

Moderne Physik für Informatiker

SOMMERSEMESTER 2019

KARLSRUHER INSTITUT FÜR TECHNOLOGIE (KIT)

GEHALTEN VON

PROF. DR. M. M. MÜHLEITNER

Inhaltsverzeichnis

1	Vorbemerkungen	1
1.1	Inhaltsangabe	1
1.2	Literatur	1
1.3	Einführung	2
1.3.1	Moderne Physik	2
1.3.2	Vorläufiger Aufbau der Vorlesung	3
2	Klassische Newtonsche Mechanik	5
2.1	Newtonsche Gesetze	5
2.2	Kräfte	6
2.2.1	Konservative Kräfte	7
2.3	Inertialsysteme, Nicht-Inertialsysteme	8
2.4	Weitere Themen	9
3	Lagrangeformalismus	11
3.1	Lagrangegleichungen 1. Art	12
3.2	Lagrangegleichungen 2. Art	15
3.2.1	Verallgemeinerte Koordinaten	15
3.2.2	Die Lagrangefunktion	16
3.3	Erhaltungsgrößen	18
3.3.1	Energieerhaltung (“Homogenität der Zeit”)	18
3.3.2	Zyklische Koordinaten	19
3.4	Beispiel: Schwingende Hantel	20
4	Variationsprinzipien in der Mechanik	23
4.1	Die Euler-Lagrange-Gleichung	23
4.2	Hamiltonsches Prinzip	25
4.2.1	Bemerkungen	26
4.2.2	Unbestimmtheit der Lagrangefunktion	27
5	Hamiltonformalismus	29
5.1	Kanonische Gleichungen	29
5.1.1	Vorgehen im Hamiltonformalismus	31
5.2	Poissonklammer	33
5.3	Hamiltonsches Prinzip	34
5.4	Zustand eines Systems	35

6	Spezielle Relativitätstheorie	39
6.1	Das Michelson-Morley Experiment	41
6.2	Die Einsteinschen Postulate	43
6.3	Die Lorentztransformation	44
6.3.1	Einschub: Index Notation	44
6.3.2	Herleitung der Lorentz-Transformation	46
6.4	Folgerungen aus der Lorentz-Transformation	49
6.5	Relativistische Mechanik	54
6.5.1	Relativistische Geschwindigkeit	54
6.5.2	Verallgemeinerte Kraftgleichung	55
6.5.3	Der Vierer-Impuls	56
6.6	Zusammenfassung einiger wichtiger Relationen	57
7	Quantenmechanik	61
7.1	Historische Experimente, Widersprüche und Erkenntnisse	62
7.1.1	Hohlraumstrahlung	62
7.1.2	Welle-Teilchen Dualismus	65
7.1.3	Atomphysik	67
7.1.4	Teilchenwellen	68
7.2	Schrödinger-Gleichung	69
7.2.1	Die Wellenfunktion und ihre Wahrscheinlichkeitsinterpretation	69
7.2.2	Die Schrödingergleichung	71
7.2.3	Einschub: Operatoren und Skalarprodukt	73
7.2.4	Normierung der Wellenfunktion	74
7.2.5	Vertauschungsrelation, Korrespondenzprinzip	77
7.2.6	Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung	77
7.3	Eindimensionale Rechteckpotentiale	78
7.3.1	Allgemeine Eigenschaften	78
7.3.2	Anschlußbedingungen	79
7.3.3	Potentialstufe	80
7.3.4	Tunneleffekt, Potentialschwelle	83
7.4	Mathematische Hilfsmittel	85
7.4.1	Zustandsraum der Wellenfunktionen	85
7.4.2	Dirac-Notation	87
7.5	Die Grundpostulate der Quantenmechanik	90
7.6	Der harmonische Oszillator	93
7.6.1	Harmonischer Oszillator in der klassischen Mechanik	93
7.7	Harmonischer Oszillator in der Quantenmechanik	94
7.7.1	Die algebraische Lösung der Differentialgleichung	94
7.7.2	Diskussion der Resultate	100
7.7.3	Der dreidimensionale harmonische Oszillator in kartesischen Koordinaten	103
7.8	Zwei-Zustandssysteme	104
7.8.1	Das Stern-Gerlach Experiment	105
7.8.2	Quantenmechanik für Spin 1/2	106

Kapitel 1

Vorbemerkungen

Disclaimer: Dieses Vorlesungsskript erhebt keinesfalls den Anspruch auf Fehlerfreiheit.

1.1 Inhaltsangabe

- I. Analytische Mechanik
- II. Spezielle Relativitätstheorie
- III. Quantenmechanik

1.2 Literatur

Lehrbücher:

- Analytische Mechanik
 - T. Fließbach, *Lehrbuch zur Theoretischen Physik 1 - Mechanik*, Spektrum
 - W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 1+2*, Springer
 - H. Goldstein, C. P. Poole, J. L. Safko, *Klassische Mechanik*, Wiley-VCH
 - L. D. Landau, E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik I (Mechanik)*, Harri Deutsch
- Spezielle Relativitätstheorie
- Quantenmechanik

Mathematische Ergänzung

- I.N. Bronstein, K.A. Semendjajew, G. Musiol, H. Mühlig, *Taschenbuch der Mathematik*, Verlag Harri Deutsch.
- R. Shankar, *Basic Training in Mathematics (A Fitness Program for Science Students)*, Plenum Press, New York.

1.3 Einführung

1.3.1 Moderne Physik

Der Begriff der 'Modernen Physik' ist in Abgrenzung zur 'klassischen Physik' entstanden. Den Kern der klassischen Physik bilden die Mechanik, der Elektromagnetismus und die Thermodynamik. Die Moderne Physik wurde zu Beginn des 20. Jahrhunderts entwickelt, um Probleme zu verstehen und erklären zu können, die mit den Mitteln der klassischen Physik nicht mehr zugänglich waren. Die klassische Physik beruht auf dem Paradigma, dass alles im Prinzip berechnbar ist, solange die Anfangsbedingungen, also z.B. Ort $\vec{x}_i(t)$ und Geschwindigkeit $\dot{\vec{x}}_i(t)$ eines Massenpunktes i , bekannt sind. Die Experimente zeigten aber immer mehr Widersprüche, die zu ihrer Erklärung einen anderen Ansatz erforderten:

- Die idealisierte thermische Strahlungsquelle eines schwarzen Körpers absorbiert elektromagnetische Strahlung vollständig und sendet in Abhängigkeit von seiner Temperatur Wärmestrahlung aus. Der Versuch, die Schwarzkörperstrahlung rein klassisch zu beschreiben führte jedoch zur Ultraviolett (UV)-Katastrophe: Die über den gesamten Frequenzbereich integrierte Energie der Strahlung strebt für jede Temperatur $T > 0$ gegen unendlich. Erst Max Plancks Annahme, dass die Strahlungsenergie nur in Form von Energiequanten aufgenommen und abgegeben werden kann, löste dieses Problem.
- Der photoelektrische Effekt kann klassisch nicht erklärt werden. In der klassischen Betrachtungsweise sollte Licht in Abhängigkeit von seiner Intensität Energie auf das Elektron eines Metalls übertragen und dieses heraus schlagen. Tatsächlich aber ist nicht die Intensität des Lichts entscheidend sondern vielmehr die Frequenz des Lichts. Dieses Phänomen kann erklärt werden, wenn man annimmt, dass das Licht Teilchencharakter hat und dass ein Lichtquant die Energie $E = h\nu$ trägt, die also von seiner Frequenz ν abhängt. Mit h wird das Planck'sche Wirkungsquantum bezeichnet.
- Das klassische Rutherford'sche Atommodell, bei dem Elektronen sich um einen positiven Atomkern bewegen, stellt klassisch ein Rätsel dar. Ein Elektron wird auf einer Umlaufbahn ständig beschleunigt und strahlt somit elektromagnetische Energie ab. Ein Atom müsste also instabil sein und das Elektron spiralförmig in den Kern stürzen. Dieses Modell kann auch nicht erklären, warum Atome nur Licht bestimmter Wellenlängen emittieren.
- Das Michelson-Morley Experiment zeigte, dass die endliche Ausbreitungsgeschwindigkeit des Lichts unabhängig von seiner Richtung ist, und dass die Auswirkungen eines Äthers, gegen den sich die Erde bewegt, nicht feststellbar sind. Licht bewegt sich relativ zum Beobachter in jeder Richtung mit der Lichtgeschwindigkeit c , egal in welchem Bezugssystem sich der Beobachter befindet. Dies ist eine Aussage der speziellen Relativitätstheorie, in der Raum und Zeit untrennbar miteinander verknüpft sind.

Wie schon bemerkt ist der Begriff Moderne Physik relativ zur klassischen Physik zu sehen. Heute sind manche der Theorien der modernen Physik bereits wieder eingeschränkt. Geht es z.B. um Elementarteilchen, so wird in der zeitgenössischen Physik die Quantenfeldtheorie verwendet. Sie beruht auf dem Konzept der Feldquanten und deren Wechselwirkung.

1.3.2 Vorläufiger Aufbau der Vorlesung

Die Vorlesung behandelt die klassische Mechanik, die relativistische Mechanik und die Quantenmechanik.

Klassische Mechanik

Nach einer kurzen Erinnerung an die Newtonsche Mechanik, gehen wir über zu einer formaleren, analytischen Beschreibung der Mechanik, die den Lagrange-, Hamilton- und Hamilton-Jacobi-Formalismus einschließt. Sie erlaubt eine theoretische Diskussion der zu behandelnden Probleme, die sich die Symmetrien des Systems zunutze macht. Diese sind über das Noether-Theorem mit Erhaltungsgrößen verknüpft. Der Hamiltonformalismus, welcher gegenüber dem Lagrangemechanismus, für die praktische Lösung von Problemen keinen Vorteil bietet, bildet den Ausgangspunkt für die Untersuchung der Relationen zwischen der Mechanik und der Quantenmechanik. Es werden die Begriffe Hamiltonoperator und kanonisch konjugierte Variablen eingeführt.

Relativistische Mechanik

Das Prinzip, dass Raum und Zeit nicht voneinander trennbar sind, führt zur speziellen Relativitätstheorie. Während Phänomene bei geringen Geschwindigkeiten mit der klassischen Physik beschrieben werden können, kann erst die spezielle Relativitätstheorie die bei sehr hohen Geschwindigkeiten erklären.¹ Die Entwicklung der Theorie 1905 durch Albert Einstein beruhte auf Fortschritten im Gebiet des Elektromagnetismus Ende des 19. Jahrhunderts. Einsteins geniale Arbeit war ein gewaltiger Schritt nach vorne und hatte radikale Konsequenzen und so zunächst auch zahlreiche Gegner. Eine wichtige Konsequenz ist die Äquivalenz von Masse und Energie. Zum Inhalt: Es wird das Michelson-Morley Experiment vorgestellt. Es werden die Einstein'schen Postulate, Lorentztransformationen, der Minkowskiraum und die relativistische Formulierung der Elektrodynamik behandelt. Falls zeitlich möglich wird auch die Mechanik eines relativistischen Teilchens untersucht.

Quantenmechanik

Die Quantenmechanik erlaubt im Gegensatz zur klassischen Mechanik die Beschreibung und die Berechnung der physikalischen Eigenschaften von Materie im Größenbereich von Atomen und darunter. Sie bildet die Grundlage zur Beschreibung der Phänomene der Atomphysik, der Festkörperphysik, der Kern- und Elementarteilchenphysik. Nach ein wenig Historie, werden einfache eindimensionale Probleme behandelt, die mit Hilfe der Schrödingergleichung beschrieben werden können. Sie bildet die grundlegende Gleichung der nichtrelativistischen Quantenmechanik und wurde 1926 von Erwin Schrödinger als Wellengleichung aufgestellt. Es werden die Grundpostulate der Quantenmechanik vorgestellt. Symmetrien werden behandelt und hierbei insbesondere der Drehimpuls und der Spin. Das Wasserstoffatom wird berechnet. Die Behandlung von identischen Teilchen in der Quantenmechanik wird beleuchtet, welche letztlich auf die Unterscheidung von Bosonen und Fermionen führt.

¹Die spezielle Relativitätstheorie stimmt bei niedrigen Geschwindigkeiten natürlich mit der klassischen Physik überein, so dass letztere letztlich als Spezialfall ersterer anzusehen ist.

Kapitel 2

Klassische Newtonsche Mechanik

In der klassischen Mechanik geht es um die Bewegung bzw. die Bewegungszustände von Körpern unter dem Einfluß von Kräften. Eine typische Problemstellung der Mechanik ist:

Gegeben seien für ein System von Massenpunkten $1 \leq i \leq N$ deren Orte $\vec{r}_i(t_0)$ und deren Geschwindigkeiten $\vec{v}_i(t_0)$ zu einer bestimmten Anfangszeit t_0 . Auf diese Massenpunkte wirken sowohl äußere Kräfte \vec{F} als auch Kräfte zwischen ihnen. Diese seien für die Wirkung zwischen Massenpunkt i und Massenpunkt j durch \vec{F}_{ij} bezeichnet. Wie lauten nun die *kinematischen Größen* $\vec{r}_i(t)$ und $\vec{v}_i(t) \equiv \dot{\vec{r}}_i(t)$ ¹ für beliebige Zeiten danach? Zur Lösung des Problems werden Differentialgleichungen aufgestellt, und die kinematischen Größen Ort, Geschwindigkeit und Beschleunigung, $\vec{r}_i(t)$, $\dot{\vec{r}}_i(t)$ und $\ddot{\vec{r}}_i(t)$, ergeben sich als Lösung dieser *Bewegungsgleichungen*.

