

Hierbei bildet  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$  einen maximalen Satz von miteinander kommutierenden Operatoren, es existieren also die oben bereits verwendeten gemeinsamen Eigenzustände  $|E, \ell, \ell_z\rangle$ . Die Schrödinger-Gleichung lautet dann

$$\begin{aligned} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) - E \right] R(r) S(\vartheta, \varphi) &= -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{1}{\hbar^2} \hat{L}^2 R(r) S(\vartheta, \varphi) \\ \iff S(\vartheta, \varphi) \left[ -\hbar^2 r^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + 2mr^2(V(r) - E) \right] R(r) &= -R(r) \hat{L}^2 S(\vartheta, \varphi) \\ \iff \frac{1}{R(r)} \left[ -\hbar^2 r^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + 2mr^2(V(r) - E) \right] R(r) &= -\frac{1}{S(\vartheta, \varphi)} \hat{L}^2 S(\vartheta, \varphi) , \end{aligned}$$

und in dieser Gleichung ist die linke Seite nur von  $r$  abhängig, während die rechte nur von den Winkeln  $\vartheta$  und  $\varphi$  abhängt, es müssen also beide Seiten gleich einer Konstanten sein, die als  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$  gewählt wird. Wir erhalten dann die Eigenwertgleichung

$$\hat{L}^2 S_{E, \ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 \ell(\ell + 1) S_{E, \ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) ,$$

für das Längenquadrat  $\hat{L}^2$ , die allerdings unabhängig vom Parameter  $E$  ist. Lösungen sind die bereits in Abschnitt 15.4.2 bestimmten Kugelflächenfunktionen für  $\ell = 0, 1, 2, \dots$  und  $-\ell \leq \ell_z \leq \ell$ , es gilt also  $S_{E, \ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) = Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi)$  unabhängig von  $E$  und  $V(r)$ . Verwenden wir die  $\hat{L}^2$ -Eigenfunktionen dann, so wird aus der obigen Gleichheit

$$\begin{aligned} \left[ -\hbar^2 r^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + 2mr^2(V(r) - E) \right] R_{E, \ell}(r) &= -\hbar^2 \ell(\ell + 1) R_{E, \ell}(r) \\ \iff \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \left( V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2mr^2} \right) \right] R_{E, \ell}(r) &= E R_{E, \ell}(r) , \end{aligned}$$

diese bestimmt den Radialteil  $R_{E, \ell}(r)$ . Man wähle dann als Lösungsansatz die Funktion

$$R_{E, \ell}(r) = \frac{U_{E, \ell}(r)}{r} \quad \implies \quad \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r) \right] U_{E, \ell}(r) = E U_{E, \ell}(r) , \quad (16.1)$$

wobei aber  $U_{E, \ell}(0) = 0$  wegen der Hermitizität sein muss (vgl. nochmal den zweiten Punkt der Schlussbemerkung des letzten Abschnitts). Von allen möglichen Lösungen sind nur die normierbaren physikalisch sinnvoll, wobei auf Grund der Normierung

$$\begin{aligned} 1 &= \iiint |\psi_E(r, \vartheta, \varphi)|^2 d^3\vec{r} = \int_0^\infty |R_{E, \ell}(r)|^2 r^2 dr \cdot \underbrace{\iint |Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi)|^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi}_1 \\ \iff 1 &= \int_0^\infty |R_{E, \ell}(r)|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |U_{E, \ell}(r)|^2 dr \end{aligned}$$

gelten muss. Als  $|E, \ell, \ell_z\rangle$ -Eigenfunktionen in Kugelkoordinaten erhalten wir damit schließlich

$$\psi_{E, \ell, \ell_z}(r, \vartheta, \varphi) = \frac{U_{E, \ell}(r)}{r} Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi) ,$$

wobei  $U_{E,\ell}$  eine normierbare Lösung der Gleichung (16.1) ist, die außerdem  $U_{E,\ell}(0) = 0$  erfüllt. Somit erhalten wir vollständig bestimmte Energie-Drehimpuls-Eigenzustände  $\psi_{E,\ell,\ell_z}(r, \vartheta, \varphi)$ .

**Bemerkung:** • Das konkrete Potential bestimmt nur die radiale  $r$ -Abhängigkeit der Lösung und tritt deshalb nur in der Bestimmungsgleichung (16.1) auf. Der Drehimpuls bzw. die Isotropie des Raums ist deshalb ein Formprinzip der Natur.

- Man betrachte den Fall, dass das Potential  $V(r)$  bei Annäherung  $r \rightarrow 0$  weniger singular als  $\frac{1}{r^2}$  ist. In diesem Limes geht die Bestimmungsgleichung in

$$(16.1) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] U_{E,\ell}(r) = EU_{E,\ell}(r)$$

über. Da  $U_{E,\ell}(0) = 0$  sei soll, bestimmt also für  $r \rightarrow 0$

$$\frac{d^2}{dr^2} U_{E,\ell} = \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} U_{E,\ell}$$

das Verhalten des exakten Radialteils  $U_{E,\ell}(r)$ , wobei diese Differentialgleichung mit der allgemeine Lösung  $U_{E,\ell}(r) = a_\ell r^{\ell+1} + b_\ell r^{-\ell}$  hat, wie man durch Einsetzen schnell nachprüft. Da bei  $U(0) = 0$  sein muss, ist der Koeffizient  $b_\ell = 0$  in der allgemeinen Lösung, also erhalten wir für alle Potentiale  $V(r)$  das Verhalten

$$U_{E,\ell}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} a_\ell r^{\ell+1} .$$

## 16.2. Freie Teilchen

Die Differentialgleichung (16.1) soll nun für ein freies Teilchen gelöst werden, d.h. wir betrachten die Gleichung für  $V(r) = 0$ :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} - E \right] U_{E,\ell}(r) = 0 \quad \text{bzw.}$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - E \right] R_{E,\ell}(r) = 0$$

Man setze nun die Energie  $E := \frac{\hbar^2 p^2}{2m} \iff p = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$  und  $\rho := pr$ , wobei die obige Gleichung die Form

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left( 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right) \right] R_{E,\ell}(r = \frac{\rho}{p}) = 0 ,$$

hierbei handelt es sich um die Differentialgleichung der **sphärischen Besselfunktionen**, deren Lösung von der Form

$$j_\ell(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{\ell+\frac{1}{2}}(\rho) \quad \text{und} \quad n_\ell(\rho) = (-1)^{\ell+1} \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{-\ell-\frac{1}{2}}(\rho)$$

sind. Die Lösung  $n_\ell$  ist jedoch für  $r \rightarrow 0$  singular, kommt also nicht als physikalische Lösung des Radialteils in Frage. Es gilt also für die Wellenfunktion

$$\psi_{E,\ell,\ell_z}(r, \vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2mp}{\pi}} j_\ell(pr) Y_{\ell,\ell_z}(\vartheta, \varphi) \quad \text{mit} \quad j_\ell(\rho) = \frac{\rho^\ell}{2^{\ell+1} \ell!} \int_{-1}^1 e^{i\rho s} (1-s^2)^\ell ds .$$

Für das asymptotische Verhalten von  $j_\ell$  gilt für  $\rho \rightarrow 0$  bzw.  $\rho \rightarrow \infty$

$$j_\ell(\rho) \propto \frac{1}{(2\ell+1)!!} \rho^\ell \quad \text{bzw.} \quad j_\ell(\rho) \propto \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{\pi}{2}\ell\right),$$

wobei  $a!! := 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots$  als Fakultät ungerader Zahlen steht. Diese ermittelten Wellenfunktionen sind Eigenfunktionen von  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$ . Analog findet man Eigenfunktionen von  $\hat{P}_x$ ,  $\hat{P}_y$  und  $\hat{P}_z$

$$\psi_{\vec{p}} = A \exp\left(\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}\right),$$

diese sind insbesondere auch Eigenfunktionen von  $\hat{H}$ , da hier  $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2$  ist. Eine Transformation zwischen beiden liefert dann für  $p$  in  $z$ -Richtung

$$e^{i\vec{p}\vec{r}} = e^{ipr \cos\vartheta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell+1) \cdot j_\ell(pr) P_\ell(\cos\vartheta).$$

### 16.3. Das Coulomb-Potential

Als nächstes betrachten wir den Spezialfall, dass  $V(\vec{r}) = V(r) = -\frac{a}{r}$  das Coulombpotential ist, z.B. ist im Falle zweier Ladungen  $q_1e$  und  $q_2e$  die Konstante  $a = q_1q_2e^2$ . Eingesetzt ist (16.1) liefert dies die Radialgleichung

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2}{2mr^2} \ell(\ell+1) - \frac{a}{r} - E \right] R_{E,\ell}(r) = 0$$

$$\iff \left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + A + B \frac{1}{r} + C \frac{1}{r^2} \right] R_{E,\ell}(r) = 0$$

mit den Abkürzung  $A = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ,  $B = \frac{2ma}{\hbar^2}$  und  $C = -\ell(\ell+1)$ . Man suche nun wieder eine normierbare Lösung, d.h. die Bedingung

$$\int_0^\infty |R_{E,\ell}(r)|^2 r^2 dr < \infty$$

muss wegen  $\iiint d^3\vec{r} |\psi_{E,\ell,\ell_z}|^2 = 1$  mit  $d^3\vec{r} = r^2 dr d\Omega$  gelten, d.h. der Radialteil  $R(r)$  muss im Unendlichen schneller als  $\frac{1}{r}$  verschwinden, um eine normierbare Lösung zu erhalten. Man betrachte dann das Verhalten der Differentialgleichung im Unendlichen, hier gilt

$$\frac{d^2}{dr^2} R(r) = -AR(r) \quad \implies \quad R(r) = e^{\pm r\sqrt{-A}}$$

mit  $A = A(E)$ . Ist nun die Energie  $E > 0$ , so hat man weiter für den Faktor

$$\sqrt{-A} = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}E} = i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E} \quad \implies \quad R \propto \exp\left(\pm i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}r\right) \quad \text{für } r \rightarrow \infty,$$

d.h. die Wellenfunktion ist in  $r$  quasnormierbar für jeden positiven Energiewert  $E$ . Für den Fall  $E < 0$  ergibt sich dagegen

$$\sqrt{-A} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|} \in \mathbb{R} \quad \implies \quad R \propto \exp\left(-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}r\right),$$

wobei wir dieses Verhalten durch Definition des Bohrschen Radius

$$r_B := \sqrt{-\frac{1}{A}} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|E|}}$$

in  $R \propto \exp\left(-\frac{r}{r_B}\right)$  umformulieren können. Diese Funktion ist offensichtlich immer normierbar, sodass wir im Folgenden weiter die Bindungszustände mit  $E < 0$  betrachten. Als Ansatz für den Radialteil wählen wir dann

$$R_{E,\ell}(r) = \exp\left(-\frac{r}{r_B}\right) V_\ell(r),$$

dann liefert dies eingesetzt in die obere Differentialgleichung

$$\frac{d^2}{dr^2} V_\ell(r) + 2\frac{d}{dr} V_\ell(r) \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_B}\right) + V_\ell(r) \left(\frac{B}{r} - \frac{2}{rr_B} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right) = 0.$$

Wir verwendet dann weiter den Ansatz  $V_\ell(r) := r^\ell \sum_{i=0}^{\infty} c_i r^i = \sum_{i=0}^{\infty} c_i r^{i+\ell}$ , dann liefert Einsetzen dieses Ansatzes in die obige Gleichung entsprechende Bestimmungsgleichungen für die Koeffizienten  $c_i$ . Bei der Bestimmung der  $c_i$  ist dabei zu beachten, dass die resultierenden Funktionen

$$R_{E,\ell}(r) = \exp\left(-\frac{r}{r_B}\right) r^\ell \sum_{i=0}^{\infty} c_i r^i$$

einerseits normierbar sind und andererseits für  $r \rightarrow 0$  nicht singulär. Nun ist

$$V_\ell(r) = c_0 r^\ell + c_1 r^{\ell+1} + \sum_{i=2}^{\infty} c_i r^{i+\ell},$$

für unterschiedliche Fälle gilt dann

$$\ell = 0: \quad V_0(r) = c_0 + c_1 r + \sum_{i=2}^{\infty} c_i r^i, \quad V_0'(r) = c_1 + \sum_{i=2}^{\infty} i c_i r^{i-1}$$

$$\text{und } V_0''(r) = \sum_{i=2}^{\infty} i(i-1) c_i r^{i-2}$$

$$\ell = 1: \quad V_1(r) = c_0 r + \sum_{i=1}^{\infty} c_i r^{i+1}, \quad V_1'(r) = \sum_{i=0}^{\infty} (i+1) c_i r^{i+1-1}$$

$$\text{und } V_1''(r) = \sum_{i=0}^{\infty} (i+1)(i+1-1) c_i r^{i+1-2}$$

$$\ell \geq 1: \quad V_\ell'(r) = \sum_{i=0}^{\infty} (i+\ell) c_i r^{i+\ell-1} \quad \text{und} \quad V_\ell''(r) = \sum_{i=0}^{\infty} (i+\ell)(i+\ell-1) c_i r^{i+\ell-2},$$

also gelten die Beziehungen für  $\ell = 0, 1, 2, \dots$  und somit folgt

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{\infty} (i+\ell)(i+\ell-1) c_i r^{i+\ell-2} + 2 \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_B}\right) \sum_{i=0}^{\infty} (i+\ell) c_i r^{i+\ell-1} \\ + \sum_{i=0}^{\infty} c_i r^{i+\ell} \left(\frac{B}{r} - \frac{2}{rr_B} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right) = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\Leftrightarrow \sum_{i=0}^{\infty} [(i+\ell)(i+\ell-1)c_i + 2(i+\ell)c_i - \ell(\ell+1)c_i] r^{i+\ell-2} \\
&\quad + \sum_{i=0}^{\infty} \left( -\frac{2}{r_B}(i+\ell)c_i + \left[ B - \frac{2}{r_B} \right] c_i \right) r^{i+\ell-1} = 0 \\
&\Leftrightarrow \sum_{i=0}^{\infty} [(i+\ell)(i-\ell-1)c_i + 2(i+\ell)c_i - \ell(\ell+1)c_i] r^{i+\ell-2} \\
&\quad + \sum_{j=1}^{\infty} \left( -\frac{2}{r_B}(j+\ell-1) + \left[ B - \frac{2}{r_B} \right] \right) c_{j-1} r^{j+\ell-2} = 0 \\
&\Leftrightarrow \sum_{i=1}^{\infty} \left( [(i+\ell)(i+\ell+1) - \ell(\ell+1)]c_i + \left[ B - (i+\ell)\frac{2}{r_B} \right] c_{i-1} \right) r^{i+\ell-2} = 0,
\end{aligned}$$

folglich müssen alle Koeffizienten verschwinden, und deshalb gilt dann die Rekursionsformel

$$\begin{aligned}
&[(i+\ell)(i+\ell+1) - \ell(\ell+1)]c_i + \left[ B - (i+\ell)\frac{2}{r_B} \right] c_{i-1} = 0 \\
&\Leftrightarrow c_i = c_{i-1} \frac{2}{r_B} \frac{i+\ell - B\frac{r_B}{2}}{(i+\ell)(i+\ell+1) - \ell(\ell+1)}.
\end{aligned}$$

für große  $i$ , d.h. größer als Eins und  $B\frac{r_B}{2}$ , gilt also die Approximation

$$c_i \approx c_{i-1} \frac{i}{i^2} \frac{2}{r_B} = c_{i-1} \frac{2}{r_B} \frac{1}{i} \quad \Longrightarrow \quad c_i \approx \frac{1}{i!} \left( \frac{2}{r_B} \right)^i$$

und somit erhalten wir für große  $r$  (wo in der Summe die Terme mit großen  $i$  dominieren) schließlich

$$V_\ell(r) \propto r^\ell \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} \left( \frac{2}{r_B} \right)^i r^i = r^\ell \exp\left(\frac{2r}{r_B}\right).$$