Neben den kinematischen Größen sind weitere wichtige Begriffe der Mechanik die *Kraft* \vec{F} , die *Masse* m eines Massenpunktes und sein Impuls \vec{p} . Der physikalische Begriff für die Kraft, welche eine vektorielle Größe ist, geht auf Isaac Newton zurück. Er definierte sie als Ursache für die Bewegung eines Körpers oder für die Änderung seines Bewegungszustandes. Ist ein Körper kräftefrei, so bleibt seine Bewegung unverändert.

2.1 Newtonsche Gesetze

Mit den 1687 in Newtons Werk *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica* formulierten *Newtonschen Gesetzen* wurden die Grundlagen der klassischen Mechanik geschaffen. Diese Gesetze werden im Folgenden in Erinnerung gerufen.

Lex Prima (Galileisches Trägheitsgesetz)

Ein Körper verharrt im Zustand der Ruhe oder der gleichförmig geradlinigen Translation, sofern er nicht durch einwirkende Kräfte zur Änderung seines Zustands gezwungen wird.

Dies definiert *Inertialsysteme*: In ihnen ruht ein kräftefreier Körper bzw. ein Massenpunkt oder bewegt sich geradlinig, gleichförmig.

Das heißt also, dass seine Geschwindigkeit \vec{v} in Betrag und Richtung konstant ist. Sein Bewegungszustand kann nur die Einwirkung einer äußeren Kraft verändert werden. Damit ergibt sich die Definition der (trägen) *Masse* zu: Jeder Massenpunkt setzt der Einwirkung von Kräften einen Trägheitswiderstand, seine Masse, entgegen. Der *Impuls* ist damit definiert

¹Der Punkt über einer Größe bezeichnet deren zeitliche Ableitung, also z.B. $\dot{\vec{r}}_i = d\vec{r}_i/dt$.

als

$$\vec{p} = m\vec{v}. \quad (2.1)$$

Lex Secunda (Bewegungsgesetz)

Die Änderung der Bewegung eines Körpers ist proportional zu der auf ihn wirkenden Kraft und geschieht in die Richtung, in welche die Kraft weist.

Es gilt also

$$\dot{\vec{p}} = \vec{F}. \quad (2.2)$$

Da meist die Masse m unveränderlich ist, ergibt sich mit

$$\dot{\vec{v}} = \frac{d}{dt}\vec{v} \equiv \vec{a} \quad (2.3)$$

die Gleichung

$$\vec{F} = m\vec{a}. \quad (2.4)$$

Der Körper wird also in die Richtung der Kraft beschleunigt, die auf ihn wirkt.

Lex Tertia (actio=reactio)

Übt ein Körper A auf einen anderen Körper B eine Kraft aus (actio), so wirkt von Körper B auf Körper A eine gleich große aber entgegen gerichtete Kraft (reactio).

Das bedeutet, dass Kräfte immer paarweise auftreten.

2.2 Kräfte

Wichtige Beispiele für Kräfte sind

Gravitationskraft: Die Gravitationskraft wirkt zwischen zwei Massen, hier im folgenden M und m genannt, und bewirkt deren Anziehung. Sie nimmt mit zunehmendem Abstand der Massen ab, besitzt aber unendliche Reichweite. Die von M auf m , siehe Fig. 2.1, ist gegeben durch

$$\vec{F}_2 = -\gamma \frac{Mm}{r^2} \hat{r} \quad (2.5)$$

mit dem normierten Richtungsvektor

$$\hat{r} = \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|}. \quad (2.6)$$

Es gilt $\vec{F}_2 = -\vec{F}_1$. Speziell auf der Erde ergibt sich mit Masse m_e und Radius r_e der Erde sowie der bekannten Gravitationskonstante² γ dann

$$F = mg, \quad (2.7)$$

wobei $g = 9.81 \text{ m/s}^2 \approx 10 \text{ m/s}^2$ die Erdbeschleunigung ist. Durch das Graviationsgesetz wird der Begriff der schweren Masse definiert, $m = m_{\text{schwer}}$, $M = M_{\text{schwer}}$. Die schwere und die

²Der Wert der Gravitationskonstante beträgt $\gamma = 6.674 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3 / (\text{kg s}^2)$.

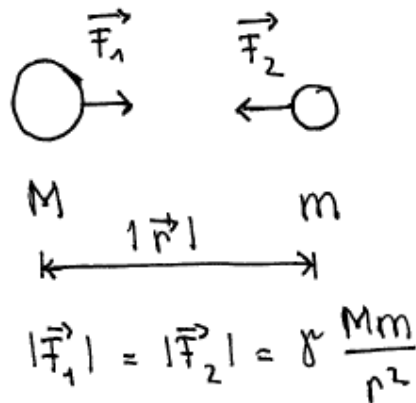


Abbildung 2.1: Die Gravitationskraft zwischen zwei Körpern.

träge Masse sind a priori unabhängig voneinander. Alle bisher durchgeführten Experimente bestätigen, dass die schwere Masse eines Körpers seiner trägen Masse entspricht. Dies ist das (schwache) Äquivalenzprinzip.

Coulombkraft Die Coulombkraft wirkt zwischen zwei Punktladungen oder kugelsymmetrisch verteilten elektrischen Ladungen, Q_1, Q_2 . Je nach Vorzeichen der Ladungen wirkt sie anziehend (siehe Gravitationskraft) oder abstoßend in Richtung der Verbindungsgeraden der beiden Ladungen bzw. Ladungsmittelpunkte. Im Vakuum ist sie gegeben durch

$$\vec{F} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_1 Q_2}{r^2} \hat{r}. \quad (2.8)$$

Bei $\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} \text{As/(Vm)}$ handelt es sich um die elektrische Feldkonstante.

Lorentzkraft Die Lorentzkraft wirkt auf eine bewegte Ladung in einem magnetischen oder elektrischen Feld. Sie ist gegeben durch

$$\vec{F} = e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}). \quad (2.9)$$

Bei e handelt es sich um die elektrische Ladung, \vec{E} die elektrische Feldstärke und \vec{B} die magnetische Flussdichte. Die magnetische Komponente der Kraft wirkt senkrecht zur Bewegung der Ladung und senkrecht zur Richtung des magnetischen Feldes.

Federkraft Die dem harmonischen Oszillator zugrunde liegende Kraft ist linear (proportional zur zunehmenden Auslenkung) und stets negativ, also

$$F = \alpha|x| < 0. \quad (2.10)$$

Bei x handelt es sich um die Auslenkung der Feder aus der Ruhelage und α bezeichnet die Federkonstante.

2.2.1 Konservative Kräfte

Konservative Kräfte verrichten längs eines geschlossenen Wegs keinerlei Arbeit. Die Energie bleibt erhalten. Beispiele für konservative Kräfte sind die Gravitationskraft, die Coulombkraft oder die Federkraft. Die von der Kraft längs des Weges von \vec{r}_1 nach \vec{r}_2 geleistete Arbeit

ist definiert als

$$W = \int_{\vec{r}_1}^{\vec{r}_2} F(\vec{r}') d\vec{r}' . \quad (2.11)$$

Somit ist also

$$dW = \vec{F} d\vec{r} . \quad (2.12)$$

Die kinetische Energie T eines Massenpunktes mit Masse m und Geschwindigkeit \vec{v} ist

$$T = \frac{1}{2} m \vec{v}^2 . \quad (2.13)$$

Die zeitliche Änderung der kinetischen Energie ist

$$\frac{d}{dt} T = m \vec{v} \dot{\vec{v}} = \vec{v} \vec{F} . \quad (2.14)$$

Es gilt

$$dT = \vec{F} \vec{v} dt = \vec{F} d\vec{r} = dW . \quad (2.15)$$

Es wird also Arbeit in kinetische Energie umgewandelt. Betrachten wir den Spezialfall, dass sich die Kraft aus dem negativen Gradienten einer potentiellen Energie $V(\vec{r})$ ergibt, also

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} V . \quad (2.16)$$

Damit gilt³

$$\oint \vec{F} d\vec{r} = 0 . \quad (2.17)$$

Die Arbeit ist also vom Integrationsweg unabhängig. Mit der Definition der Gesamtenergie

$$E \equiv T + V \quad (2.18)$$

ergibt sich

$$\frac{d}{dt} E = \frac{d}{dt} T + \frac{d}{dt} V = \vec{v} \vec{F} + (\vec{\nabla} V) \dot{\vec{r}} = \vec{v} \vec{F} - \vec{F} \dot{\vec{r}} = 0 . \quad (2.19)$$

Die Energie ist also erhalten.

2.3 Inertialsysteme, Nicht-Inertialsysteme

Bei einem *Inertialsystem* handelt es sich um ein Bezugssystem, in dem sich kräftefreie Körper geradlinig und gleichförmig bewegen. Es gilt hier also das Newtonsche Trägheitsgesetz in seiner einfachsten Form. Es gibt unendlich viele Inertialsysteme. Sie bewegen sich gegeneinander geradlinig und gleichförmig. Ihre räumliche und zeitliche Koordinaten hängen über

³Denn $\oint \vec{F} d\vec{r} = -\int_A^B \vec{\nabla} V d\vec{r} - \int_B^A \vec{\nabla} V d\vec{r} = -V(\vec{r}_B) + V(\vec{r}_A) - V(\vec{r}_A) + V(\vec{r}_B) = 0$.

eine *Galilei-Transformation* miteinander zusammen.

Galilei-Invarianz: Die Gesetze der Newtonschen Mechanik sind *invariant* (von gleicher mathematischer Form) unter einer Galilei-Transformation

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{v}_0 t \quad \text{und} \quad t' = t, \quad (2.20)$$

wenn sich die Systeme Σ und Σ' mit konstanter Geschwindigkeit \vec{v}_0 gegeneinander bewegen. Die zwei Systeme sind vollkommen gleichwertig. Da die Gesetze der Newtonschen Mechanik in allen Inertialsystemen die gleiche Form haben, gibt es kein bevorzugtes Bezugssystem und man kann daher die Geschwindigkeit nicht absolut messen. Dies ist das *Relativitätsprinzip* der Newtonschen Mechanik. Wir werden später im Rahmen der relativistischen Physik die Lorentz-Transformationen kennenlernen.

Beschleunigte Bezugssysteme sind Bezugssysteme, die kein Inertialsystem sind. Beispiele für solche Systeme sind rotierende Systeme. Es gibt in beschleunigten Bezugssystemen sogenannte Scheinkräfte. Die hängen vom Bezugssystem ab und verschwinden, wenn man in ein Inertialsystem übergeht. Beispiele sind die Coriolis-Kraft und die Zentrifugalkraft in rotierenden Systemen.

2.4 Weitere Themen

Weitere spezielle Themen im Rahmen der Newtonschen Mechanik sind z.B. Schwingungen, Untersuchungen des (gedämpften) harmonischen Oszillators; Eigenschwingungen in Systemen von Massenpunkten; Mechanik mehrerer Massenpunkte, starrer Körper, Bewegung von Schwerpunkt und Rotationsbewegung, Kreisel. Im Rahmen dieser Vorlesung werden diese und andere aufgrund Zeitmangels nicht behandelt.

Kapitel 3

Lagrangeformalismus

Joseph Louis Lagrange (siehe Fig. 3.1) hat, ausgehend vom Prinzip der kleinsten Wirkung, die klassische Newtonsche Mechanik in die Sprache der Variationsrechnung übersetzt. Es handelt sich um eine zu den Newtonschen Gesetzen äquivalente Formulierung der mechanischen Grundgesetze. Die Lagrangesche (und Hamiltonsche) Formulierung ermöglicht jedoch einen wesentlich tieferen Einblick in die dynamische und geometrische Struktur der Mechanik.

1788 eingeführt, ist der Lagrangeformalismus eine Formulierung der klassischen Mechanik, in der die Dynamik des Systems durch eine einzige skalare Funktion, die Lagrangefunktion, beschrieben wird. Mithilfe der Euler-Lagrange-Gleichungen lassen sich daraus die Bewegungsgleichungen bestimmen. Der Vorteil dieses Formalismus gegenüber der Newtonschen Mechanik ist, daß sich damit Probleme mit Zwangsbedingungen relativ einfach behandeln lassen – durch das explizite Ausrechnen der Zwangskräfte oder durch die geeignete Wahl generalisierter Koordinaten. Ein Beispiel für eine Zwangsbedingung ist die Bewegung von Körpern, die durch feste Verbindungsstangen zwischen diesen eingeschränkt ist.