Dies würde jedoch bedeuten, dass sich für große  $r$  die radiale Funktion  $R_\ell(r)$  wie

$$R_\ell(r) = \exp\left(-\frac{r}{r_B}\right) V_\ell(r) \approx r^\ell \exp\left(\frac{r}{r_B}\right)$$

verhält, allerdings ist diese nicht normierbar. Man erhält also nur dann eine normierbare Wellenfunktion, wenn der Koeffizient in der Rekursionsformel für irgendein  $i = n_r$  identisch Null wird, denn dann sind auch alle weiteren Koeffizienten gleich Null. Das modifizierte Potential  $V_\ell(r)$  wird dann zu einem gewöhnlichen Polynom, welches mit dem Faktor  $\exp\left(-\frac{r}{r_B}\right)$  eine normierbare Funktion  $R_\ell(r)$  liefert. Man erhält somit eine normierbare Lösung, wenn

$$i + \ell - B\frac{r_B}{2} = 0 \quad \text{für irgendein } i = n_r = 1, 2, 3, \dots$$

gilt. Setzt man nun  $n_r + \ell = 1, 2, \dots$ , so findet man  $B\frac{r_B}{2} = \ell + n_r$  und es folgt  $B^2 r_B^2 = 4n^2$ . Die explizite Berechnung findet sich auf den Blättern 214a) - 214c). Mit  $r_B = \sqrt{-\frac{\hbar^2}{2mE}}$  und  $B = \frac{2ma}{\hbar^2}$  folgt für die Energieeigenzustände  $E_n$  dann weiter

$$E = E_n = E_{n_r, \ell} = -\frac{1}{2} \frac{ma^2}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad \text{mit } n = n_r + 1 = 1, 2, 3, \dots$$

dies sind die möglichen (negativen) Eigenwerte. Man berechne nun weiter die zugehörigen Energieeigenfunktionen

$$\psi_{E_n, \ell, \ell_z}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n, \ell}(r) Y_{\ell, \ell_z}(\vartheta, \varphi)$$

wobei die  $R_{n, \ell}(r)$  normierbare Lösungen der eingangs betrachteten Differentialgleichungen sind. Man verwende nun

$$r_B := r_{B, n} = \sqrt{-\frac{1}{A_n}} = \hbar \sqrt{-\frac{1}{2mE_n}} = \hbar \sqrt{\frac{\hbar^2}{m^2 a^2} n^2} = \frac{\hbar^2}{ma} n = r_0 n ,$$

man bezeichnet  $r_0$  als **Bohrschen Radius**. Dazu definieren wir die Variable  $\rho = \frac{r}{r_B}$ , wodurch die zu betrachtende Differentialgleichung die Form

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - 1 + Br_B \frac{1}{\rho} + C \frac{1}{\rho^2} \right] R_{n, \ell}(\rho r_B) = 0$$

annimmt. Weiter faktorisiere man den Radialanteil  $R_{n, \ell}$  dann gemäß  $R_{n, \ell}(\rho r_B) = \rho^\ell e^{-\rho} w_{n, \ell}(\rho)$ , dann muss sich  $w_{n, \ell}(\rho)$  für  $\rho \rightarrow 0$  wie eine Konstante verhalten, und man erhält als Bestimmungsgleichung für  $w_{n, \ell}$

$$\left[ \rho \frac{d^2}{d\rho^2} + 2(\ell + 1 - \rho) \frac{d}{d\rho} + [Br_B - 2(\ell + 1)] \right] w_{n, \ell}(\rho) = 0 .$$

Setzt man dann noch  $z := 2\rho$ , so gilt

$$\left[ z \frac{d^2}{dz^2} + (2\ell + 2 - z) \frac{d}{dz} + \left( \frac{1}{2} Br_B - (\ell + 1) \right) \right] w_{n, \ell}\left(\frac{z}{2}\right) = 0 .$$

Diese Gleichung hat die Form einer aus der Mathematik bekannt Gleichung, der sogenannten **konfluent hypergeometrischen Differentialgleichung**, welche im Allgemeinen die Gestalt

$$\left( z \frac{d^2}{dz^2} + (\gamma - z) \frac{d}{dz} - \alpha \right) F(z) = 0$$

für  $z \in \mathbb{C}$  hat, wobei  $\alpha \in \mathbb{C}$  beliebig und  $\gamma \in \mathbb{C}$  mit  $\gamma \neq 0, -1, -2, \dots$  liegt. Die allgemeine Lösung dieser Differentialgleichung lautet

$$F(z) = F(\alpha, \gamma; z) = \lambda F_{1,1}(\alpha, \gamma; z) + \mu z^{1-\gamma} F_{1,1}(\alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma; z)$$

wobei hier  $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$  beliebig ist. Dabei ist  $F_{1,1}$  die **konfluent hypergeometrische Funktion**, die sogenannte Kummer-Funktion, die durch die für alle  $z$  konvergente Reihe

$$F_{1,1}(\alpha, \gamma; z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha + 1)}{\gamma(\gamma + 1)} \frac{z^2}{2!} + \dots$$

definiert ist. Falls  $\alpha$  eine negative ganze Zahl ist, wird  $F_{1,1}$  zu einem Polynom vom Grad  $-\alpha$ . Man beachte auch, dass der zweite Teil der allgemeinen Lösung bei  $z \rightarrow 0$  singularär ist. Bei der zu untersuchenden Differentialgleichung handelt es sich um eine konfluent hypergeometrische Differentialgleichung mit

$$\gamma = 2\ell + 2 \quad \text{und} \quad \alpha = -\left( \frac{1}{2} Br_B - \ell - 1 \right) = -(n_r - 1) = -n_r + 1 ,$$

die allgemeinste nicht singuläre Lösung ist also

$$w_{n,\ell}(z = 2\rho) = \lambda F_{1,1}(\alpha = -n_r + 1, \gamma = 2\ell + 2; z = 2\rho) .$$

Für ganzzahlige Koeffizienten  $\alpha, \gamma$  stimmen die  $F_{1,1}(\alpha, \gamma; z)$  mit den zugeordneten **Laguerre-Polynomen**  $L_q^p(z)$  überein, welche durch

$$L_q^p(z) = (-1)^p \frac{(q!)^2}{p!(q-p)!} F_{1,1}(-(q-p), p+1; z)$$

gegeben sind, wobei  $L_q^p(z)$  außerdem die folgende Potenzreihendarstellung

$$L_q^p(z) = \sum_{k=0}^{q-p} (-1)^{k+1} \frac{(q!)^2}{(q-p-k)!(p+k)!k!} z^k$$

hat und zudem gemäß  $L_q^p(z) = \frac{d^p}{dz^p} L_q(z)$  mit den **gewöhnlichen Laguerre-Polynomen**  $L_q(z) = L_q^0(z)$  verknüpft sind, wobei diese wiederum durch

$$L_q(z) = e^z \frac{d^q}{dz^q} (e^{-z} z^q)$$

definiert sind. Hier ist  $-(q-p) = -(n_r - 1)$  und  $p+1 = 2\ell + 2 \iff p = 2\ell + 1$  und  $q = n_r - 1 + p = n + 1$ . Es ergibt sich also schließlich

$$w_{n,\ell}(\rho) = \lambda L_{n+\ell}^{2\ell+1}(z = 2\rho) .$$

Die **gesamte Energie-Eigenfunktion** zum Eigenwert  $E_n$  ist also durch den Radialteil

$$R_{n,\ell}(r) = N_{n,\ell} \exp\left(-\frac{r}{r_B}\right) \left(\frac{2r}{r_{B,n}}\right)^\ell L_{n+\ell}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{r_{B,n}}\right) \quad \text{mit} \quad N_{n,\ell} = -2 \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{[(n+\ell)!]^3 n r_{B,n}^3}}$$

gegeben, wobei  $L_{n+\ell}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{r_{B,n}}\right)$  ein Polynom vom Grad  $q-p = n_r - 1$  ist. Man beachte, dass die Energie-Eigenwerte  $E_n$  nur von  $n = n_r + \ell$  mit  $\ell = 0, 1, 2, \dots$  und  $n_r = 1, 2, \dots$  abhängen. Sie sind also entartet, zusätzlich zur Entartung hinsichtlich der  $z$ -Komponente  $\ell_z$ . Zu einem gegebenem  $E_n$ , d.h. zu gegebenem  $n$  gehören also die Eigenzustände  $\psi_{n,\ell,\ell_z}$  mit

$$\ell = 0 \ (n_r = n) \quad \ell = 1 \ (n_r = n - 1) \quad \ell = 2 \ (n_r = n - 2) \quad \dots \quad \ell = n - \ell \ (n_r = 1) ,$$

und zu jedem  $\ell$  noch  $\ell_z = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$ , d.h. dieselbe Energie wird von verschiedenen Drehimpulsen  $\ell$  und verschiedenen Ausrichtungen der  $z$ -Drehimpulskomponente  $\ell_z$  realisiert. Folglich ist der Entartungsgrad der Energie gleich

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{n-1} (2\ell + 1) &= (0 + 1) + (2 + 1) + (4 + 1) + \dots + (2(n-1) + 1) \\ &= 1 + (1 + 2) + (1 + 4) + \dots + (1 + 2(n-1)) \\ &= n + 2(1 + 2 + \dots + n - 1) = n + (n-1)n = n^2 . \end{aligned}$$

Die zusätzliche Entartung (zusätzlich zur  $(2\ell + 1)$ -fachen Entartung für jedes  $\ell$ ) rührt davon her, dass im Coulomb-Potential eine weitere Erhaltungsgröße (zusätzlich zu  $\hat{L}^2$ ) existiert, nämlich der Operator des Runge-Lenz-Vektors

$$\hat{R}_L = \frac{1}{2m} \left( \hat{P} \times \hat{L} - \hat{L} \times \hat{P} \right) - a\hat{R}^{-1} \hat{X} .$$

Der Runge-Lenz-Vektor ist ein polarer Vektor, der immer auf das Perihel zeigt.

## 16.4. Das Wasserstoffatom und einelektronige Ionen

### 16.4.1. Kompatible Operatoren und Annahmen

Das vorige Ergebnis soll nun noch an einem konkreten Beispiel ausgewertet werden. Wir betrachten dazu zwei vorerst spinlose Teilchen. Ein solches Zwei-Teilchen-System besitzt als Observablen  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{L}_1, \vec{L}_2$ , also ist

$$\hat{X}_1, \hat{X}_2, \hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{L}_1, \hat{L}_2$$

ein maximaler Satz von Operatoren, wobei die vektorielle Drehimpuls-Operatoren lediglich Platzhalter sind. Die beiden Teilchen seien außerdem verschieden, beispielsweise ein Elektron und ein Proton. Alle Operatoren, die sich nur auf Teilchen 1 beziehen, müssen dann notwendig mit allen Operatoren von Teilchen 2 vertauschen, es gilt also

$$[\hat{X}_{1,i}, \hat{X}_{2,j}] = [\hat{P}_{1,i}, \hat{P}_{2,j}] = 0 \quad \text{und} \quad [\hat{X}_{1,i}, \hat{P}_{2,j}] = [\hat{X}_{2,i}, \hat{P}_{1,j}] = 0$$

und außerdem natürlich  $[\hat{X}_{1,i}, \hat{X}_{1,j}] = [\hat{P}_{1,i}, \hat{P}_{1,j}] = 0$  sowie  $[\hat{X}_{1,i}, \hat{P}_{1,j}] = i\hbar\delta_{ij}$ . Daher wählen wir die Ortsdarstellung, die von den gemeinsamen Eigenvektoren  $|\vec{r}_1, \vec{r}_2\rangle$  der Ortsoperatoren aufgespannt werden. Für die Wellenfunktion eines beliebigen Zwei-Teilchen-Zustands  $|\psi, t\rangle$  erhält man dann

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) := \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \psi, t \rangle,$$

dies ist eine Funktion  $\mathbb{R}^{6+1} \rightarrow \mathbb{C}$ . In dieser Darstellung sehen die Impuls-Operatoren dann wie

$$\hat{P}_1 \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{r}_1} \quad \text{und} \quad \hat{P}_2 \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{r}_2}$$

aus. Angenommen die Teilchen wechselwirken - wenn keine äußere Kraft vorliegt - gemäß einem Potential  $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ , dann nimmt der Hamilton-Operator die Form

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_1}\hat{P}_1^2 + \frac{1}{2m_2}\hat{P}_2^2 + V(\hat{X}_1 - \hat{X}_2) \quad \rightarrow \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_{\vec{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_{\vec{r}_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

an. Insbesondere ist dieser Operator dann translationsinvariant, also  $\hat{J}_\alpha \hat{H} \hat{J}_\alpha^\dagger = \hat{H}$ , der Gesamtimpuls  $\vec{P} = \vec{P}_1 + \vec{P}_2$  ist deshalb eine Erhaltungsgröße, bzw. in Operatorformulierung

$$\hat{P} = \hat{P}_1 + \hat{P}_2 \quad \Longrightarrow \quad [\hat{H}, \hat{P}] = 0.$$

### 16.4.2. Umformulierung in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten

Als nächstes verwenden wir nun Schwerpunkts- und Relativkoordinaten zur Beschreibung des Problems. Hier gilt

$$\begin{aligned} \vec{R}_{\text{CM}} &:= \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{M} \rightarrow \frac{1}{M} \left( m_1\hat{X}_1 + m_2\hat{X}_2 \right) \quad \text{und} \quad \vec{r} := \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \rightarrow \hat{X}_1 - \hat{X}_2 \\ \vec{p}_{\text{CM}} &:= \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \quad \text{und} \quad \vec{p} = \frac{m_2\vec{p}_1 - m_1\vec{p}_2}{M} = \mu \left( \frac{\vec{p}_1}{m_1} - \frac{\vec{p}_2}{m_2} \right) \end{aligned}$$

für Schwerpunkt, Relativkoordinaten, Schwerpunkts- und Relativimpuls, wobei die Größen die Vertauschungsrelationen  $[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$  und  $[\hat{R}_{\text{CM},i}, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$  erfüllen. Außerdem gilt für die

Laplace-Operatoren dann

$$\begin{aligned}\Delta_{\vec{r}_1} &= \frac{\partial}{\partial r_{1,i}} \frac{\partial}{\partial r_{1,i}} = \frac{\partial}{\partial r_{1,i}} \left( \frac{\partial R_j}{\partial r_{1,i}} \frac{\partial}{\partial R_j} + \frac{\partial r_j}{\partial r_{1,i}} \frac{\partial}{\partial r_j} \right) = \frac{\partial}{\partial r_i} \left( \frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial R_i} + \frac{\partial}{\partial r_i} \right) \\ &= \left( \frac{m_1}{M} \right)^2 \frac{\partial}{\partial R_i} \frac{\partial}{\partial R_i} + \frac{\partial}{\partial r_i} \frac{\partial}{\partial r_i} + 2 \frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial R_i} \frac{\partial}{\partial r_i} \quad \text{und analog} \\ \Delta_{\vec{r}_2} &= \left( \frac{m_2}{M} \right)^2 \frac{\partial}{\partial R_i} \frac{\partial}{\partial R_i} + \frac{\partial}{\partial r_i} \frac{\partial}{\partial r_i} - 2 \frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial R_i} \frac{\partial}{\partial r_i}\end{aligned}$$

sodass wir für damit dann

$$\begin{aligned}\frac{\Delta_{\vec{r}_1}}{2m_1} + \frac{\Delta_{\vec{r}_2}}{2m_2} &= \frac{1}{2} \left[ \frac{m_1}{M^2} \Delta_R + \frac{1}{m_1} \Delta_r + \frac{2}{M} \frac{\partial}{\partial R_i} \frac{\partial}{\partial r_i} + \frac{m_2}{M^2} \Delta_R + \frac{1}{m_2} \Delta_r - \frac{2}{M} \frac{\partial}{\partial R_i} \frac{\partial}{\partial r_i} \right] \\ &= \frac{1}{2\mu} \Delta_R + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \Delta_r \quad \text{wobei} \quad \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} = \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} = \frac{1}{\mu}\end{aligned}$$

erhalten. Der zuvor aufgestellte Hamilton-Operator lautet in den Schwerpunkts- und Relativ-Koordinaten dann

$$\hat{H} = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{2\mu} \Delta_R + \frac{1}{2} \Delta_r + V(\vec{r}) \right],$$

sodass wir als zeitabhängige Schrödinger-Gleichung damit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{R}, \vec{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2} \Delta_r + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{R}, \vec{r}, t)$$

erhalten.

### 16.4.3. Lösung der zugehörigen Schrödinger-Gleichung

Selbstverständlich soll diese Gleichung nun gelöst werden, man ermittle also nun die stationären Zwei-Teilchen-Wellenfunktionen, welche von der Form

$$\psi(\vec{R}, \vec{r}, t) = \exp\left(-\frac{iE_{\text{tot}}t}{\hbar}\right) \psi(\vec{R}, \vec{r})$$

ist, eingesetzt in die Schrödinger-Gleichung erhält man dann folglich

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2} \Delta_r + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{R}, \vec{r}) = E_{\text{tot}} \psi(\vec{R}, \vec{r}).$$

Mittels dem Separationsansatz  $\psi(\vec{R}, \vec{r}) = \Phi(\vec{R})\psi(\vec{r})$  findet sich dann weiter

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_R \right) \Phi(\vec{R}) + \Phi(\vec{R}) \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) &= E_{\text{tot}} \Phi(\vec{R}) \psi(\vec{r}) \\ \iff \frac{1}{\Phi(\vec{R})} \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_R \Phi(\vec{R}) \right) + \frac{1}{\psi(\vec{r})} \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) &= E_{\text{tot}},\end{aligned}$$

wobei der erste Summand nur von  $\vec{R}$  und der zweite nur von  $\vec{r}$  abhängt. Wie schon zuvor müssen dann beide identisch einer Konstanten  $E_{\text{CM}}$  bzw.  $E_{\text{Rel}}$  sein. Somit erhält man zwei Gleichungen

$$\text{Freie Gleichung:} \quad -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_R \Phi(\vec{R}) = E_{\text{CM}} \Phi(\vec{R})$$

$$\text{Relativ-Gleichung:} \quad \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = E_{\text{Rel}} \psi(\vec{r}),$$

wobei diese über  $E_{\text{CM}} + E_{\text{Rel}} = E_{\text{tot}}$  zusammenhängen. Eine mögliche Lösung für die freie Gleichung ist

$$\Phi(\vec{R}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(\frac{i\vec{p}\vec{R}}{\hbar}\right) \implies \psi(\vec{R}, \vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-i\frac{\vec{p}^2 t}{2\mu\hbar}\right) \exp\left(\frac{i\vec{p}\vec{R}}{\hbar}\right),$$

dies ist eine gemeinsame Eigenfunktion von  $\hat{P}_x$ ,  $\hat{P}_y$  und  $\hat{P}_z$  und natürlich insbesondere von  $\hat{H}$ , aber auch von  $\hat{H}_{\text{Rel}}$ ,  $\hat{L}^2$  und  $\hat{L}_z$ . Man wählt dann meist  $\vec{p} = 0$ , dies führt zu einer reinen Relativbewegung.