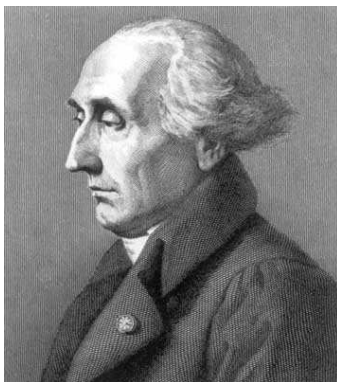


Abbildung 3.1: Joseph-Louis-Lagrange (* 25. Januar 1736 in Turin als Giuseppe Lodovico Lagrangia; † 10. April 1813 in Paris) war ein italienischer Mathematiker und Astronom. [Quelle:Wikipedia].

3.1 Lagrangegleichungen 1. Art

Wir betrachten Systeme, die aus N Massenpunkten mit Massen m_i ($i = 1, \dots, N$) bestehen. Falls sich diese in allen 3 Raumdimensionen frei von Einschränkungen bewegen können, so hat das System $3N$ Freiheitsgrade. Im folgenden betrachten wir Systeme, die Zwangsbedingungen unterworfen sind. Diese können beispielsweise dadurch gegeben sein, dass die Abstände der Massenpunkte konstant sind. Dies ist in einem starren Körper der Fall. Oder aber die Bewegung der Massenpunkte ist auf eine Fläche im Raum eingeschränkt z.B. durch Gleiten auf einem horizontalen Tisch. Ein anderes Beispiel ist das mathematische Pendel.

Holonome Zwangsbedingungen: Wir betrachten ein System von N Teilchen, deren Koordinaten durch $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$ gegeben sind. Falls sich für das System von N Teilchen die N_Z Zwangsbedingungen in der Form

$$A_\mu(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = 0 \quad , \quad \mu = 1, \dots, N_Z \quad (3.1)$$

schreiben lassen, so heißen diese *holonome Zwangsbedingungen*. Alle Zwangsbedingungen, die nicht von der Form (3.1) sind, heißen *nichtholonome* (Zwangsbedingungen in Form von Ungleichungen oder differentielle, nicht-integrierte Zwangsbedingungen).

Ein Beispiel für nichtholonome Zwangsbedingungen sind in einer Kugel vom Radius R eingeschlossene Gasmoleküle. Ihre Koordinaten unterliegen der Bedingung $r_i \leq R$.

Die Zwangsbedingungen lassen sich weiter bzgl. ihrer Zeitabhängigkeit unterscheiden.

Sie heißen *skleronom*, falls keine explizite Zeitabhängigkeit besteht, ansonsten *rheonom*.

Ein Beispiel für eine holonome und rheonome Zwangsbedingung ist gegeben, wenn sich ein Massenpunkt auf einer bewegten Raumkurve bewegt.

Die Anzahl der Freiheitsgrade f ist, falls die N_Z Gleichungen $A_\mu = 0$ unabhängig sind, gegeben durch

$$f = 3N - N_Z . \quad (3.2)$$

Im folgenden betrachten wir einige Beispiele:

- ▷ Alle Massenpunkte m_i ($i = 1, \dots, N$) können sich nur in einer Ebene bewegen. Die Zwangsbedingung lautet dann (\vec{p} Stützvektor der Ebene, \vec{h} Normalenvektor der Ebene)

$$\vec{h} \cdot (\vec{r}_i - \vec{p}) = 0 \quad \iff \quad \vec{h} \cdot \vec{r}_i - k = 0 \quad \text{mit} \quad \vec{h}, \vec{p}, k (\equiv \vec{h} \cdot \vec{p}) = \text{const.} \quad (3.3)$$

Damit ist $N_Z = N$ und $f = 2N$. Bei (3.3) handelt es sich um eine holonome skleronome Zwangsbedingung.

- ▷ Falls sich die Ebene zusätzlich mit der Geschwindigkeit \vec{v} bewegt, so ist die Zwangsbedingung durch

$$\vec{h} \cdot (\vec{r}_i - \vec{v}t) - k = 0 \quad (3.4)$$

gegeben. Hier ist ebenfalls $N_Z = N$ und $f = 2N$. Durch (3.4) ist eine holonome rheonome Zwangsbedingung gegeben.

▷ Für paarweise konstante Abstände der m_i ($i, j = 1, \dots, N$) haben wir

$$|\vec{r}_i - \vec{r}_j| = r_{ij} = \text{const.} . \quad (3.5)$$

Die Freiheitsgrade, die dann noch übrig bleiben, sind durch die Bewegungsmöglichkeiten des starren Körpers gegeben. Diese sind die Translation des Schwerpunktes und die Rotation des Systems als Ganzes um drei orthogonale Achsen. Die Anzahl der Freiheitsgrade ist also $f = 6$. Für 2 Massenpunkte, $N = 2$, ist $f = 5$. Gleichung (3.5) beschreibt eine holonome skleronome Zwangsbedingung.

Durch *Zwangskräfte* \vec{Z}_i kann der Einfluß der Zwangsbedingungen auf die Bewegung der Massenpunkte beschrieben werden. Solche Zwangskräfte sind z.B. Auflagekräfte, Lagerkräfte, Fadenspannungen usw. Diese Zwangskräfte wirken zusätzlich zu den eigentlichen Kräften \vec{F}_i auf die Massenpunkte. Die Newton'schen Bewegungsgleichungen lauten also

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = \vec{F}_i + \vec{Z}_i \quad , \quad i = 1, \dots, N . \quad (3.6)$$

Die Zwangskräfte hängen im allgemeinen selbst von der Bewegung ab und sind Funktionen von \vec{r}_i und $\dot{\vec{r}}_i$.

Im folgenden sehen wir, wie wir die Zwangsbedingungen in die Bewegungsgleichungen integrieren können. Betrachten wir den einfachen Fall der Bewegung eines einzigen Massenpunktes m unter der Zwangsbedingung

$$A(\vec{r}, t) = 0 . \quad (3.7)$$

Die Bewegung findet auf der durch $A = 0$ definierten Fläche statt. Diese kann auch zeitabhängig sein. Die Zwangsbedingung schränkt seine Bewegung innerhalb der Fläche nicht ein, noch beeinflusst sie sie. Damit hat die Zwangskraft keine Komponente tangential zur Fläche und muss vielmehr senkrecht auf der Fläche stehen, d.h.

$$\vec{Z}(\vec{r}, t) = \lambda(t) \cdot \vec{\nabla} A(\vec{r}, t) . \quad (3.8)$$

Der Gradient $\vec{\nabla} A$ zeigt in Richtung der Normalen der Fläche. Der Proportionalitätsfaktor $\lambda(t)$ muss noch bestimmt werden. Er hängt wegen der Zeitabhängigkeit von $A(\vec{r}, t)$ und der Abhängigkeit von der tatsächlichen Bewegung von der Zeit ab.

Bemerkung: Daß der Gradient $\vec{\nabla} A$ senkrecht auf der durch $A = 0$ definierten Fläche steht, sieht man folgendermaßen: Seien \vec{r} und $\vec{r} + d\vec{r}$ zwei infinitesimal benachbarte Punkte auf dieser Fläche, also

$$A(\vec{r}, t) = 0 \quad , \quad A(\vec{r} + d\vec{r}, t) = 0 . \quad (3.9)$$

Die Entwicklung der zweiten Gleichung um \vec{r} liefert

$$A(\vec{r} + d\vec{r}, t) = A(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} A \cdot d\vec{r} + \mathcal{O}((d\vec{r})^2) = 0 . \quad (3.10)$$

Hieraus folgt, daß $\vec{\nabla} A \cdot d\vec{r} = 0$. Da $d\vec{r}$ ein beliebiger infinitesimaler Vektor parallel zur Tangentialfläche im Punkt \vec{r} ist, steht also $\vec{\nabla} A$ senkrecht auf der Fläche.

Die Bewegung des Massenpunktes wird also durch folgendes Gleichungssystem beschrieben,

$$m \ddot{\vec{r}} = \vec{F} + \lambda \cdot \vec{\nabla} A(\vec{r}, t) \quad (3.11)$$

$$A(\vec{r}, t) = 0 . \quad (3.12)$$

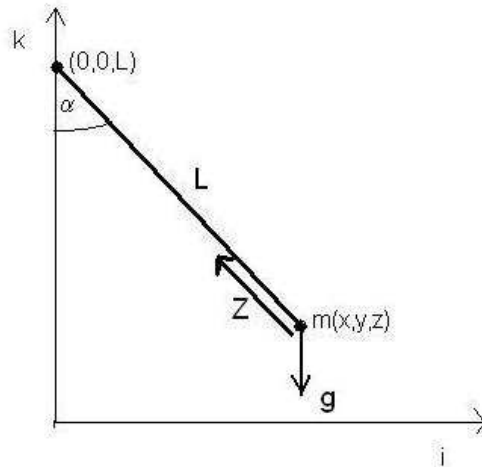


Abbildung 3.2: Das ebene Pendel. Auf die Masse m wirkt die Schwerkraft \vec{F} und die durch den Faden ausgeübte unbekannte Zwangskraft \vec{Z} .

Ebenes Pendel: Betrachten wir als Beispiel das ebene Pendel, siehe Fig. 3.2. Hier kann man sich nochmals klarmachen, daß die Zwangskraft von der tatsächlichen Bewegung abhängt. Denn sie muß zum einen die Komponente der Schwerkraft in Fadenrichtung kompensieren. Die Zwangsbedingung legt die Richtung der Zwangskraft fest. Das Pendel bewege sich in der x - z -Ebene (im Bild i - k -Ebene). Somit haben wir

$$A(\vec{r}, t) = x^2 + (L - z)^2 - L^2 = 0 \quad (3.13)$$

$$\vec{\nabla} A = 2 \begin{pmatrix} x \\ 0 \\ (z - L) \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Und die Bewegungsgleichungen mit Zwangsbedingung lauten also

$$m\ddot{x} = 2\lambda x \quad (3.15)$$

$$m\ddot{z} = -mg + 2\lambda(z - L) \quad (3.16)$$

$$x^2 + z^2 - 2Lz = 0. \quad (3.17)$$

Allgemeiner Fall: Betrachten wir den allgemeinen Fall mehrerer (d.h. N) Teilchen und mehrerer (d.h. N_Z) Zwangsbedingungen. Die $3N$ Bewegungsgleichungen und N_Z Zwangsbedingungen ergeben die *Lagrangegleichungen 1. Art*

Lagrangegleichungen 1. Art

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = \vec{F}_i + \sum_{\mu=1}^{N_Z} \lambda_{\mu}(t) \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} A_{\mu}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \quad i = 1, \dots, N \quad (3.18)$$

$$A_{\mu}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = 0 \quad \mu = 1, \dots, N_Z. \quad (3.19)$$

Bemerkung: Hier bedeutet $\partial/\partial \vec{r}_i \equiv \vec{\nabla}_i = (\partial/\partial x_i, \partial/\partial y_i, \partial/\partial z_i)^T$, also der Gradient, der auf das Teilchen i wirkt.

Damit wenigstens ein Freiheitsgrad vorhanden ist, ist die Zahl der Zwangsbedingungen begrenzt auf $N_Z \leq 3N - 1$.

3.2 Lagrangegleichungen 2. Art

Die bisher eingeführten Zwangskräfte sind lediglich Hilfsgrößen und im allgemeinen nicht von physikalischer Bedeutung. Es ist daher geschickt, sie von Anfang an zu vermeiden. Tut man dies, indem man sie als ersten Schritt zur Lösung der Lagrangegleichungen 1. Art eliminiert, so führt dies möglicherweise auf komplizierte Formulierungen. Ein besseres Verfahren ist, von vornherein die Koordinaten so zu wählen, dass sie den durch die holonomen Zwangsbedingungen definierten Unterraum parametrisieren. Solche Koordinaten werden *verallgemeinerte Koordinaten* genannt. Beim ebenen Pendel verwendet man statt der kartesischen Koordinaten, welche die Zwangsbedingung $x^2 + y^2 = L^2$ explizit berücksichtigen müssen, Polarkoordinaten (r, φ) . Konstanz der Pendellänge bedeutet eine konstante Koordinate r . Und die Bewegung des Pendels wird mit der Winkelkoordinate vollständig beschrieben. Im folgenden soll das Vorgehen zur Verwendung verallgemeinerter Koordinaten eingeführt werden.