Betrachten wir dann speziell das System eines Protons und eines Elektrons. Das elektrische Wechselwirkungspotential zwischen beiden ist durch  $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = V(\vec{r}) = V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$  gegeben, sodass für die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r + V(\vec{r})\right]\psi_E(r, \vartheta, \varphi) = E\psi_E(r, \vartheta, \varphi) \quad \text{mit} \quad \mu = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} \approx \frac{m_p m_e}{m_p} = m_e$$

folgt, eine Lösung dieser ist dann durch

$$\psi_{E, \ell, \ell_z}(r, \vartheta, \varphi) = N_{n, \ell} \exp\left(-\frac{r}{r_B}\right) \left(\frac{2r}{r_B}\right)^\ell L_{n+\ell}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{r_B}\right) Y_{\ell, \ell_z}(r, \vartheta, \varphi)$$

gegeben. Hierbei handelt es sich um Polynome vom Grad  $n_r - 1 = n_1 - 1$ . Für  $E < 0$  (Bindungszustände) sind diese Eigenfunktionen nur normierbar, falls

$$E_n = -\frac{m_e a^2}{2} \frac{1}{\hbar^2 n^2} = -\frac{m_e^2 c^2}{2} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 Z^2 \frac{1}{n^2} = -\underbrace{\frac{m_e c^2}{2} \alpha^2}_{13.6 \text{ eV}} Z^2 \frac{1}{n^2} \quad \text{mit} \quad \underbrace{\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}}_{\text{Feinstrukturkonstante}} = \frac{1}{137.036}$$

$$r_B = r_{B, n} = \hbar \sqrt{\frac{1}{2m_e |E_n|}} = \frac{r_0}{Z} n \quad \text{mit} \quad r_0 = \frac{\hbar}{m_e c} \frac{1}{\alpha} = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

ist, wobei  $\alpha$  die elektromagnetische Feinstrukturkonstante ist und  $r_0$  als Bohrscher Radius bezeichnet wird. Die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit dafür das Elektron zwischen  $r$  und  $r + dr$  zu finden ist durch

$$\iiint_V |\psi(r, \vartheta, \varphi)|^2 d^3\vec{r} = \int |R(r)|^2 r^2 dr = r^2 |R_{n\ell}|^2$$

gegeben, sodass man den radialen Erwartungswert

$$\langle r \rangle = \iiint_V d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}, t) r \psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{2} (3n^2 - \ell(\ell+1)) r_0$$

erhält. Man betrachte speziell einen Zustand mit hohem  $n$  und  $\ell = \ell_{\text{max}} = n - 1$ , hier gilt

$$\langle r \rangle = n \left(n + \frac{1}{2}\right) r_0 \quad \text{und} \quad R_{n, n-1}(r) = N_{n, n-1} \exp\left(-\frac{r}{r_B}\right) r^{n-1} L_{2n-1}^{2n-1}\left(\frac{2r}{r_B}\right),$$

wobei das Laguerre-Polynom  $L_{2n-1}^{2n-1}\left(\frac{2r}{r_B}\right)$  konstant ist, da es in diesem Spezialfall vom Grad  $n_r - 1 = n - 1 = n - 1 - \ell = n - (n - 1) - 1 = 0$  ist. Mit dem Erwartungswert

$$\langle r^2 \rangle = n^2 \left(n + \frac{1}{2}\right) (n+1) r_0^2$$

und der Definition  $(\Delta r)^2 = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2$  des mittleren quadratischen Fehlers folgt dann

$$\Delta r = \frac{1}{2} n \sqrt{2n+1} r_0 = \frac{\langle r \rangle}{\sqrt{2n+1}}.$$

Für sehr große Energie-Quantenzahlen  $n$  folgt dann für den relative Breite des Aufenthalts

$$\frac{\Delta r}{\langle r \rangle} \propto \frac{1}{\sqrt{2n+1}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

Außerdem beachte noch das Verhalten der speziellen Wellenfunktionen  $\psi_{n,n-1,\ell_z} = -(n-1)$  und  $\psi_{n-1, -(n-1), \ell_z}(\vartheta, \varphi) \propto \sin^n \vartheta e^{-i(n-1)\varphi}$ , wobei der Faktor  $\sin^2 \vartheta$  für großes  $n$  nur nahe bei  $\vartheta = \frac{\pi}{2}$  wesentlich verschieden von Null ist, d.h. das Teilchen ist mit großer Wahrscheinlichkeit in der  $x$ - $y$ -Ebene anzutreffen. Für  $n \rightarrow \infty$  verhält sich das Teilchen also quasi klassisch, das Teilchen bewegt sich dann annähernd auf einer Kreisbahn.

## 17. Identische Teilchen

In der klassischen Mechanik ist es prinzipiell egal, ob in einem Mehr-Teilchen-System lauter verschiedene oder gleiche Teilchen vorkommen, in der Quantenmechanik zeigt sich eine interessante Phänomenologie für identische Teilchen.

### 17.1. Vertauschbarkeit von identischen Teilchen

Hierbei handelt es sich um Teilchen derselben Art, d.h. sie stimmen in allen inneren Quantenzahlen (Ladung, Masse, Spin, etc.) überein. In der Quantenmechanik sind identische Teilchen insbesondere ununterscheidbar, d.h. man kann sie durch keinerlei Messung unterscheiden, und deshalb nicht längs einer Bahn verfolgen. Betrachten wir beispielsweise ein System von  $N = 2$  Teilchen:

- *Zwei unterscheidbare Teilchen (Elektron, Proton):* In der  $\hat{X}$ - $\hat{S}_z$ -Darstellung gilt

$$\psi(\vec{r}_a, \sigma_a, \vec{r}_b, \sigma_b, t) =: \psi(X_a, X_b, t) =: \psi(a, b, t)$$

für die Wellenfunktion dieses Systems. Es ist dann  $|\psi(X_a, X_b, t)|^2$  die Wahrscheinlichkeitsdichte bei einer Messung zur Zeit  $t$  das Proton bei  $\hat{r}_a$  mit Spinzustand  $\sigma_a$  und gleichzeitig das Elektron bei  $\vec{r}_b$  mit Spin  $\sigma_b$  anzutreffen. Detektoren können beispielsweise aufgrund unterschiedlicher Masse leicht zwischen Proton und Elektron unterscheiden, folglich ist allgemein die Wahrscheinlichkeit

$$W_{12} = |\psi(X_a, X_b)|^2 \neq |\psi(X_b, X_a)|^2 = W_{21}$$

nicht symmetrisch unter Vertauschung der beiden Teilchen.

- *Zwei identische Teilchen (zwei Elektronen):* In diesem Fall hat man wegen der Ununterscheidbarkeit der beiden Teilchen in den Detektoren die Symmetrie

$$W_{12} = |\psi(X_a, X_b)|^2 = |\psi(X_b, X_a)|^2 = W_{21}$$

der Wahrscheinlichkeiten unter Vertauschung. Wir bezeichnen mit  $\hat{P}_{12}$  den Austauschoperator, der Teilchen  $a$  und  $b$  miteinander wechselt. In der Ortsdarstellung ist seine Wirkung dann  $\psi(X_b, X_a) = \hat{P}_{12}^{\hat{X}} \psi(X_a, X_b)$ , sodass insbesondere  $\hat{P}_{12}^2 = \text{Id}$  gilt.

Bei ununterschiedbaren Teilchen beschreibt  $\psi(X_a, X_b)$  also denselben Zustand wie  $\psi(X_b, X_a)$ , es muss also

$$\psi(X_b, X_a) = \hat{P}_{12}^{\hat{X}} \psi(X_a, X_b) = e^{i\varphi} \psi(X_a, X_b) \quad \implies \quad e^{2i\varphi} = 1$$

gelten, also  $\varphi = 0$  oder  $\varphi = \pi$  und deshalb  $e^{i\varphi} = 1$  oder  $-1$ . Insgesamt erhalten wir somit das Verhalten  $\psi(X_a, X_b) = \pm \psi(X_b, X_a)$ , d.h. die Wellenfunktion der beiden Teilchen muss entweder **symmetrisch** oder **antisymmetrisch** unter Vertauschung der beiden Teilchen sein.

Man betrachte nun  $N$  identische Teilchen, wobei  $N$  beliebig sei. Für einen Zustand  $|\psi\rangle$  in der  $\hat{X}$ - $\hat{S}_z$ -Darstellung hat man dann

$$|\psi\rangle \rightarrow \langle \vec{r}_1, \sigma_1, \dots, \vec{r}_N, \sigma_N | \psi, t \rangle =: \psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \dots, \vec{r}_N, \sigma_N) =: \psi(X_1, \dots, X_N) =: \psi(1, \dots, N) .$$

Die Observablen des Systems seien  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$ , usw., von denen man dann den Erwartungswert

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \int dx_1 \cdots \int dx_N \psi^*(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) \hat{A}^{\hat{X}} \psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N)$$

betrachte. Wegen der Ununterscheidbarkeit der Teilchen muss dies gleich dem vertauschten Zustands-Erwartungswert

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \int dx_1 \cdots \int dx_N \psi^*(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) \hat{A}^{\hat{X}} \psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) \quad (17.1)$$

sein. Die Transformation der Vertauschung von  $i$  und  $j$  wird als  $\hat{\mathcal{P}}_{ij}$  bezeichnet, wobei die unitäre Darstellung dieses Operators im Wellenfunktionsraum durch

$$\hat{\mathcal{P}}_{ij} \psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = \psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N)$$

gegeben sei. Es gilt dann  $\hat{\mathcal{P}}_{ij}^2 = \text{Id}$ , d.h.  $\hat{\mathcal{P}}_{ij}^{-1} = \hat{\mathcal{P}}_{ij} = \hat{\mathcal{P}}_{ij}^\dagger$  wegen der Unitarität, also ist der Vertauschungsoperator  $\hat{\mathcal{P}}_{ij}$  selbstadjungiert. Dann kann auch der Erwartungswert (17.1) als

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \hat{\mathcal{P}}_{ij} \psi | \hat{A} | \hat{\mathcal{P}}_{ij} \psi \rangle = \langle \psi | \hat{\mathcal{P}}_{ij}^\dagger \hat{A} \hat{\mathcal{P}}_{ij} | \psi \rangle$$

geschrieben werden, und da der Zustand  $|\psi\rangle$  beliebig ist, folgt somit  $\hat{A} = \hat{\mathcal{P}}_{ij}^\dagger \hat{A} \hat{\mathcal{P}}_{ij}$  oder eben  $[\hat{A}, \hat{\mathcal{P}}_{ij}] = 0$ . Alle Observablen-Operatoren des betrachteten Systems mit identischen Teilchen müssen also mit dem Vertauschungsoperatoren  $\hat{\mathcal{P}}_{ij}$  kommutieren. Dies gilt insbesondere für den Hamilton-Operator  $\hat{H}$  der Gesamtenergie, also  $[\hat{H}, \hat{\mathcal{P}}_{ij}] = 0$ . Weiter sind die Operatoren  $\hat{\mathcal{P}}_{ij}$  selbst als selbstadjungierte Operatoren wieder Observablen mit den Eigenwerten  $\pm 1$ , denn ist  $|\lambda\rangle$  ein Eigenvektor von  $\hat{\mathcal{P}}_{ij}$ , dann gilt

$$\hat{\mathcal{P}}_{ij} |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle \quad \Longrightarrow \quad \hat{\mathcal{P}}_{ij}^2 |\lambda\rangle = \lambda^2 |\lambda\rangle \quad \Longrightarrow \quad \lambda = \pm 1 .$$

Es gibt folglich gemeinsame Eigenvektoren  $|E, \lambda\rangle$  von  $\hat{H}$  und  $\hat{\mathcal{P}}_{ij}$ .

Jede beliebige Permutation kann bekanntlich als Produkt von Transpositionen geschrieben werden. Im Allgemeinen besteht der Operator einer beliebigen Observablen eines  $N$ -Teilchen-Systems aus Teilen, die sich auf die einzelnen Teilchen beziehen, beispielsweise

$$\vec{P} = \vec{P}_1 + \vec{P}_2 + \dots + \vec{P}_N \quad \Longrightarrow \quad \hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \hat{P}_i^2 + \sum_{i \neq j} V_{ij}(\hat{X}_i, \hat{X}_j) .$$

Dann gilt allgemein: Für eine beliebige Transposition von  $i$  und  $j$  nicht notwendig identischer Teilchen

$$\hat{\mathcal{P}}_{ij} B(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = B(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) .$$

Zu Beweis betrachte die Situation in der  $\hat{X}$ - $\hat{S}_z$ -Darstellung, dort folgt dann

$$\begin{aligned} & \hat{\mathcal{P}}_{ij}^{\hat{X}} (B^{\hat{X}}(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) \psi^{\hat{X}}(X_1, \dots, X_i, \dots, X_j, \dots, X_N)) \\ & = B^{\hat{X}}(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) \psi^{\hat{X}}(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) =: B^{\hat{X}} \hat{\mathcal{P}}_{ij} \psi^{\hat{X}} \end{aligned}$$

Speziell für ein System von identischen Teilchen gilt außerdem

$$\hat{\mathcal{P}}_{ij}B(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = B(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N)\hat{\mathcal{P}}_{ij},$$

es folgt also insbesondere die Gleichheit  $B(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = B(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N)$  für beliebiges  $\hat{\mathcal{P}}_{ij}$ . Die Observablen eines Systems von  $N$  identischen Teilchen müssen also total symmetrisch unter Vertauschung der den einzelnen Teilchen zugeordneten Operator-Teilen sein. Damit ist dann automatisch gewährleistet, dass der Erwartungswert einer beliebigen Observablen operativ invariant unter Vertauschung der Teilchen ist, egal wie sich die Wellenfunktion unter dieser Vertauschung verhält.

Man betrachte dann speziell den Hamilton-Operator  $\hat{H} = \hat{H}(1, \dots, N)$ :

- Sei  $N = 2$ , also  $\hat{H} = \hat{H}(1, 2)$ , dann ist  $[\hat{\mathcal{P}}_{ij}, \hat{H}] = 0$ . Es existieren also gemeinsame Eigenvektoren von  $\hat{H}$  und  $\hat{\mathcal{P}}_{ij}$ . Die Eigenwerte der Vertauschungs-Operatoren  $\hat{\mathcal{P}}_{ij}$  sind  $\lambda = \pm 1$ . Sei  $|E\rangle$  der Eigenvektor des Hamilton-Operators  $\hat{H}$ , also mit  $\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$ , dann gilt für  $\hat{\mathcal{P}}_{12}$ , dass auch  $\hat{\mathcal{P}}_{12}|E\rangle$  ein Eigenvektor von  $\hat{H}$  zum selben Eigenwert ist, denn

$$\hat{H}\hat{\mathcal{P}}_{12}|E\rangle = \hat{\mathcal{P}}_{12}\hat{H}|E\rangle = \hat{\mathcal{P}}_{12}E|E\rangle = E\hat{\mathcal{P}}_{12}|E\rangle.$$

Entweder ist dann  $\hat{\mathcal{P}}_{12}|E\rangle = \lambda|E\rangle$  mit  $\lambda = \pm 1$ , sprich  $|E\rangle$  ist als gemeinsamer Eigenvektor auch Eigenvektor von  $\hat{\mathcal{P}}_{12}$ , oder es ist  $\hat{\mathcal{P}}_{12}|E\rangle \neq \lambda|E\rangle$ , dann ist  $E$  entartet - dies nennt man **Austauschentartung**.

Empirisch gilt, dass die in der Natur auftretenden Energie-Eigenvektoren immer auch Eigenvektoren des Vertauschungs-Operators  $\hat{\mathcal{P}}_{12}$  sind, d.h. sie sind symmetrisch bzw. antisymmetrisch unter Vertauschung von 1 und 2. Dabei gilt, dass sie für identische **Bosonen** symmetrisch sind, während sie für identische **Fermionen** antisymmetrisch sind. Dabei sind

- *Bosonen* Teilchen mit ganzzahligem Spin, wie etwa Photonen, Pionen, Mesonen, ...
- *Fermionen* Teilchen mit halbzahligem Spin, beispielsweise Elektronen, Protonen, Neutronen, ...
- Sei nun  $N$  beliebig. Es sind dann viele Vertauschungen möglich, die zugehörigen Operatoren vertauschen aber im Allgemeinen nicht miteinander. Trotzdem ist es möglich gemeinsame Eigenvektoren aller Transpositionen und von  $\hat{H}$  zu konstruieren, diese bilden allerdings keinen vollständigen Satz.