3.2.1 Verallgemeinerte Koordinaten

Wir betrachten ein System von N Massenpunkten, die durch $3N$ Koordinaten \vec{r}_i ($i = 1, \dots, N$) beschrieben werden. Bei N_Z Zwangsbedingungen sind nur $f = 3N - N_Z$ Koordinaten voneinander unabhängig. (f ist die Anzahl der verbleibenden Freiheitsgrade.) Jede beliebige Wahl dieser f unabhängigen Koordinaten wird als *generalisierte* oder *verallgemeinerte Koordinaten* bezeichnet,

$$q = \{q_1, \dots, q_f\}, \quad f = 3N - N_Z. \quad (3.20)$$

Diese Wahl ist nicht eindeutig. Die Wahl wird aber durch Symmetrie-Gesichtspunkte und Anstreben größtmöglicher Einfachheit nahegelegt.¹ Die Orte der Teilchen sind durch die Wahl der q_k ($k = 1, \dots, f$) festgelegt,

$$\vec{r}_i = \vec{r}_i(q_1, \dots, q_f, t). \quad (3.21)$$

Die verallgemeinerten Koordinaten enthalten die Zwangsbedingungen implizit. Diese sind für beliebige q_k ($k = 1, \dots, f$) also automatisch erfüllt. D.h.

$$A_\mu(\vec{r}_1(q_1, \dots, q_f, t), \dots, \vec{r}_N(q_1, \dots, q_f, t)) = 0, \quad \mu = 1, \dots, N_Z. \quad (3.22)$$

Beispiel: Betrachten wir das ebene Pendel mit variabler Fadenlänge $L(t)$. Der einzige Freiheitsgrad ist der Winkel $\varphi(t)$. Die kartesischen Koordinaten ausgedrückt durch die verallgemeinerte Koordinate $\varphi(t)$ erfüllen die Zwangsbedingung automatisch, denn

$$x(t) = L(t) \sin \varphi(t) \quad (3.23)$$

$$y(t) = 0 \quad (3.24)$$

$$z(t) = -L(t) \cos \varphi(t) \quad (3.25)$$

¹Auch wenn keine Zwangsbedingungen vorliegen, ist die Benutzung generalisierter Koordinaten nützlich. Etwa beim Zentralkraftproblem, dessen Beschreibung durch (r, θ, φ) einfacher ist also durch (x, y, z) .

und

$$x^2 + z^2 = L(t)^2 . \quad (3.26)$$

Bemerkung: Auch Impulse und Energien etc. können als generalisierte Koordinaten verwendet werden.

3.2.2 Die Lagrangefunktion

Im folgenden soll die Lagrangefunktion hergeleitet werden. Dazu multiplizieren wir die Bewegungsgleichung (3.18) für m_i mit $\partial \vec{r}_i / \partial q_\alpha$ und summieren über i ,²

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i - \vec{F}_i - \sum_{\mu=1}^{N_Z} \lambda_\mu(t) \frac{\partial A_\mu}{\partial \vec{r}_i} = 0 \quad \left| \cdot \sum_i \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} \right. \quad \alpha = 1, \dots, f . \quad (3.27)$$

Aus $A_\mu(\{q_\alpha\}, t) \equiv 0$ folgt, daß

$$\frac{\partial A_\mu}{\partial q_\alpha} = 0 . \quad (3.28)$$

Nun hängt aber A_μ über die kartesischen Koordinaten $\vec{r}_i(\{q_\alpha\}, t)$ von q_α ab. Damit ist also

$$\frac{\partial A_\mu}{\partial q_\alpha} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial A_\mu}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} . \quad (3.29)$$

Und somit ist mit Glg. (3.28) auch

$$\sum_{i=1}^N \frac{\partial A_\mu}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} = 0 . \quad (3.30)$$

Damit fallen aus Glg. (3.27) die Zwangskräfte heraus,

$$\sum_{i=1}^N \left(m_i \ddot{\vec{r}}_i \cdot \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} - \vec{F}_i \cdot \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} \right) = 0 , \quad \alpha = 1, \dots, f . \quad (3.31)$$

Zur weiteren Umformung dieser f Gleichungen betrachten wir die totale Zeitableitung von \vec{r}_i ,

$$\dot{\vec{r}}_i = \frac{d \vec{r}_i}{dt} = \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial t} + \sum_{\beta} \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\beta} \dot{q}_\beta = \dot{\vec{r}}_i(\{q_\beta\}, t) . \quad (3.32)$$

Daraus folgt

$$\frac{\partial \dot{\vec{r}}_i}{\partial \dot{q}_\alpha} = \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} . \quad (3.33)$$

Dies verwenden wir im 1. Term der Bewegungsgleichungen (3.31),

$$\sum_i m_i \ddot{\vec{r}}_i \cdot \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} = \sum_i m_i \ddot{\vec{r}}_i \cdot \frac{\partial \dot{\vec{r}}_i}{\partial \dot{q}_\alpha} = \frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\alpha} \sum_i \frac{1}{2} m_i \dot{\vec{r}}_i^2 \right\} - \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \sum_i \frac{1}{2} m_i \dot{\vec{r}}_i^2 \quad (3.34)$$

$$= \frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\alpha} T \right\} - \frac{\partial}{\partial q_\alpha} T , \quad (3.35)$$

²Die Anführungszeichen in Glg. (3.27) sollen ausdrücken, dass erst multipliziert und dann summiert wird.

wobei

$$T = \frac{1}{2} \sum_i m_i \dot{\vec{r}}_i^2 \quad (3.36)$$

die kinetische Energie bezeichnet. In Glg. (3.34) wurde verwendet, daß

$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\alpha} \sum_i \frac{1}{2} m_i \dot{\vec{r}}_i^2 \right\} = \frac{d}{dt} \left\{ \sum_i m_i \dot{\vec{r}}_i \cdot \frac{\partial \dot{\vec{r}}_i}{\partial \dot{q}_\alpha} \right\} = \sum_i m_i \ddot{\vec{r}}_i \cdot \frac{\partial \dot{\vec{r}}_i}{\partial \dot{q}_\alpha} + \sum_i m_i \dot{\vec{r}}_i \cdot \frac{\partial \dot{\vec{r}}_i}{\partial q_\alpha}, \quad (3.37)$$

da

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \dot{\vec{r}}_i}{\partial \dot{q}_\alpha} = \frac{d}{dt} \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} = \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \frac{d \vec{r}_i}{dt} = \frac{\partial \dot{\vec{r}}_i}{\partial q_\alpha}. \quad (3.38)$$

Mit der potentiellen Energie V des Systems, ausgedrückt durch die verallgemeinerten Koordinaten $q \equiv \{q_\alpha\}$,

$$V(q, t) = V(\vec{r}_1(q, t), \dots, \vec{r}_N(q, t)), \quad (3.39)$$

erhalten wir für die Kraftterme

$$\sum_i \vec{F}_i \cdot \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} = \sum_i \left(-\frac{\partial V}{\partial \vec{r}_i} \right) \cdot \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha} = -\frac{\partial V}{\partial q_\alpha}(q, t). \quad (3.40)$$