Falls ein solcher Eigenvektor auch Eigenvektor einer speziellen Transposition  $\hat{\mathcal{P}}_{ij}$  zum konkreten Eigenwert  $a_{ij} = \pm 1$  ist, also  $\hat{\mathcal{P}}_{ij}|\psi\rangle = a_{ij}|\psi\rangle$ , dann ist er notwendig auch Eigenvektor zu allen anderen Vertauschungen  $\mathcal{P}_{ij}$  mit demselben Eigenwert  $a_{ij}$ . Dieser gemeinsame Eigenwert ist zeitlich invariant.

Auf empirischem Weg findet man nun:

**5. Axiom der Quantenmechanik:** *Der Zustandsvektor eines System von  $N$  identischen Bosonen ist total symmetrisch, von  $N$  identischen Fermionen total antisymmetrisch unter beliebigen Permutationen der Teilchen. Für beliebige Permutationen  $\mathcal{P}$  mit  $\hat{U}(\mathcal{P}) = \hat{\mathcal{P}}$  gilt  $\hat{\mathcal{P}}\psi = \psi$  für identische Bosonen und  $\hat{\mathcal{P}}\psi = \text{sign}(\mathcal{P})\psi$  für identische Fermionen.*

## 17.2. Total symmetrische/antisymmetrische Wellenfunktionen

Um auf einer beliebigen Wellenfunktion  $|\psi\rangle$  einen entsprechenden total symmetrischen bzw. total antisymmetrischen Zustand zu erhalten, definiere wir die beiden Symmetrisierungs-Operatoren

$$\text{Sym.: } \hat{S} := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P} \in \mathfrak{S}_N} \hat{\mathcal{P}} \quad \text{und} \quad \text{Antisym.: } \hat{A} := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\mathcal{P} \in \mathfrak{S}_N} \text{sign}(\mathcal{P}) \hat{\mathcal{P}} .$$

Die Wurzel der kombinatorischen Vorfaktoren rührt daher, dass erst das Betragsquadrat eine Wahrscheinlichkeit liefert, in  $|\psi|^2$  finden sich dann die erwarteten Faktoren. Dann sind die nach Anwendung der Operatoren zugehörigen Wellenfunktionen

$$\psi_s(X_1, \dots, X_N) = \hat{S}\psi(X_1, \dots, X_N) \quad \text{bzw.} \quad \psi_a(X_1, \dots, X_N) = \hat{A}\psi(X_1, \dots, X_N)$$

total symmetrisch bzw. total antisymmetrisch.

### 17.2.1. Paulisches Ausschlussprinzip

Aus dem zuvor genannten fünften Axiom der Quantenmechanik folgt außerdem das wichtige **Paulische Ausschlussprinzip** in allgemeiner Gestalt, denn für identische Fermionen gilt wegen Antisymmetrie der Wellenfunktion

$$\psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) = -\psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) .$$

Sind die beiden Fermionen  $i$  und  $j$  aber identisch, also vertauschbar, so folgt daraus

$$\psi(1, \dots, i, \dots, i, \dots, N) = -\psi(1, \dots, i, \dots, i, \dots, N) ,$$

dann aber muss  $\psi = 0$  sein. Folglich können zwei identische Fermionen nicht gleichzeitig am selben Ort mit derselben Spinkonfiguration auftreten. Dieses Pauli-Prinzip lässt sich als Austauschwechselwirkung störungstheoretisch quantifizieren, und trägt entscheidend zum Aufbau des Periodensystems und zum Aufbau der Elektronen bei.

### 17.2.2. Wellenfunktion als Produkt von Ein-Teilchen-Funktionen

Man betrachte ab nun identische nicht miteinander wechselwirkende Teilchen, z.B.  $N$  Teilchen in einem gemeinsamen äußeren Potential  $V(\vec{r})$ . Das System sei dann durch den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} \hat{P}_i^2 + \sum_i V(\hat{X}_i)$$

beschrieben. Die Wellenfunktion des Gesamtsystems kann dann als ein Produkt von Ein-Teilchen-Funktionen zusammengesetzt werden, also

$$\psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2, \dots, \vec{r}_N, \sigma_N) = \varphi_a(\vec{r}_1, \sigma_1) \cdot \varphi_b(\vec{r}_2, \sigma_2) \cdots \varphi_n(\vec{r}_N, \sigma_N) ,$$

wobei die  $\varphi_i(\vec{r}_i, \sigma_i)$  Lösungen der bekannten Ein-Teilchen-Schrödinger-Gleichung

$$\left( \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + V(\hat{X}) \right) \varphi_i(\vec{r}_i, \sigma_i) = \epsilon_i \varphi_i(\vec{r}_i, \sigma_i)$$

sind, wobei die  $\epsilon_i$  die möglichen Ein-Teilchen-Energieniveaus bezeichnet. Die Summe  $\sum_i \epsilon_i = E$  liefert entsprechend die Gesamtenergie des beschriebenen Systems. Durch Einsetzen sieht man dann direkt

$$\sum_{i=1}^n \left( \frac{1}{2m} \hat{P}_i^2 + V(\hat{X}_i) \right) \psi = E\psi .$$

Im Falle von Wechselwirkungen bilden diese Produktwellenfunktionen eine Basis für die eigentlichen (in der Regel nicht mehr so einfach faktorisierbaren) Wellenfunktionen, d.h. die korrekten Wellenfunktionen bei Wechselwirkung sind von der Form

$$\psi(1, 2, \dots, N) = \sum_{a, \dots, n} c_{a, \dots, n} \varphi_a(1) \varphi_b(2) \cdots \varphi_n(N) .$$

Für identische Teilchen sind derartige Produkt-Wellenfunktionen sicherlich nicht zulässig, da sie nicht symmetrisch oder antisymmetrisch sein können. Man bildet deshalb

- für **identische Bosonen**  $\psi_s(X_1, \dots, X_N) = \hat{S} \varphi_a(1) \cdots \varphi_n(N)$  und
- für **identische Fermionen**  $\psi_a(X_1, \dots, X_N) = \hat{A} \varphi_a(1) \cdots \varphi_n(N)$

Man betrachte nun noch einmal speziell  $N$  identische und nicht miteinander wechselwirkende Fermionen, mit der antisymmetrisierten Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \left[ \varphi_a(1) \cdots \varphi_r(i) \cdots \varphi_s(j) \cdots \varphi_n(N) \pm \dots \right] \\ &= -\psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) = -\frac{1}{\sqrt{N!}} \left[ \varphi_a(1) \cdots \varphi_r(j) \cdots \varphi_s(i) \cdots \varphi_n(N) \pm \dots \right] . \end{aligned}$$

Ist dann  $i = j$ , so sieht man leicht ein, dass  $\psi(1, \dots, N) = 0$  gilt, und es ergibt sich:

**Satz 24 (Pauli-Prinzip, engere Form):** *Zwei identische Fermionen können sich nicht im gleichen Ein-Teilchen-Zustand befinden bzw. dasselbe Ein-Teilchen-Niveau besetzen.*

Wie schon erwähnt findet dieses Prinzip im Periodensystem der Elemente bei Vernachlässigung der Elektronenwechselwirkungen (Hartree-Näherung) eine wichtige Anwendung.

# 18. Stationäre Störungstheorie

Viele Probleme der Quantenmechanik lassen sich nicht direkt über die Schrödinger-Gleichung lösen, da der zugehörige Hamilton-Operator zu komplizierten Differentialgleichungen führt, die keine analytische Lösung haben. Da solche Situationen auch bei (zumindest in der Anschauung) vergleichsweise einfachen Systemen (etwa Zwei- bzw. Mehr-Elektronen-Atome) auftreten, ist die Störungstheorie eines der wichtigsten Gebiete um die Quantenmechanik zur Anwendung zu führen.

## 18.1. Störungstheorie nicht entarteter Zustände

Prinzipiell handelt es sich bei der Störungstheorie um nichts anderes als die aus der Mathematik bekannte Taylorreihen-Entwicklung, allerdings speziell auf den Formalismus und die typischen Situationen der Quantenmechanik zugeschnitten. Wir betrachten zuerst ein System, dessen Hamilton-Operator aus

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad \text{mit } \hat{V} \text{ klein gegen } \hat{H}_0$$

besteht, wobei wir  $\hat{V}$  als Störung bezeichnen. Die Eigenvektoren und -werte des Grundoperators  $\hat{H}_0$  seien bekannt und durch

$$\hat{H}_0|n\rangle_0 = E_n^{(0)}|n\rangle_0 \quad \text{mit Normierung} \quad {}_0\langle n|m\rangle_0 = \delta_{nm}$$

bezeichnet. Wir wollen daraus jetzt die Eigenvektoren und -werte von  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{V}$  bestimmen, wobei  $\lambda \in [0, 1]$  ein mathematischer Hilfsparameter ist, mit dem sich die Störung ein- und ausschalten lässt. Dafür entwickeln wir zunächst formal den Eigenzustand  $|n\rangle$  und zugehörigen Eigenwert  $E_n$  durch

$$|n\rangle = |n\rangle_0 + \lambda|n\rangle_1 + \lambda^2|n\rangle_2 + \dots \quad \text{und} \quad E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

in Potenzreihen von  $\lambda$ . Die Normierung der Zustände sei dabei so gewählt, dass  ${}_0\langle n|m\rangle_0 = \delta_{nm}$  und  ${}_0\langle n|n\rangle = 1$  gilt, dann folgt wegen

$$1 = {}_0\langle n|n\rangle = {}_0\langle n|n\rangle_0 + \lambda \cdot {}_0\langle n|n\rangle_1 + \lambda^2 \cdot {}_0\langle n|n\rangle_2 + \dots,$$

dass  ${}_0\langle n|n\rangle_i = 0$  für alle  $i = 1, 2, 3, \dots$  gelten muss, da  $\lambda$  beliebig gewählt werden kann. Setzen wir dann die  $\lambda$ -Potenzentwicklungen von Eigenzustand und -wert des gestörten Hamilton-Operators in die Eigenwertgleichung  $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$  ein, so folgt

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{V})\left(|n\rangle_0 + \lambda|n\rangle_1 + \lambda^2|n\rangle_2 + \dots\right) = \left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots\right)\left(|n\rangle_0 + \dots\right)$$

für die Eigenwertgleichung. Ordnet man das Produkt nach Potenzen von  $\lambda$ , so erhält man

$$\begin{aligned} \lambda^0 : & \quad \hat{H}_0|n\rangle_0 = E_n^{(0)}|n\rangle_0 \\ \lambda^1 : & \quad \hat{H}_0|n\rangle_1 + \hat{V}|n\rangle_0 = E_n^{(0)}|n\rangle_1 + E_n^{(1)}|n\rangle_0 \\ \lambda^2 : & \quad \hat{H}_0|n\rangle_2 + \hat{V}|n\rangle_1 = E_n^{(0)}|n\rangle_2 + E_n^{(1)}|n\rangle_1 + E_n^{(2)}|n\rangle_0 \quad \text{und allgemein} \\ \lambda^k : & \quad \hat{H}_0|n\rangle_k + \hat{V}|n\rangle_{k-1} = E_n^{(0)}|n\rangle_k + E_n^{(1)}|n\rangle_{k-1} + \dots + E_n^{(k-1)}|n\rangle_1 + E_n^{(k)}|n\rangle_0. \end{aligned}$$

Betrachten wir dann weiter den Term erster Ordnung, dann ergibt sich durch Multiplikation mit  ${}_0\langle n|$  unter Verwendung der zuvor bestimmten verschwindenden Skalarprodukte und der Normierung

$$\begin{aligned} {}_0\langle n|\hat{V}|n\rangle_0 + {}_0\langle n|\hat{H}_0|n\rangle_1 &= E_n^{(0)}{}_0\langle n|n\rangle_1 + E_n^{(1)}{}_0\langle n|n\rangle_0 \\ \iff {}_0\langle n|\hat{V}|n\rangle_0 + E_n^{(0)}{}_0\langle n|n\rangle_1 E_n^{(1)} &\iff E_n^{(1)} = {}_0\langle n|\hat{V}|n\rangle_0, \end{aligned}$$

die erste Korrektur zum Eigenwert  $E_n$  ist also der Erwartungswert des Störpotentials im ungestörten Zustand. Für den allgemeinen Fall ergibt sich durch analoge Überlegungen

$$\begin{aligned} {}_0\langle n|\hat{H}_0|n\rangle_k + {}_0\langle n|\hat{V}|n\rangle_{k-1} &= E_n^{(0)}{}_0\langle n|n\rangle_k + E_n^{(1)}{}_0\langle n|n\rangle_{k-1} + \dots + E_n^{(k)}{}_0\langle n|n\rangle_0 \\ \iff E_n^{(k)} &= {}_0\langle n|\hat{V}|n\rangle_{k-1}, \end{aligned}$$

die  $k$ -te Korrektur-Ordnung zum Eigenwert  $E_n$  braucht folglich immer die  $(k-1)$ -te Ordnung der Korrektur zu  $|n\rangle$ , beispielsweise  $E_n^{(2)} = {}_0\langle n|\hat{V}|n\rangle_1$ .

Als nächstes ermitteln wir nun die Eigenzustände  $|n\rangle_1$  zum Eigenwert  $E_n$ . Dazu betrachte man den Basiswechsel des ersten Korrekturzustands

$$|n\rangle_1 = \sum_m |m\rangle_0 {}_0\langle m|n\rangle_1 = \sum_{m \neq n} {}_0\langle m|n\rangle_1 |m\rangle_0.$$

Zur Bestimmung der Linearkoeffizienten  ${}_0\langle m|n\rangle_1$  betrachte man dann

$$\begin{aligned} {}_0\langle m|\hat{H}_0|n\rangle_1 + {}_0\langle m|\hat{V}|n\rangle_0 &= E_n^{(0)}{}_0\langle m|n\rangle_1 + E_n^{(1)}{}_0\langle m|n\rangle_0 \\ \iff {}_0\langle m|n\rangle_1 \left( E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right) &= {}_0\langle m|\hat{V}|n\rangle_0. \end{aligned}$$

Da nach Voraussetzung keine Entartung der Eigenzustände vorliegt, gilt für die Eigenwerte  $E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$  für  $m \neq n$ , also folgt

$${}_0\langle m|n\rangle_1 = \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} {}_0\langle m|\hat{V}|n\rangle_0 \quad \implies \quad |n\rangle_1 = \sum_{m \neq n} \frac{|_0\langle m|\hat{V}|n\rangle_0|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

für die Korrektur  $|n\rangle_1$  erste Ordnung zum Eigenvektor. Die Korrektur zweiter Ordnung des Eigenwerts lässt sich damit dann als

$$E_n^{(2)} = {}_0\langle n|\hat{V}|n\rangle_1 = \sum_{m \neq n} \frac{{}_0\langle m|\hat{V}|n\rangle_0}{{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}} {}_0\langle n|\hat{V}|m\rangle_0 = \sum_{m \neq n} \frac{|_0\langle n|\hat{V}|m\rangle_0|^2}{{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}}$$

schreiben. Man beachte, dass für den Grundzustand  $n=1$  insbesondere  $E_{n=1}^{(0)} - E_m^{(0)} < 0$  und damit  $E_{n=1}^{(2)} \leq 0$  folgt. Im Allgemeinfall findet sich durch Multiplikation mit  ${}_0\langle m|$  dann

$${}_0\langle m|\hat{H}_0|n\rangle_k + {}_0\langle m|\hat{V}|n\rangle_{k-1} = E_n^{(0)}{}_0\langle m|n\rangle_k + E_n^{(1)}{}_0\langle m|n\rangle_{k-1} + \dots + E_n^{(k-1)}{}_0\langle m|n\rangle_1$$

und mit  ${}_0\langle m|\hat{H}_0|n\rangle_k = E_m^{(0)}{}_0\langle m|n\rangle_k$  gilt dann weiter

$$\begin{aligned} {}_0\langle m|n\rangle_k &= \frac{1}{{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}} \left[ {}_0\langle m|\hat{V}|n\rangle_{k-1} - E_n^{(1)}{}_0\langle m|n\rangle_{k-1} - \dots - E_n^{(k-1)}{}_0\langle m|n\rangle_1 \right] \\ \implies |n\rangle_k &= \sum_{m \neq n} {}_0\langle m|n\rangle_k |m\rangle_0 \end{aligned}$$

für den Zustandsvektor-Korrekturterm  $k$ -ter Ordnung. Dieser Vektor ist allerdings noch nicht normiert, dies geschieht nun durch Definition von  $|\tilde{n}\rangle := \sqrt{z}|n\rangle$  und der Forderung, dass die Konstante  $z$  so gewählt wird, dass

$$1 = \langle \tilde{n} | \tilde{n} \rangle = z \langle n | n \rangle \iff z = \frac{1}{\langle n | n \rangle} \quad \text{bzw.} \quad {}_0\langle n | \tilde{n} \rangle = \sqrt{n} \cdot {}_0\langle n | n \rangle = \sqrt{n}$$

gilt. Den Faktor  $z$  bestimmen wir durch Verwendung der Entwicklung nach  $\lambda$ , es gilt

$$\begin{aligned} \frac{1}{z} &= \langle n | n \rangle = \left[ {}_0\langle n | + \lambda \cdot {}_1\langle n | + \lambda^2 \cdot {}_2\langle n | + \dots \right] \left[ |n\rangle_0 + \lambda |n\rangle_1 + \lambda^2 |n\rangle_2 + \dots \right] \\ &= {}_0\langle n | n \rangle_0 + \lambda \left[ {}_1\langle n | n \rangle_0 + {}_0\langle n | n \rangle_1 \right] + \lambda^2 \left[ {}_1\langle n | n \rangle_1 + \dots \right] + \dots \\ &= 1 + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|{}_0\langle m | \hat{V} | n \rangle_0|^2}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2} + \mathcal{O}(\lambda^4) \\ \iff z &= 1 - \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|{}_0\langle m | \hat{V} | n \rangle_0|^2}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2} + \mathcal{O}(\lambda^4). \end{aligned}$$

Es wird deutlich, dass es sich hier immer effektiv um eine Entwicklung in Potenzen des Erwartungswerts

$$\frac{{}_0\langle m | \hat{V} | n \rangle_0}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

handelt, wobei diese für alle  $m \neq n$  klein sein müssen.

## 18.2. Skizzierung: Störungstheorie für entartete Zustände

Allgemeiner seien die Energieniveaus des Hamilton-Operators  $\hat{H}$  nun  $k$ -fach entartet, d.h. es existieren  $k$  Eigenvektoren  $|n, r\rangle$  für  $r = 1, \dots, k$  zu einem Eigenwert  $E_n$ . Wir erhalten also die Eigenwertgleichung

$$\hat{H}_0 |n, r\rangle = E_n^{(0)} |n, r\rangle_0$$

für  $r = 1, \dots, k$ . Man erwartet nun, dass die Entartung der Energieeigenzustände durch Einschalten der Störung  $\hat{V}$  aufgehoben wird. Man erhält dann wie in den obigen Ausführungen Summen der Störungs-Erwartungswerte. Da allerdings mehrere Eigenwerte gleich sind, führen die Terme  $|n, r\rangle$  wegen

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \rightarrow \infty$$

zu Singularitäten, es sei denn dass der zugehörige Zähler  ${}_0\langle n, r | \hat{V} | n, s \rangle_0$  für  $r \neq s$  ebenfalls verschwindet. Dies ist aber im Allgemeinen nicht der Fall, aber alle Linearkombinationen der  $|n, r\rangle_0$  sind ebenfalls Eigenvektoren  $\hat{H}_0$  zu  $E_n^{(0)}$ , wir versuchen das Problem also durch einen einfachen Basiswechsel zu umgehen. Man bilde also jene orthonormierten Linearkombinationen  $|n, \rho\rangle_0$ , für welche

$${}_0\langle n, \rho | \hat{V} | n, \sigma \rangle_0 = 0 \quad \text{für alle } \rho \neq \sigma$$

gilt. Zur Konstruktion dieser Eigenzustände setzen wir zunächst naiv

$$|n, \rho\rangle_0 = \sum_{r=1}^k c_{\rho,r} |n, r\rangle_0$$

mit noch zu bestimmenden Koeffizienten  $c_{\rho,r}$  an, sodass  ${}_0\langle n, \rho | \hat{V} | n, \sigma \rangle_0 = 0$  gilt. Man betrachte dann die  $k \times k$ -Matrix

$$V_{rs}^{(n)} := V_{rs} \begin{pmatrix} {}_0\langle n, 1 | \hat{V} | n, 1 \rangle_0 & {}_0\langle n, 1 | \hat{V} | n, 2 \rangle_0 & \dots & {}_0\langle n, 1 | \hat{V} | n, k \rangle_0 \\ {}_0\langle n, 2 | \hat{V} | n, 1 \rangle_0 & {}_0\langle n, 2 | \hat{V} | n, 2 \rangle_0 & \dots & {}_0\langle n, 2 | \hat{V} | n, k \rangle_0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ {}_0\langle n, k | \hat{V} | n, 1 \rangle_0 & {}_0\langle n, k | \hat{V} | n, 2 \rangle_0 & \dots & {}_0\langle n, k | \hat{V} | n, k \rangle_0 \end{pmatrix},$$

die Eigenschaft  ${}_0\langle n, \rho | \hat{V} | n, \sigma \rangle_0 = 0$  besagt dann gerade, dass diese Matrix diagonal sein sollte. Zur Diagonalisierung bestimmen wir zunächst die Eigenwerte von  $\hat{V}$ , die sich durch das charakteristische Polynom

$$\det(\hat{V} - \lambda \mathbb{1}) = 0 \quad \implies \quad \lambda = \varepsilon_{n,\rho} \quad \text{für } \rho = 1, \dots, k$$

ergeben. Zu jedem Eigenwert  $\varepsilon_{n,\rho}$  bestimmen wir dann die Eigenvektoren  $\vec{c}^{(\rho)}$  durch

$$V \vec{c}^{(\rho)} = \varepsilon_{n,\rho} \vec{c}^{(\rho)} \iff \sum_s V_{rs} c_s^{(\rho)} = \varepsilon_{n,\rho} c_s^{(\rho)},$$

wobei wir die  $\vec{c}^{(\rho)}$  orthonormiert durch die Forderungen

$$\sum_{r=1}^k \left( c_r^{(\rho)} \right)^* c_r^{(\rho)} = 1 \quad \text{und} \quad \sum_{r=1}^k \left( c_r^{(\rho)} \right)^* c_r^{(\sigma)} = \delta_{\rho\sigma}$$

wählen. Es gilt dann mit den  $c_r^{(\rho)}$  für die Eigenvektor-Basis  $|n, \rho\rangle_0 = \sum_{r=1}^k c_r^{(\rho)} |n, r\rangle_0$ , denn mit

$$\begin{aligned} {}_0\langle n, \rho | \hat{V} | n, \rho \rangle_0 &= \left( \sum_r \left( c_r^{(\rho)} \right)^* {}_0\langle n, r | \right) \hat{V} \left( \sum_s c_s^{(\rho)} |n, s\rangle_0 \right) \sum_{r,s} \left( c_r^{(\rho)} \right)^* c_s^{(\rho)} {}_0\langle n, r | \hat{V} | n, s \rangle_0 \\ &= \sum_r \left( c_r^{(\rho)} \right)^* \sum_s V_{rs} c_s^{(\rho)} = \varepsilon_{n,\rho} \sum_r \left( c_r^{(\rho)} \right)^* c_r^{(\rho)} \end{aligned}$$

folgt  ${}_0\langle n, \rho | \hat{V} | n, \sigma \rangle_0 = \varepsilon_{n,\rho} \delta_{\rho\sigma}$ , also ist die Matrix mit diesen Eigenvektoren diagonalisiert und wir haben das Problem mit den Singularitäten gelöst. Ein Vergleich mit dem nicht entarteten Fall liefert dann gerade die Übereinstimmung  $\varepsilon_{n,\rho} = E_{n,\rho}^{(1)}$  der Eigenwert, also folgt im Vergleich zur vorher betrachteten Situation ohne Entartung

$$E_n^{(0)} \rightarrow E_n^{(0)} + E_{n,\rho}^{(1)} + \dots \quad \text{und} \quad |n, \rho\rangle = |n, \rho\rangle_0 + \sum'_m \frac{{}_0\langle m | \hat{V} | n, \rho \rangle_0}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m\rangle_0 + \dots$$

wobei die gestrichene Summe  $\sum'$  dafür steht, dass nicht über die  $|n, \sigma\rangle_0$  summiert werden soll.

### 18.3. Anwendungsbeispiel: Stark-Effekt

Zuletzt wollen wir die Ergebnisse der Störungstheorie noch in einem kleinen Beispiel anwenden, wozu der Stark-Effekt dienen soll. Anschaulich versucht dieser die Tatsache zu quantifizieren, dass die (in guter Näherung) Kreisbahn des Elektrons eines Wasserstoff-Atoms im elektrischen Feld deformiert wird, was sich in geänderten Anregungszuständen des Atoms äußert.

Wir betrachten also ein Wasserstoff-Atom in einem äußeren homogenen elektrischen Feld, beschrieben durch das Skalarpotential  $\Phi$ , sodass der ungestörte Hamilton-Operator durch

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{\text{Elektron im Kernfeld}} = \hat{H}_{\text{Wasserstoff}}$$

gegeben ist und die Störung durch klassisch durch  $V = -e\Phi(\vec{r})$ . Das Potential des konstanten  $\vec{E}$ -Felds hat dabei die Form  $\Phi = -\vec{E}\vec{r}$ , denn es gilt  $\vec{E}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}\Phi = \vec{E}$ . Weiter betrachten wir dann das Feld in  $z$ -Richtung, erhalten also schließlich als Störterm  $V = e\vec{E}\vec{r} = eE\hat{z}$ .

Sei dann  $|n\rangle_0 = |n, \ell, \ell_z\rangle$  ein ungestörter Eigenvektor von  $\hat{H}_0$ , wobei man beachte, dass diese gemeinsamen Eigenfunktionen mit dem Bahndrehimpuls hinsichtlich  $\ell_z$  entartet sind, vgl. Abschnitt 16.3 bzw. Seite 243. Es gilt aber

$$[\hat{V}, \hat{L}_z] = eE[\hat{Z}, \hat{L}_z] = 0 \quad \text{und} \quad [\hat{V}, \hat{S}_z] = 0 ,$$

d.h. für die Einträge der zuvor abstrakt behandelte Matrix  $V$  gilt  $\langle n, \ell, \ell_z | \hat{V} | n, \ell, \ell'_z \rangle = \delta_{\ell_z \ell'_z}$ , die Matrix ist hinsichtlich dieser Entwicklung also schon diagonal. In der Summe  $\sum'_m$  sind die verschiedenen  $\ell_z$ -Werte also nicht mitzunehmen.

#### 18.3.1. Wasserstoff im Grundzustand

Der  $1s$ -Grundzustand des Wasserstoff-Atoms ist nicht entartet. Für die Größe der Energieverschiebung beim Einschalten der Störung in Form des äußeren elektrischen Felds gilt in erster Ordnung dann

$$\begin{aligned} E_{n=1}^{(1)} &= {}_0\langle n | \hat{V} | n \rangle_0 = \langle 1, 0, 0 | \hat{V} | 1, 0, 0 \rangle = eE \iiint d^3\vec{r} \psi_{100}^*(\vec{r}) z \psi_{100}(\vec{r}) \\ &= eE \iiint d^3\vec{r}' \psi_{100}^*(-\vec{r}') (-z') \psi_{100}(-\vec{r}') = -eE \iiint d^3\vec{r} \psi_{100}^*(\vec{r}) z \psi_{100}(\vec{r}) , \end{aligned}$$

es folgt also  $E_{n=1}^{(1)} = 0$ . Die Energieveränderung tritt also frühestens in zweiter Ordnung von  $\hat{V}$  auf, wobei der zweite Korrekturterm  $E_n^{(2)}$  proportional zu  $E^2$  ist - daher auch der Name **quadratischer Stark-Effekt**.

#### 18.3.2. Wasserstoff im ersten angeregten Zustand

Im Anregungszustand  $n = 2$  gibt es für das Wasserstoff-Atom wegen der dann möglichen Drehimpulse  $\ell = 0, 1$  und der für  $\ell = 1$  folgenden  $\ell_z = -1, 0, 1$ -Entartung bereits vier Zustände

$$2s : |2, 0, 0\rangle \quad 2p : |2, 1, -1\rangle \quad 2p : |2, 1, 0\rangle \quad 2p : |2, 1, 1\rangle ,$$

wobei die  $\ell_z$ -Entartung in den  $2p$ -Zuständen hier unbedeutend ist. Für die  $V$ -Matrix gilt nun mit der Kurznotation  $|n, \ell\rangle$  für die Zustände

$$V_{rs} = \begin{pmatrix} \langle 2, 0 | \hat{V} | 2, 0 \rangle & \langle 2, 0 | \hat{V} | 2, 1 \rangle \\ \langle 2, 1 | \hat{V} | 2, 0 \rangle & \langle 2, 1 | \hat{V} | 2, 1 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \langle 2, 0 | \hat{V} | 2, 1 \rangle \\ \langle 2, 1 | \hat{V} | 2, 0 \rangle & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & V_{21} \\ V_{12} & 0 \end{pmatrix} ,$$

wobei dann  $V_{21} = V_{12}^*$  gelten muss. Für die Eigenwerte dieser Matrix findet man über den üblichen Weg der Nullstellen des charakteristischen Polynoms dann  $\lambda_{1/2} = \pm |V_{12}| = \varepsilon_{n=2,\rho}$  mit  $\rho = 1, 2$ , wobei

$$V_{12} = eE \iiint d^3\vec{r} \psi_{21}(\vec{r}) z \psi_{20}(\vec{r}) = -eE \cdot 3r_0$$

gilt, die Korrektur ist also proportional zu  $E$  und wird deshalb auch **linearer Stark-Effekt** genannt. Für die zugehörigen Eigenvektoren gilt dann mit  $(\hat{V} - \varepsilon_{n=2,\rho} \mathbb{1})\vec{c}^{(\rho)} = 0$  für  $\rho = 1, 2$

$$\vec{c}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{c}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

sodass sich die Eigenzustände über  $|n=2, \rho\rangle_0 = \sum_r c_r^{(\rho)} |n=2, r\rangle$  ergeben. Insgesamt lauten die Eigenzustände also explizit

$$\begin{aligned} |n=2, \rho=1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|2, 0, 0\rangle + |2, 1, 0\rangle) \quad \rightarrow \quad E_{n=2}^{(1)} = \frac{1}{4} + eE \cdot 3r_0 \\ |n=2, \rho=2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|2, 0, 0\rangle - |2, 1, 0\rangle) \quad \rightarrow \quad E_{n=2}^{(1)} = \frac{1}{4} - eE \cdot 3r_0 \end{aligned}$$

Teil V.

# Mathematischer Anhang

# A. Vektoranalysis verallgemeinerter Koordinaten

In der Newtonschen Mechanik haben wir manchmal statt der üblichen kartesischen Koordinaten  $(x, y, z)$  Kugelkoordinaten  $(r, \vartheta, \varphi)$  verwendet. Der Raum lässt sich aber beispielsweise auch durch Zylinderkoordinaten beschreiben, und ganz allgemein durch beliebige orthogonale Komponenten. Orthogonal bedeutet dabei, dass an jedem Raumpunkt die drei aufspannenden Einheitsvektoren des verwendeten Koordinatensystems orthogonal zueinander stehen. Die Koordinatenverläufe müssen dabei aber nicht geradlinig, wie bei kartesischen Koordinaten, sein. Derartige allgemeine Koordinaten sollen nun näher behandelt werden.

## A.1. Allgemeine orthogonale Koordinaten

Jeder Vektor  $\vec{r}$  lässt sich in kartesischen Koordinaten als eine Linearkombination der drei normierten Basiseinheitsvektoren  $\hat{x}$ ,  $\hat{y}$  und  $\hat{z}$  schreiben

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} r_x \\ r_y \\ r_z \end{pmatrix} = r_x \hat{x} + r_y \hat{y} + r_z \hat{z} ,$$

wobei die  $\hat{e}_i$  in Richtung der Koordinatenachsen zeigen. Wie schon erwähnt, ist es für viele physikalische Fragestellungen aufgrund der vorhandenen Symmetrie des Problems nicht sinnvoll kartesische Koordinaten zu verwenden. Betrachten wir beispielsweise Kugelkoordinaten

$$\vec{r} = r \begin{pmatrix} \sin \vartheta \cos \varphi \\ \sin \vartheta \sin \varphi \\ \cos \vartheta \end{pmatrix} = r_r \hat{r} + r_\vartheta \hat{\vartheta} + r_\varphi \hat{\varphi}$$

oder Zylinderkoordinaten

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} \rho \cos \phi \\ \rho \sin \phi \\ z \end{pmatrix} = r_\rho \hat{\rho} + r_\phi \hat{\phi} + r_z \hat{z} ,$$

dann sind die Einheitsvektoren der jeweiligen lokalen Basis durch Ableitung nach der jeweiligen Komponente gebildet. Für eine beliebige Koordinate  $q_i$  sei also

$$\hat{q}_i = \frac{\frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i}}{\left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i} \right|} .$$

Die geometrische Bedeutung dieses Vektors ergibt sich wie folgt: Halten wir die beiden anderen Koordinaten, die mit  $q_j$  und  $q_k$  bezeichnet seien, fest und betrachten die durch  $q_i$  parametrisierte Kurve  $\vec{r}(q_i) = \vec{r}(q_i, q_j, q_k)$  im  $\mathbb{R}^3$ , so ist  $\hat{q}_i$  der auf Länge Eins normierte Tangentenvektor an

dieser Kurve. Man beachte dabei, dass im Allgemeinen der Vektor  $\hat{q}_i$  vom Ort  $\vec{r}$ , d.h. von  $q_i$ ,  $q_j$  und  $q_k$  abhängt, dies ist bei kartesischen Koordinaten ausnahmsweise nicht der Fall, wo die Einheitsvektoren ortonormal sind.

Im Folgenden werden wir die allgemeinen Koordinaten mit  $(q_1, q_2, q_3)$  bezeichnen. In den allermeisten Fällen sind diese betrachteten Koordinaten orthogonal zueinander, d.h. die Einheitsvektoren  $\hat{q}_1$ ,  $\hat{q}_2$  und  $\hat{q}_3$  stehen an jedem Ort  $\vec{r}$  senkrecht aufeinander. Dies trifft neben der kartesischen z.B. auch bei Kugel- und Zylinderkoordinaten zu.

Des Weiteren haben die Koordinaten meist eine vom Ort  $\vec{r}$  unabhängige, einheitliche Orientierung, d.h. die Einheitsvektoren  $\hat{q}_1$ ,  $\hat{q}_2$  und  $\hat{q}_3$  bilden bei geeigneter Anordnung an jedem Punkt ein rechtshändiges Dreibein. Bei den kartesischen Koordinaten gilt dies für die Anordnung  $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ , bei Kugelkoordinaten ist die rechtshändige Reihenfolge  $(\hat{r}, \hat{\vartheta}, \hat{\varphi})$  und bei Zylinderkoordinaten  $(\hat{\rho}, \hat{\phi}, \hat{z})$ .

## A.2. Vektorfelder

Die Einheitsvektoren  $\hat{q}_1$ ,  $\hat{q}_2$  und  $\hat{q}_3$  bilden an jedem Ort  $\vec{r}$  eine Orthonormalbasis des dreidimensionalen Raums. Jedes beliebige Vektorfeld  $\vec{F}(\vec{r})$  kann daher als

$$\vec{F}(\vec{r}) = F_1 \hat{q}_1 + F_2 \hat{q}_2 + F_3 \hat{q}_3$$

geschrieben werden, wobei die Koeffizienten  $F_i = F_i(\vec{r})$  im Allgemeinen vom Ort  $\vec{r}$  abhängen werden. Da die  $\hat{q}_i$  normierte Vektoren sind, entspricht  $F_i$  der Länge der Projektion des Vektors  $\vec{F}$  auf den Vektor  $\hat{q}_i$ . Diese kann durch Bildung des Skalarprodukts  $\hat{q}_i \cdot \vec{F}$  berechnet werden, also

$$F_i = \hat{q}_i \cdot \vec{F}.$$

Da wir im Folgenden nun häufiger den Betrag der Tangentenvektoren benötigen, definieren wir zur Abkürzung

$$g_i := \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i} \right|^2,$$

sodass die normierten Einheitsvektoren durch

$$\hat{q}_i = \frac{1}{\sqrt{g_i}} \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i}$$

gegeben sind.

## A.3. Gradient

Der Gradient einer skalaren Funktion  $f(\vec{r})$  ist ein Vektorfeld und lässt sich daher an jedem Ort  $\vec{r}$  als eine Linearkombination der jeweiligen Einheitsvektoren schreiben, also

$$\vec{\nabla} f(\vec{r}) = h_1 \hat{q}_1 + h_2 \hat{q}_2 + h_3 \hat{q}_3.$$

In kartesischen Koordinaten ist uns der Gradient bereits als

$$\vec{\nabla} f(\vec{r}) = \frac{\partial f}{\partial x_1} \hat{x}_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} \hat{x}_2 + \frac{\partial f}{\partial x_3} \hat{x}_3$$

bekannt. Wir berechnen nun die Komponenten des Gradienten in allgemeinen orthogonalen Koordinaten, indem wir das Skalarprodukt mit den zugehörigen Einheitsvektoren bilden und die resultierenden Ausdrücke auf kartesische Koordinaten zurückführen. Es gilt also

$$h_i = \hat{q}_i \cdot \vec{\nabla} f(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{g_i}} \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_i} \cdot \sum_j \frac{\partial f}{\partial x_j} \hat{x}_j = \frac{1}{\sqrt{g_i}} \sum_k \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \hat{x}_k \cdot \sum_j \frac{\partial f}{\partial x_j} \hat{x}_j,$$

und wegen  $\hat{x}_j \cdot \hat{x}_k = \delta_{jk}$  folgt dann

$$h_i = \frac{1}{\sqrt{g_i}} \sum_{k,j} \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \frac{\partial f}{\partial x_j} \delta_{kj} = \frac{1}{\sqrt{g_i}} \sum_k \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \frac{\partial f}{\partial x_k}.$$

Nach der Kettenregel der Differentiation entspricht dies dann

$$h_i = \frac{1}{\sqrt{g_i}} \frac{\partial f}{\partial q_i},$$

also erhalten wir für den **Gradienten in allgemeinen Koordinaten** die Formel

$$\vec{\nabla} f(\vec{r}) = \sum_i \frac{1}{\sqrt{g_i}} \frac{\partial f}{\partial q_i} \hat{q}_i = \frac{1}{\sqrt{g_1}} \frac{\partial f}{\partial q_1} \hat{q}_1 + \frac{1}{\sqrt{g_2}} \frac{\partial f}{\partial q_2} \hat{q}_2 + \frac{1}{\sqrt{g_3}} \frac{\partial f}{\partial q_3} \hat{q}_3.$$

## A.4. Divergenz

Die Divergenz eines Vektorfelds  $\vec{F}(\vec{r})$  ist über den Gaußschen Satz definiert. Dieser besagt, dass für ein beliebiges Volumen  $V$  mit dem Rand  $\partial V$  das Integral über die inneren Quellen des Volumens gleich dem Fluss des Feldes durch die Oberfläche ist, d.h. es gilt

$$\iiint_V \vec{\nabla} \cdot \vec{F} dV = \oiint_{\partial V} \vec{F} \cdot d\vec{A}.$$

Die linke Seite dieser Gleichung ist dabei ein Integral über das Innere des Volumens und die rechte Seite über die Oberfläche derselben. Sofern die Divergenz stetig ist, gilt also für ein kleines Volumen  $\Delta V$  am Ort  $\vec{r}$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{F}(\vec{r}) \approx \frac{1}{\Delta V} \iiint_{\Delta V} \vec{\nabla} \cdot \vec{F} dV = \frac{1}{\Delta V} \oiint_{\partial(\Delta V)} \vec{F}(\vec{r}) \cdot d\vec{A},$$

mathematisch exakt folgt daher im Grenzwert für ein verschwindendes Volumen

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{F}(\vec{r}) = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta V} \oiint_{\partial(\Delta V)} \vec{F}(\vec{r}) \cdot d\vec{A}, \quad (\text{A.1})$$

die Form des kleinen Volumens  $\Delta V$  ist dabei egal. Zur Auswertung der rechten Seite betrachten wir daher einen einfach handzuhabenden Kubus, dessen Kanten in Richtung der Koordinaten liegen. Exemplarisch berechnen wir den Beitrag des oberen und unteren Flächenstücks zum Integral. Da die Koordinaten orthogonal sind, ist die obere Fläche gerade das Produkt der entsprechenden Kantenlängen, wobei die Länge der ersten Kante durch

$$|\vec{r}(q_1 + \Delta q_1, q_2, q_3 + \Delta q_3) - \vec{r}(q_1, q_2, q_3 + \Delta q_3)| \approx \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_1} \right| \Delta q_1 = \sqrt{g_1} \Delta q_1$$

gegeben ist. Entsprechendes gilt auch für die andere Kante, sodass für den Flächenvektor  $\Delta \vec{A}_o$  auf der oberen Fläche

$$\Delta \vec{A}_o = \sqrt{g_1 g_2} \Delta q_1 \Delta q_2 \hat{q}_3 \Big|_{q_1, q_2, q_3 + \Delta q_3}$$

gilt. In gleicher Weise erhalten wir für den Flächenvektor auf der unteren Fläche

$$\Delta \vec{A}_u = -\sqrt{g_1 g_2} \Delta q_1 \Delta q_2 \hat{q}_3 \Big|_{q_1, q_2, q_3} .$$

Zusammen liefern das obere und untere Flächenstück also den folgenden Beitrag zum Oberflächenintegral:

$$\begin{aligned} F_3 \Delta \vec{A}_o \Big|_{q_1, q_2, q_3 + \Delta q_3} + F_3 \Delta \vec{A}_u \Big|_{q_1, q_2, q_3} &= \left( F_3 \sqrt{g_1 g_2} \Big|_{q_1, q_2, q_3 + \Delta q_3} - F_3 \sqrt{g_1 g_2} \Big|_{q_1, q_2, q_3} \right) \Delta q_1 \Delta q_2 \\ &\approx \frac{\partial}{\partial q_3} \left( F_3 \sqrt{g_1 g_2} \right) \Big|_{q_1, q_2, q_3} \Delta q_1 \Delta q_2 \Delta q_3 . \end{aligned}$$

Analoge Ausdrücke ergeben sich auch für die Beiträge des linken und rechten sowie des vorderen und hinteren Flächenstücks. Das Gesamtvolumen  $\Delta V$  ist dann folglich durch das Produkt aller drei Kanten gegeben, sodass

$$\Delta V = \sqrt{g_1 g_2 g_3} \Delta q_1 \Delta q_2 \Delta q_3$$

gilt. Setzen wir nun die erhaltenen Identitäten in die Divergenz-Definition (A.1) ein, so ergibt sich die folgende Formel zur Berechnung der **Divergenz in allgemeinen Koordinaten**

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{F}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{g_1 g_2 g_3}} \left[ \frac{\partial}{\partial q_1} (\sqrt{g_2 g_3} F_1) + \frac{\partial}{\partial q_2} (\sqrt{g_1 g_3} F_2) + \frac{\partial}{\partial q_3} (\sqrt{g_1 g_2} F_3) \right] .$$

## A.5. Rotation

Während wir zur Definition der Divergenz den Gaußschen Integralsatz verwendet haben, benutzen wir nun den Stokesschen Integralsatz zur Definition der Rotation. Dieser besagt, dass für eine Fläche  $A$  mit Rand  $\partial A$  das Integral über die Verwirbelungen des Feldes in der Fläche gleich dem Umlaufintegral des Feldes über den Rand ist, d.h.

$$\iint_A (\vec{\nabla} \times \vec{F}) \cdot d\vec{A} = \oint_{\partial A} \vec{F} \cdot d\vec{S} .$$

Die  $i$ -te Komponente der Rotation an einem Ort  $\vec{r}$  definieren wir durch eine dort befindliche kleine Fläche  $\vec{A}_i$ , welche senkrecht zur  $i$ -ten Koordinatenrichtung steht, also

$$(\vec{\nabla} \times \vec{F})_i = \lim_{\Delta A_i \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta A_i} \oint_{\partial(\Delta A_i)} \vec{F} \cdot d\vec{S} . \quad (\text{A.2})$$

Die Form der Fläche spielt hier wieder im Prinzip keine Rolle, wir betrachten hier also ein (einfach zu berechnendes) kleines Rechteck. Im Folgenden betrachten wir exemplarisch den Fall  $i = 1$ . Da die Koordinaten orthogonal sind, gilt für die Länge z.B. der unteren Kante

$$\left| \vec{r}(q_1, q_2 + \Delta q_2, q_3) - \vec{r}(q_1, q_2, q_3) \right| = \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial q_2} \right| \Delta q_2 = \sqrt{g_2} \Delta q_2 .$$

Der Beitrag der unteren Kante zum Integral ist also

$$F_2 \sqrt{g_2} \Delta q_2 \Big|_{q_1, q_2, q_3} .$$

In entsprechender Weise gilt für den Beitrag der oberen Kante

$$-F_2 \sqrt{g_2} \Delta q_2 \Big|_{q_1, q_2, q_3 + \Delta q_3} .$$

Zusammen macht dies dann

$$-F_2 \sqrt{g_2} \Delta q_2 \Big|_{q_1, q_2, q_3 + \Delta q_3} + F_2 \sqrt{g_2} \Delta q_2 \Big|_{q_1, q_2, q_3} = -\frac{\partial}{\partial q_3} (\sqrt{g_2} F_2) \Delta q_2 \Delta q_3 \Big|_{q_1, q_2, q_3} ,$$

die verbleibenden beiden Kanten liefern dann analog

$$-\frac{\partial}{\partial q_2} (\sqrt{g_3} F_3) \Delta q_3 \Delta q_2 \Big|_{q_1, q_2, q_3} .$$

Setzen wir diese beiden Beiträge, sowie den Flächeninhalt

$$\Delta A_1 = \sqrt{g_2 g_3} \Delta q_2 \Delta q_3$$

in die Definitions-Gleichung (A.2) ein, so erhalten wir für die **Rotation in allgemeinen Koordinaten**

$$(\vec{\nabla} \times \vec{F})_i = \frac{1}{\sqrt{g_j g_k}} \left[ \frac{\partial}{\partial q_j} (\sqrt{g_k} F_k) - \frac{\partial q_k}{\partial q_j} \sqrt{g_j} F_j \right] ,$$

wobei  $(i, j, k)$  in dieser Reihenfolge eine zyklische Vertauschung von  $(1, 2, 3)$  ist, also eine Kombination  $(1, 2, 3)$ ,  $(2, 3, 1)$  oder  $(3, 2, 1)$  ist.

## B. Orts- und Impuls-Operator

Bekanntlich wirken der Orts- und Impulsoperator  $\hat{X}$  bzw.  $\hat{P}$  auf quantenmechanische Wellenfunktionen und sollten vernünftigerweise ein reelles Spektrum besitzen, d.h. dass sie insbesondere ausschließlich über reelle Eigenwerte verfügen. Versucht man dies mathematisch zu präzisieren, so stellt man fest, dass die Forderung der Hermitizität dafür nicht ausreichend ist, denn es gibt Beispiele hermitescher Operatoren, deren Spektrum aber nicht reell ist. Für selbstadjungierte Operatoren ist das Spektrum jedoch sehr wohl reell. Dies wird durch den Spektralsatz für selbstadjungierte Operatoren sichergestellt.

Die Schwierigkeit, Orts- und Impulsoperator mathematisch sauber zu definieren, besteht im Allgemeinen darin, zu einem gegebenen hermiteschen Operator, den Definitionsbereich so anzupassen, dass der resultierende Operator selbstadjungiert ist - dies soll im Folgenden näher erläutert werden.

### B.1. Der Hilbertraum der quadratintegriblen Funktionen

Die quantenmechanischen Wellenfunktionen  $\psi$  sind Elemente eines Hilbertraums. In der Regel verwenden wir dafür den Hilbertraum  $L^2([a, b])$ , wobei wir uns nur auf eine Raumdimension beschränken. Der höherdimensionale Fall lässt sich völlig analog behandeln. Der Raum  $L^2([a, b])$  ist die Menge der im Lebesgue-Sinne quadratintegriblen Funktionen, definiert durch

$$L^2([a, b]) := \left\{ \psi : [a, b] \rightarrow \mathbb{C} : \int_a^b |\psi(x)|^2 dx < \infty \right\} .$$

Dabei ist  $L^2([a, b])$  insbesondere ein Vektorraum, auf dem sich durch

$$(\psi, \phi) := \int_a^b \psi^*(x)\phi(x) dx$$

ein unitäres Skalarprodukt definieren lässt. Dieses Skalarprodukt induziert die üblicherweise verwendete  $L^2$ -Norm

$$\|\psi\|_{L^2} := \sqrt{(\psi, \psi)} = \sqrt{\int_a^b |\psi(x)|^2 dx} .$$

Als Vektorraum zusammen mit einem Skalarprodukt ist  $L^2([a, b])$  ein Prä-Hilbertraum, ein Hilbertraum muss zusätzlich aber noch vollständig sein.

Dazu beachte man, dass beispielweise eine ebene Welle  $\psi(x) = e^{ikx}$  auf dem unbeschränkten Intervall  $]-\infty, \infty[$  nicht quadratintegribel ist und daher im strengen Sinne keinen quantenmechanisch möglichen Zustand darstellt. Es gibt aber Superpositionen ebener Wellen, die über eine endliche  $L^2$ -Norm verfügen. Damit  $L^2 = L^2([a, b])$  ein Hilbertraum ist, muss er bezüglich der  $L^2$ -Norm vollständig sein - dies beinhaltet der Satz von Riesz-Fischer.

Beim Umgang mit Elementen von  $L^2$  muss man beachten, dass diese nur bis auf eine Menge vom Lebesgue-Maß Null eindeutig bestimmt sind, d.h. zwei Funktionen  $\psi(x)$  und  $\phi(x)$  sind als

gleich zu betrachten, wenn sie sich nur auf einer Menge vom Maß Null unterscheiden. Wir sagen dazu auch, dass die Funktionen „fast überall“ gleich seien. Eine Funktion  $\psi(x)$  aus  $L^2$  wird daher auch genau dann als stetig bezeichnet, wenn es eine stetige Funktion  $\phi(x)$  in  $L^2$  gibt, für die  $\psi(x) = \phi(x)$  für fast alle  $x \in [a, b]$  ist.

Entsprechend lassen sich auch Begriffe wie Differenzierbarkeit übertragen. Außerdem sei an dieser Stelle noch bemerkt, dass viele Untervektorräume von  $L^2$  existieren, wie z.B. die Menge aller stetigen oder die Menge aller differenzierbaren Funktionen von  $L^2$ , die darüber hinaus wieder dichte Teilmengen von  $L^2([a, b])$  bilden.

## B.2. Der Ortsoperator

Als Definitionsbereich für den Ortsoperator  $\hat{X}$  wählen wir  $D_{\hat{X}} = \{\psi \in L^2 : x\psi(x) \in L^2\}$ , dann ist der Ortsoperator selbstadjungiert. Um dies explizit nachzuweisen, müssen wir zeigen, dass  $D_{\hat{X}} \subseteq D_{\hat{X}^\dagger}$  und  $D_{\hat{X}} \supseteq D_{\hat{X}^\dagger}$  liegen und  $\hat{X}^\dagger\psi(x) = \hat{X}\psi(x)$  für alle  $\psi(x) \in D_{\hat{X}}$  gilt.

- $D_{\hat{X}} \subseteq D_{\hat{X}^\dagger}$ : Sei  $\psi \in D_{\hat{X}}$  fest und  $\phi \in D_{\hat{X}}$  beliebig gewählt. dann folgt

$$|(\psi, \hat{X}\phi)| = \left| \int \psi^*(x)[x\phi(x)] dx \right| = \left| \int [x\psi(x)]^* \phi(x) dx \right|$$

Wegen  $\psi(x) \in D_{\hat{X}}$  ist dann  $x\psi \in L^2$  und man kann den Betrag des Skalarprodukts zu

$$|(\psi, \hat{X}\phi)| = |(\hat{X}\psi, \phi)| \leq \|\hat{X}\psi\| \cdot \|\phi\|$$

auswerten, wobei im letzten Schritt die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung angewendet wurde. Wegen der damit erhaltenen Ungleichung

$$|(\psi, \hat{X}\phi)| \leq \|\hat{X}\psi\| \cdot \|\phi\|$$

ist nun  $\psi$  ein Element von

$$\begin{aligned} D_{\hat{X}^\dagger} &= \{\psi \in L^2 : \text{es gibt ein } c \in \mathbb{R}^+, \text{ sodass } |(\psi, \hat{X}\phi)| \leq c\|\phi\| \text{ für alle } \phi \in D_{\hat{X}}\} \\ &= \{\psi \in L^2 : \phi \mapsto (\psi, \hat{X}\phi) \text{ ist stetiges, lineares Funktional auf } D_{\hat{X}}\} . \end{aligned}$$

- $D_{\hat{X}} \supseteq D_{\hat{X}^\dagger}$ : Sei  $\psi \in D_{\hat{X}^\dagger}$ , sodass  $\phi \mapsto (\psi, \hat{X}\phi)$  ein stetiges lineares Funktional auf  $D_{\hat{X}}$  ist. Der Satz von Hahn-Banach garantiert nun die Existenz einer stetigen, linearen Fortsetzung  $T : \phi \longrightarrow T(\phi)$  dieses Funktionals auf den ganzen Hilbertraum  $L^2$ . Da der Definitionsbereich  $D_{\hat{X}}$  dicht in  $L^2$  liegt, ist diese Fortsetzung darüber hinaus auch eindeutig.

Für stetige, lineare Funktionale auf dem ganzen Hilbertraum liefert der Satz von Riesz-Fréchet dann, dass es ein  $\xi \in L^2$  gibt mit der Eigenschaft, dass  $T(\phi) = (\xi, \phi)$  für alle  $\phi \in L^2$  gilt. Daher gilt erst recht für alle  $\phi \in D_{\hat{X}}$ , dass  $(\psi, \hat{X}\phi) = (\xi, \phi)$  ist, also folgt

$$\int (x\psi - \xi)^* \phi dx = 0 .$$

Daraus folgt, dass fast überall  $x\psi - \xi = 0$  ist, andernfalls wäre entweder  $\Re(x\psi - \xi) \neq 0$  oder  $\Im(x\psi - \xi) \neq 0$  auf einer Menge  $M$  vom Maß größer als Null und die Wahl  $\phi(x) = 1$  auf  $M$  und 0 sonst würde der vorigen Integralbedingung widersprechen. Damit ist

$$x\psi = \xi \in L^2$$

und damit  $\psi \in D_{\hat{X}}$ .

- Der adjungierte Operator  $\hat{X}^\dagger$  ist durch  $(\hat{X}^\dagger\psi, \phi) = (\psi, \hat{X}\phi)$  bestimmt. Wie wir bereits unter dem zweiten Punkt gesehen haben, gilt

$$\hat{X}^\dagger\psi = \xi = x\psi = \hat{X}\psi$$

für alle  $\psi \in D_{\hat{X}^\dagger} = D_{\hat{X}}$ . Also stimmen  $\hat{X}$  und  $\hat{X}^\dagger$  überein.

Damit ist gezeigt, dass der Ortsoperator  $\hat{X}$  auf dem Definitionsbereich  $D_{\hat{X}}$  selbstadjungiert ist.

### B.3. Der Impulsoperator

Einen passenden Definitionsbereich für den Impulsoperator  $\hat{P}$  zu finden ist schwieriger als für den Ortsoperator. Wir geben im Folgenden daher nur eine mögliche Wahl desselben an. Bevor wir dies aber tun, führen wir zunächst die folgende Begrifflichkeit ein: Eine Funktion  $\psi(x)$  heie absolut stetig auf dem Intervall  $[a, b]$ , wenn es eine integrable Funktion  $\kappa(x) \in L^1$  gibt, sodass

$$\psi(x) = \psi(a) + \int_a^b \kappa(y) dy$$

gilt. Absolut stetige Funktionen sind insbesondere differenzierbar mit  $\psi'(x) = \kappa(x)$ . Als differenzierbare Funktionen sind sie also stetig und auf jedem kompakten Intervall quadratintegrabel.

Für den Impulsoperator  $\hat{P}$  beschränken wir uns zunächst auf ein endliches Intervall  $[a, b]$  und wählen als Definitionsbereich eine geeignete Untermenge von

$$D_{\hat{A}} = \{\psi \in L^2([a, b]) : \psi \text{ ist absolut stetig und } \psi' \in L^2\} .$$

Für  $\psi, \phi \in D_{\hat{A}}$  folgt unter Verwendung partieller Integration

$$(\psi, \hat{P}\phi) = \int_a^b \psi^* \left( -i \frac{d}{dx} \phi \right) dx = -i \psi^* \phi \Big|_a^b + \int_a^b \left( -i \frac{d}{dx} \psi \right)^* \phi dx = -i \psi^* \phi \Big|_a^b + (\hat{P}\psi, \phi) .$$

Damit  $\hat{P}$  wenigstens hermitesch ist, müssen wir also fordern, dass

$$\psi^* \phi \Big|_a^b = \psi^*(b)\phi(b) - \psi^*(a)\phi(a) = 0 \tag{B.1}$$

für alle  $\psi$  und  $\phi$  im Definitionsbereich von  $\hat{P}$  gilt. Setzen wir hier  $\psi = \phi$ , so folgt insbesondere  $|\psi(b)| = |\psi(a)|$  und daraus

$$\psi(b) = e^{i\theta} \psi(a)$$

mit einer Konstanten  $\theta$ , welche die komplexe Phase spezifiziert. Solange  $\psi$  an den Rändern nicht verschwindet, muss dabei  $\theta$  unabhängig von  $\psi$  gewählt werden, etwa  $\phi(b) = e^{i\sigma} \phi(a)$ . Dann folgt aus Bedingung (B.1) dass

$$\psi(b)^* \phi(b) - \psi(a)^* \phi(a) = \psi(a)^* \phi(a) [e^{i(\theta-\sigma)} - 1] = 0$$

ist, woraus wir wegen  $\psi(a), \phi(a) \neq 0$  die Gleichheit von  $\theta$  und  $\sigma$  bis auf Vielfache von  $2\pi$  folgern.

Damit haben wir gezeigt, dass  $\hat{P}$  hermitesch ist, wenn wir als Definitionsbereich für den Operator die Funktionenmenge

$$D_{\hat{P}} = \{\psi \in L^2([a, b]) : \psi \text{ ist absolut stetig, } \psi' \in L^2([a, b]), \psi(b) = e^{i\theta} \psi(a)\}$$

wählen, wobei  $\theta$  eine beliebige, aber fest gewählte Konstante ist. Der Definitionsbereich von  $\hat{P}$  ist insofern nicht eindeutig bestimmt.

Zuletzt wollen wir noch zeigen, dass der Impulsoperator  $\hat{P}$  auf diesem Definitionsbereich selbstadjungiert ist. Dazu müssen wir noch zeigen, dass  $D_{\hat{P}^\dagger} \subseteq D_{\hat{P}}$  gilt, sei also  $\psi \in D_{\hat{P}^\dagger}$ . Dann gibt es wie im Fall des Ortsoperators nach den Sätzen von Hahn-Banach und Riesz-Fréchet ein  $\xi \in L^2 \subseteq L^1$ , sodass

$$(\psi, \hat{P}\phi) = (\xi, \phi)$$

für alle  $\phi \in D_{\hat{P}}$  gilt. Nun definieren wir dazu

$$\tilde{\psi} := \int_a^b \xi(y) dy .$$

Dieses  $\tilde{\psi}$  ist absolut stetig auf  $[a, b]$  - dies impliziert, dass  $\phi \in L^2([a, b])$  liegt, falls  $a$  und  $b$  endlich sind - und es gilt  $\tilde{\psi}' = \xi \in L^2$ . Daraus folgt für  $\phi \in D_{\hat{P}}$  dann

$$\begin{aligned} (\psi, \hat{P}\phi) &= (\xi, \phi) = \int_a^b \tilde{\psi}'^* \phi dx = \tilde{\psi}^* \phi \Big|_a^b - \int_a^b \tilde{\psi}^* \phi' dx = \tilde{\psi}^* \phi \Big|_a^b + \int_a^b (i\tilde{\psi})^* (-i\phi') dx \\ &= \tilde{\psi}^* \phi \Big|_a^b + (i\tilde{\psi}, \hat{P}\phi) = [\tilde{\psi}^*(b)e^{i\theta} - \tilde{\psi}^*(a)] \phi(a) + (i\tilde{\psi}, \hat{P}\phi) . \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Nun betrachten wir diejenigen  $\phi$ , welche in der dichten Teilmenge

$$D_{\hat{P}}^0 := \{ \phi : \phi \in D_{\hat{P}} \text{ und } \phi(a) = 0 \}$$

liegen. Für diese verschwindet der bei der partiellen Integration auftretende Randterm und es gilt

$$(\psi, \hat{P}\phi) = (i\tilde{\psi}, \hat{P}\phi) \iff (\psi - i\tilde{\psi}, \hat{P}\phi) = 0 . \quad (\text{B.3})$$

Wir können dies auch als  $(\psi - i\tilde{\psi}, \zeta) = 0$  für alle  $\zeta$  aus der dichten Teilmenge

$$PD_{\hat{P}}^0 := \{ \zeta : \zeta = \hat{P}\xi \text{ für ein } \xi \in D_{\hat{P}}^0 \}$$

schreiben. Da also (B.3) für alle  $\zeta$  aus einer dichten Teilmenge gilt, muss fast überall  $\psi - i\tilde{\psi} = 0$  gelten. Damit ist  $\psi = i\tilde{\psi}$  absolut stetig und die Ableitung  $\psi' = i\xi$  eine  $L^2$ -Funktion. Außerdem folgt, dass

$$(\psi, \hat{P}\phi) = (i\tilde{\psi}, \hat{P}\phi)$$

für alle  $\phi \in D_{\hat{P}}$  gilt, woraus sich wegen (B.2) die Bedingung  $\tilde{\psi}(b) = e^{i\theta} \tilde{\psi}(a)$  ergibt. Damit liegt  $\psi$  im Definitionsbereich von  $\hat{P}$  und der Impulsoperator mit diesem Definitionsbereich ist selbstadjungiert.

## C. Spezielle Polynome und Tabellen

In der Quantenmechanik stößt man bei der analytischen Bestimmung der Eigenzustände des harmonischen Oszillators, den Kugelflächenfunktionen und den Eigenzuständen des Wasserstoff-Atoms auf einige spezielle Polynomtypen. Da diese Polynome immer wieder auftauchen, sind sie hier noch einmal zusammengestellt. Nähere Informationen über ihre Herleitung bzw. die nötigen Umformungsschritte finden sich etwa unter <http://www.mathworld.com>.

### C.1. Die Hermite-Polynome

Die Hermiteschen Polynome tauchen bei der Bestimmung der Oszillator-Eigenzustände auf (vgl. Seite 214), für sie gilt:

$$H_n(x) = \frac{n!}{2\pi i} \oint e^{-t^2 - 2tx} t^{-n-1} dt = \left( e^{x^2} \frac{d^n}{dt^n} e^{-(x-t)^2} \right) \Big|_{t=0} = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dt^n} e^{-x^2}.$$

Die ersten Hermite-Polynome lauten damit:

$$H_0(x) = 1$$

$$H_1(x) = 2x$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x$$

$$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$$

$$H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x$$

$$H_6(x) = 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120$$

$$H_7(x) = 128x^7 - 1344x^5 + 1360x^3 - 1680x$$

$$H_8(x) = 256x^8 - 3584x^6 + 13440x^4 - 13440x^2 + 1680$$

$$H_9(x) = 512x^9 - 9216x^7 + 48384x^5 - 80640x^3 + 30240x$$

### C.2. Legendre-Polynome

Die Legendre-Polynome werden manchmal als Legendre-Funktionen erster Ordnung bezeichnet und sind die Lösungen der Legendreschen Differentialgleichung

$$(1-x^2) \frac{d^2 y}{dx^2} - 2x \frac{dy}{dx} + \ell(\ell+1)y = 0 \iff \frac{d}{dx} \left[ (1-x^2) \frac{dy}{dx} \right] + \ell(\ell+1)y = 0$$

und lassen sich durch

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \oint (1-2tx+t^2)^{-\frac{1}{2}} t^{-\ell-1} dt = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} (x^2-1)^\ell$$

darstellen. Als zugeordnete Legendresche Differentialgleichung bezeichnet man dann

$$\frac{d}{dx} \left[ (1-x^2) \frac{dy}{dx} \right] + \left( \ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right) y = 0$$

$$\iff (1-x^2) \frac{d^2y}{dx^2} - 2x \frac{dy}{dx} + \left( \ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right) y = 0,$$

deren Lösungen die zugeordneten Legendreschen Polynome

$$P_{\ell m}(x) = (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_{\ell}(x) = \frac{(-1)^m}{2^{\ell} \ell!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2+1)^{\ell}$$

sind. Die ersten dieser zugeordneten Legendre-Polynome sind:

$P_{0,0}(x) = 1$	$P_{0,0}(\cos \theta) = 1$
$P_{1,0}(x) = x$	$P_{1,0}(\cos \theta) = \cos \theta$
$P_{1,1}(x) = -(1-x^2)^{\frac{1}{2}}$	$P_{1,1}(\cos \theta) = -\sin \theta$
$P_{2,0}(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1)$	$P_{2,0}(\cos \theta) = \frac{1}{2}(3\cos^2 \theta - 1)$
$P_{2,1}(x) = -3x(1-x^2)^{\frac{1}{2}}$	$P_{2,1}(\cos \theta) = -3\sin \theta \cos \theta$
$P_{2,2}(x) = 3(1-x^2)$	$P_{2,2}(\cos \theta) = 3\sin^2 \theta$

### C.3. Laguerre-Polynome

Zuletzt finden sich die Laguerreschen Polynome bei der analytischen Lösung des Radialteils der Wasserstoff-Wellenfunktionen. Diese sind Lösungen der Differentialgleichung

$$x \frac{d^2y}{dx^2} + (1-x) \frac{dy}{dx} + \lambda y = 0$$

und nehmen die Form

$$L_n(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{e^{-\frac{zt}{1-t}}}{(1-t)t^{n+1}} dt = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x})$$

an. Ähnlich wie bei den Legendre-Polynomen gibt es eine allgemeinere zugeordnete Laguerre-Differentialgleichung

$$x \frac{d^2y}{dx^2} + (\nu+1-x) \frac{dy}{dx} + \lambda y = 0$$

aus der die vorige Variante für  $\nu = 0$  hervorgeht. Die zugeordneten Laguerre-Polynome lassen sich als

$$L_n^{\ell}(x) = \frac{e^x x^{-\ell}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+\ell}) = (-1)^k \frac{d^{\ell}}{dx^{\ell}} L_{n+\ell}(x)$$

$$= \sum_{m=0}^n (-1)^m \frac{[(n+\ell)!]^2}{(n-m)! \cdot (\ell+m)! \cdot m!} x^m = \frac{1}{n!} \sum_{i=1}^n \frac{n!}{i!} \binom{n+\ell}{n-i} (-x)^i$$

schreiben.

### C.4. Clebsch-Gordan-Koeffizienten

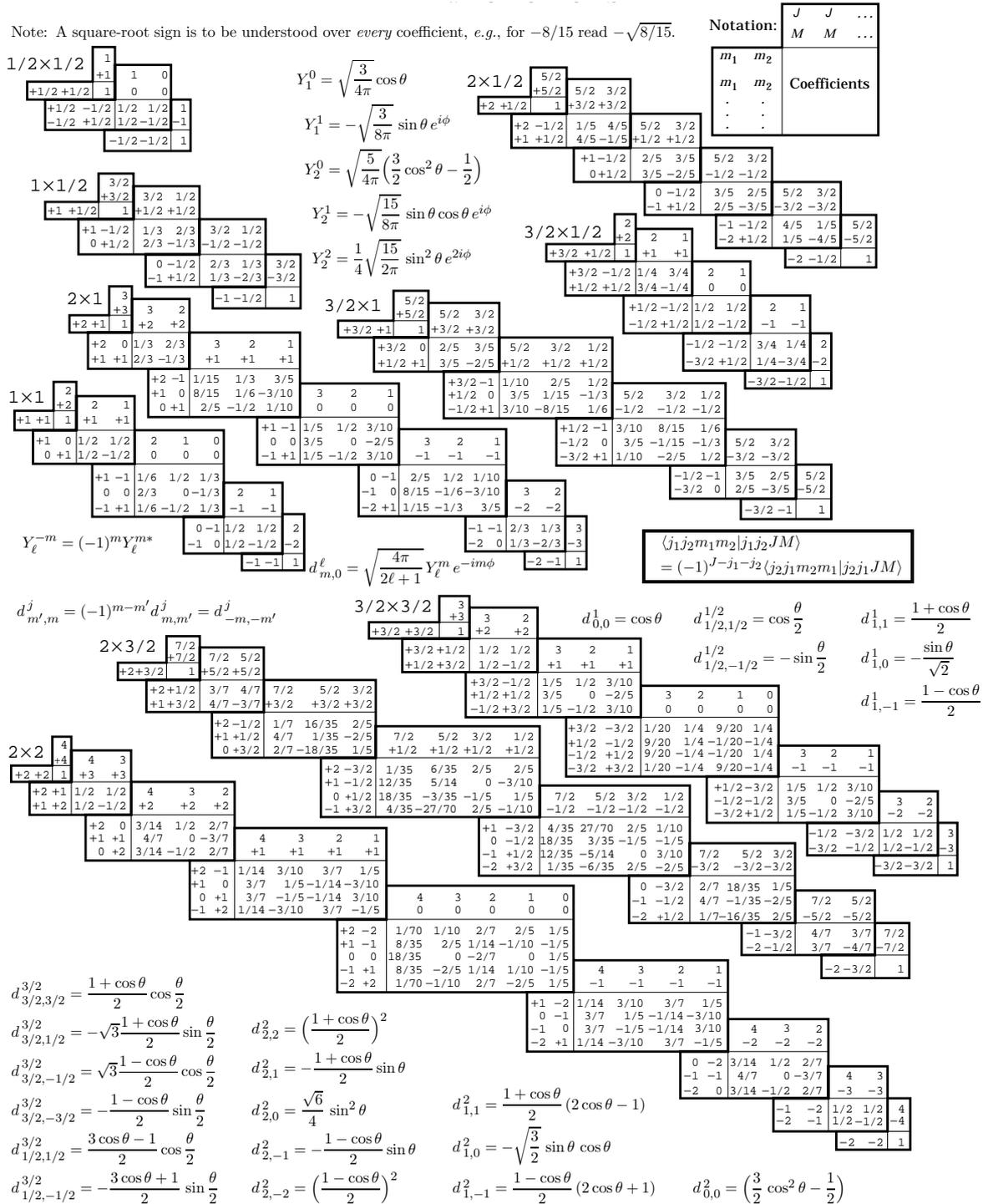


Figure 34.1: The sign convention is that of Wigner (*Group Theory*, Academic Press, New York, 1959), also used by Condon and Shortley (*The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge Univ. Press, New York, 1953), Rose (*Elementary Theory of Angular Momentum*, Wiley, New York, 1957), and Cohen (*Tables of the Clebsch-Gordan Coefficients*, North American Rockwell Science Center, Thousand Oaks, Calif., 1974). The coefficients here have been calculated using computer programs written independently by Cohen and at LBNL.



# Literaturverzeichnis

- [CTDL99] COHEN-TANNOUJDI, Claude ; DIU, Bernard ; LALOË, Franck: *Quantenmechanik*. 2nd. Berlin : Walter de Gruyter, 1999
- [d'I95] D'INVERNO, Ray: *Einführung in die Relativitätstheorie*. Weinheim Berlin New York : Wiley-VCH Verlag, 1995. – Introducing Einstein's Relativity, 1992
- [Fli00a] FLIESSBACH, Torsten: *Elektrodynamik*. 3rd. München : Elsevier, Spektrum Akademischer Verlag, 2000
- [Fli00b] FLIESSBACH, Torsten: *Quantenmechanik*. 3rd. München : Elsevier, Spektrum Akademischer Verlag, 2000
- [Fli03] FLIESSBACH, Torsten: *Mechanik*. 4th. München : Elsevier, Spektrum Akademischer Verlag, 2003
- [Jac01] JACKSON, John D.: *Klassische Elektrodynamik*. 3rd. Berlin : Walter de Gruyter, 2001
- [Kuy97] KUYPERS, Friedhelm: *Klassische Mechanik*. 5th. Weinheim Berlin New York : Wiley-VCH Verlag, 1997
- [Reb99] REBHAN, Eckhard: *Theoretische Physik I - Mechanik, Elektrodynamik, Relativitätstheorie, Kosmologie*. München : Elsevier, Spektrum Akademischer Verlag, 1999 (Spektrum Lehrbuch)
- [Reb05] REBHAN, Eckhard: *Theoretische Physik II - Quantenmechanik, Quantenfeldtheorie, Elementarteilchentheorie, Thermodynamik und Statistik*. München : Elsevier, Spektrum Akademischer Verlag, 2005 (Spektrum Lehrbuch)

# Index

- Übergangswahrscheinlichkeit, 183
- 1. Axiom der Quantenmechanik, 178
- 1. Axiom der Quantenmechanik (verallgemeinert), 199
- 2. Axiom der Quantenmechanik, 179
- 3. Axiom der Quantenmechanik, 182
- 4. Axiom der Quantenmechanik, 185
- 5. Axiom der Quantenmechanik, 250
  
- Abschluss eines Operators, 179
- Abstrahlungsenergie, 130
- Allgemeines Newtonsches Gravitationsgesetz, 4
- Ampèresches Durchflutungsgesetz, 107
- Ampèresches Gesetz, 103, 104
- Arbeit, 12
- Ausschlussprinzip, 251
- Austauschentartung, 250
  
- Bahnkurve, 2
- beschränkter Operator, 180
- bewegte Masse, 89
- Bewegung, 2
- Bewegungsgröße, 2
- Bindungsenergie, 209
- Bindungszustand, 209
- Biot-Savart-Gesetz, 105
- Bohrscher Radius, 242
- Bohrsches Magneton, 109
- Boson, 250
  - identische, 252
- Bra-Vektor, 178
  
- Clebsch-Gordan-Koeffizienten, 233
- Compton-Wellenlänge, 146
- Coulomb-Gesetz, 97
  
- D'Alembert-Operator, 119
- D'Alembertsches Prinzip, 32
- Darstellung, 189
  - Spektraldarstellung, 190
- de Broglie-Relationen, 146
- Determinismus, 3
- deterministisch, 144
- Dichte-Operator, 198
- Dipolmoment, 101
- Dispersion, 171
- Dissipationsenergie, 103
- Divergenz, 15, 263
- Drehimpuls, 18
  - Quantisierung, 223
- drehinvariant, 221
- Drehmoment, 18
  
- Ebene Wellen-Lösung, 121
- Eichtransformation, 36
- Eigendrehimpuls, 219, 227
- Eigenfunktion, 172
- Eigenwert, 172
- Eigenzeit, 82
- Eigenzeitintervall, 82
  
- Eindringtiefe, 204
- Einstein-Kraft, 91
- Elektromotorische Kraft, 103
- Elliptische Polarisierung, 125
- Energie
  - Bindungsenergie, 209
  - Dissipationsenergie, 103
  - Eigenfunktionen, 243
  - kinetische, 12
- Energie-Funktion, 47
- Energiedichte
  - elektrische, 114
  - elektromagnetische, 115
- Erhaltungsgröße, 42, 188
- Erwartungswert, 155
- Erweiterung eines Operators, 179
  
- Fermion, 250
  - identische, 252
- Fernwirkungsprinzip, 96
- form-invariant, 36
- Fourier-Transformation, 168
- Freier Körper, 4
  
- Galilei-Gruppe, 48, 67
- Galilei-Transformation, 67
- Gauß, 98
- Generatoren der Symmetrie, 217
- Gesetz
  - Coulomb, 97
  - Kraftgesetz, 3
- Gradient, 15, 262
- Gravitationskraft, 16
- Green-Gleichung, 126
- Grundzustandsvektor, 213
  
- Hamilton-Funktion, 51
- Hamilton-Gleichungen, 51
- Hamilton-Operator, 167
- Harmonischer Oszillator, 16
- Heisenbergbild, 191
- Heisenbergsche Unschärferelation, 170, 196
- hermitesch konjugiert, 171
- hermitescher Operator, 180
- holonom, 30
  
- Impuls
  - kanonischer, 42
- Impuls-Operator
  - Eigenfunktionen, 174
- Impulserhaltung, 18
- Impulsunschärfe, 170
- Inertialsystem, 4
  - instantanes, 81
  - lokales, 81
- innerer Drehimpuls, 219, 227
- Interferenzterm, 158
  
- Jacobi-Funktion, 47

- Joulesche Wärme, 103
- Körper  
  freier, 4  
  kanonisch, 56  
  Kanonische Gleichungen, 51  
  Kanonischer Impuls, 42  
  kausal, 144  
  Kinetische Energie, 12  
  Kirchhoffsche Knotenregel, 102  
  Kollaps der Wellenfunktion, 172, 183  
  Kommutator, 171  
  konfluent hypergeom. Dgl., 242  
  konfluent hypergeom. Funktion, 242  
  Konstante der Bewegung, 42  
  Kontinuierliches Spektrum, 181  
  Kontinuitäts-Gleichung, 101  
  für Wahrscheinlichkeiten, 175  
  kontragradient, 86  
  kontravariant, 84  
  Korrespondenzprinzip, 166  
  kovariant, 36  
  kovariante, 85  
  Kraft  
  Einstein, 91  
  elektromotorische, 103  
  Gravitationskraft, 16  
  konservativ, 14  
  Lorentz, 106  
  magnetische, 103  
  Minkowski, 91  
  Zentralkraft, 16  
  Kraftfeld  
  Potential, 14  
  Kraftgesetz, 3  
  Kreisfrequenz, 10  
  Kugelflächenfunktionen, 226  
  Kugelwelle, 121
- Lagrange-Funktion, 34  
  Lagrange-Gleichung, 34  
  Laguerre-Polynom, 243  
  gewöhnliche, 243  
  Laplace-Operator, 99  
  Legendre-Polynome, 227  
  Legendre-Transformierte, 50  
  Leiter-Operatoren, 222  
  harmonischer Oszillator, 213  
  Leitfähigkeit, 103  
  Lenzsche Regel, 111  
  Liènard-Wiechert-Potentiale, 141  
  lichtartig, 85  
  Lichtkegel, 80  
  Lineare Polarisation, 124  
  linearer Operator, 179  
  Lorentz-Gruppe, 74, 84  
  Lorentz-Kraft, 106  
  Lorentz-Tensor, 86  
  Lorentz-Vektor, 85
- Magnetische Kraft, 103  
  Magnetischer Fluss, 110  
  Magnetisches Moment, 109  
  Masse  
  bewegte, 89  
  Ruhemasse, 89  
  schwere, 4  
  träge, 3
- Massepunkt, 2  
  System von Massepunkten, 2  
  Maxwell-Gleichungen  
  vollständige, 112  
  Maxwell-Spannungstensor, 117  
  Maxwellscher Verschiebungsstrom, 112  
  Metrischer Tensor, 75  
  Minkowski-Kraft, 91  
  Minkowski-Raum, 84
- Nahwirkungsprinzip, 96  
  Newtonsche Axiome, 2  
  nicht holonom, 30
- Observable  
  klassische, 53  
  Ohmsches Gesetz, 103  
  Orts-Operator  
  Eigenfunktionen, 174  
  Ortsunschärfe, 170  
  Oszillator  
  harmonischer, 16
- Pauli-Prinzip, engere Form, 252  
  Pauli-Spin-Matrizen, 230  
  Phasenraum, 52  
  Photonen, 145  
  Poincaré-Gruppe, 74, 84  
  Poisson-Gleichung, 99  
  Poisson-Klammer, 53  
  Polarisation  
  elliptische, 125  
  lineare, 124  
  zirkuläre, 125  
  links, 148  
  rechts, 148  
  Polarisations-Zustandsvektor, 152  
  Potential, 14  
  Poynting-Theorem, 116  
  Poynting-Vektor, 116  
  Prinzip  
  D'Alembert, 32  
  der kleinsten Wirkung, 41  
  Fernwirkungsprinzip, 96  
  Nahwirkungsprinzip, 96  
  Pauli-Ausschlussprinzip, 251  
  Superpositionsprinzip, 97  
  Punktspektrum, 181  
  Punkttransformation, 36
- Quabra, 119  
  Quantenmechanisches Noether-Theorem, 218  
  Quantisierung, 195  
  des Drehimpulses, 223  
  quasi-invariant, 43
- Rückwärtskegel, 80  
  Rapidität, 77  
  Raum der Wellenfunktionen, 164  
  raumartig, 85  
  Reflektionskoeffizient, 204  
  reiner Zustand, 178  
  Relativitätsprinzip, 69  
  Relativitätsprinzip der Mechanik, 68  
  Resolventenmenge, 180  
  rheonom, 30  
  Ricci-Kalkül, 75  
  Riesz-Fréchet, 178

- Rotation, 15, 264
- Ruhemasse, 89
- Schrödinger-Gleichung
  - Ein-Teilchen-, 163
  - freie Teilchen, 163
  - in Kugelkoordinaten, 236
  - zeitabhängige, 202
  - zeitunabhängige, 202
- Schwere Masse, 4
- selbstadjungierter Operator, 180
  - wesentlich selbstadj., 180
- skleronom, 30
- Spannung, 101
- Spektraldarstellung, 190
- Spektrum, 180
  - kontinuierliches, 181
  - Punktspektrum, 181
- sphärische Bessel-Funktion, 238
- Spin, 219, 227
- Spinor, 228
- Stark-Effekt
  - linearer, 258
  - quadratischer, 257
- stationärer Zustand, 187
- Strahlungsfeld, 129
- streng invariant, 43
- Streuzustand, 209
- Strom, 101
- Stromstärke, 102
- Superpositionsprinzip, 97
- Symmetriegruppe, 43
- Symmetrietransformation, 42
  
- Tensornotation, 72
- Träge Masse, 3
- Transformation
  - Eichtransformation, 36
  - Fourier, 168
  - kanonische, 56
  - Legendre-Transformation, 50
  - Poincaré, 84
  - Potential-Eichtransformation, 118
  - Punkttransformation, 36
  - spezielle Galilei-, 67
  - Symmetrietransformation, 42
- Transmissionskoeffizient, 205
- Tunneleffekt, 207
  
- Unbestimmtheitsrelation, 170, 196
- unitäre Darstellung, 217
- Unschärfe, 171
- Unschärferelation, 170, 196
  
- Vektor-Operatoren, 226
  - vergangenheitsorientiert, 85
- Vertauschungsrelation, 171
- Viererbeschleunigung, 90
- Vierergeschwindigkeit, 89
- Viererimpuls, 89
- Viererlängenelement, 75
- Vierervektor, 72, 85
- Virtuelle Verrückung, 32
- Vorwärtskegel, 80
  
- Wahrscheinlichkeitsamplitude, 154
- Wellenfunktion
  - antisymmetrisch, 248
  - Eigenschaften, 162
  - Kollaps, 172, 183
  - Raum der Wellenfunktionen, 164
  - symmetrisch, 248
- Weltlinie, 2
- Wigner, 215
  
- zeitartig, 85
- Zeitentwicklungsoperator, 186
- Zirkuläre Polarisation, 125
- zukunftsorientiert, 85
- Zustand
  - reiner, 178
- Zwangsbedingungen
  - holonome, 30
  - nicht holonome, 30
  - rheonome, 30
  - skleronome, 30
- zyklisch, 42