Wir definieren als *verallgemeinerte Kräfte* Q_α

$$Q_\alpha = \sum_{i=1}^N \vec{F}_i \cdot \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial q_\alpha}, \quad \alpha = 1, \dots, f. \quad (3.41)$$

Unter Verwendung von Gln. (3.31), (3.34), (3.35) und (3.40) lassen sich somit die Bewegungsgleichungen kompakt schreiben als

Lagrangegleichungen 2. Art

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) = \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \quad \text{mit } \alpha = 1, \dots, f \quad \text{und} \quad (3.42)$$

$$L(q, \dot{q}, t) = T(q, \dot{q}, t) - V(q, t) \quad (3.43)$$

Hierbei bezeichnet L die Lagrangefunktion, die von den verallgemeinerten Koordinaten q und den Geschwindigkeiten \dot{q} sowie der Zeit t abhängt. Bei den Gleichungen (3.42) handelt es sich um die *Lagrangegleichungen 2. Art*. Sie sind die Bewegungsgleichungen eines Systems von Massenpunkten und der wichtigste Ausgangspunkt zur Lösung von Problemen in der Mechanik. Die Lagrangefunktion charakterisiert ein System eindeutig.

Bemerkungen:

- In den Lagrangegleichungen 2. Art sind die Zwangsbedingungen eliminiert. Sie treten nicht mehr auf.

- Durch die Gleichungen (3.42) ist ein System von α Differentialgleichungen 2. Ordnung gegeben. Zu dessen Lösung werden 2α Anfangsbedingungen benötigt.
- Die zentralen Begriffe sind hier Energie und Arbeit im Vergleich zu den zentralen Begriffen Impuls und Kraft der Newtonschen Mechanik.
- Die Lagrangegleichungen sind invariant unter Punkttransformationen:

$$(q_1, \dots, q_\alpha) \xleftrightarrow{\text{diffbar}} (\bar{q}_1, \dots, \bar{q}_\alpha) \quad (3.44)$$

mit

$$\bar{q}_1 = \bar{q}_1(q_1, \dots, q_\alpha, t) \quad , \quad \dots \quad , \quad \bar{q}_\alpha = \bar{q}_\alpha(q_1, \dots, q_\alpha, t) . \quad (3.45)$$

Damit hat man bei der Wahl der generalisierten Koordinaten gewisse Freiheiten. Dies kann zur Vereinfachung der Lösung des Problems genutzt werden, indem man beispielsweise Symmetrien ausnutzt.

Um die Bewegungsgleichungen eines Systems mit Zwangsbedingungen aufzustellen, geht man also wie folgt vor:

- 1) Wahl einer geeigneten Parametrisierung des f -dimensionalen Unterraums des $3N$ -dimensionalen Konfigurationsraums: $q = \{q_1, \dots, q_f\}$.
- 2) Bestimmung von T und V . Bestimmung von L .
- 3) Aufstellen der Lagrangegleichungen.

3.3 Erhaltungsgrößen

Erhaltungssätze bestimmen das qualitative Verhalten eines Systems und sind für die Lösung der Bewegungsgleichungen von großem Nutzen. Im Lagrangeformalismus sind Erhaltungsgrößen dadurch gegeben, daß die Lagrangefunktion $L(q, \dot{q}, t)$ von einem oder mehrerer ihrer Argumente nicht abhängt.

3.3.1 Energieerhaltung (“Homogenität der Zeit”)

Die Lagrangefunktion soll nicht explizit von der Zeit abhängen,

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0 . \quad (3.46)$$

Die totale Ableitung der Lagrangefunktion nach der Zeit ist damit unter Verwendung der Lagrangegleichungen 2. Art

$$\frac{d}{dt}L = \sum_{\alpha=1}^f \left\{ \underbrace{\frac{\partial L}{\partial q_\alpha}}_{\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}} \dot{q}_\alpha + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \ddot{q}_\alpha \right\} = \sum_{\alpha} \left\{ \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) \dot{q}_\alpha + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \ddot{q}_\alpha \right\} = \frac{d}{dt} \left\{ \sum_{\alpha} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \dot{q}_\alpha \right\} \quad (3.47)$$

Daraus ergibt sich der Erhaltungssatz

$$\frac{d}{dt}H = 0, \quad (3.48)$$

wobei die Erhaltungsgröße H definiert ist als

$$H = \left(\sum_{\alpha} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\alpha}} \dot{q}_{\alpha} \right) - L. \quad (3.49)$$

Bei H handelt es sich um die *Hamiltonfunktion*.

Hängen die Zwangsbedingungen nicht explizit von der Zeit ab, so ist die kinetische Energie quadratisch in den \dot{q}_{α} ,

$$T = \sum_{\alpha', \beta} m_{\alpha' \beta} \dot{q}_{\alpha'} \dot{q}_{\beta}, \quad (3.50)$$

wobei es sich bei den Koeffizienten $m_{\alpha' \beta}$ um den verallgemeinerten Massentensor handelt. Hängt ferner V nicht von den Geschwindigkeiten \dot{q}_{α} ab, so ist

$$\sum_{\alpha} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\alpha}} \dot{q}_{\alpha} = \sum_{\alpha', \beta} 2m_{\alpha' \beta} \dot{q}_{\alpha'} \dot{q}_{\beta} = 2T \quad (3.51)$$

und damit

$$H = 2T - L = T + V = E. \quad (3.52)$$

Damit ist die Hamiltonfunktion gleich der Energie des Systems.

3.3.2 Zyklische Koordinaten

Falls L unabhängig von einer verallgemeinerten Koordinate q_{β} ist, d.h.

$$\frac{\partial L}{\partial q_{\beta}} = 0, \quad (3.53)$$

dann nennt man q_{β} eine *zyklische Koordinate*. Aus den Bewegungsgleichungen folgt

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\beta}} = \frac{\partial L}{\partial q_{\beta}} = 0. \quad (3.54)$$

Damit ist

$$p_{\beta} \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{\beta}} = \text{zeitlich konstant}. \quad (3.55)$$

Bei p_{β} handelt es sich um den *verallgemeinerten Impuls*. Zyklische Koordinaten führen automatisch zu einem *Erhaltungssatz*. Um Problemstellungen zu erleichtern sollten also möglichst viele generalisierte Koordinaten zyklisch sein. Zeitlich konstante Koordinaten nennt man auch Konstanten der Bewegung.

Beispiele:

1) Freies Teilchen: Die Lagrangefunktion lautet

$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 \quad (3.56)$$

und ist unabhängig von \vec{r} . Damit ist der zugehörige verallgemeinerte Impuls

$$\vec{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}} = m\dot{\vec{r}} = \text{const.} . \quad (3.57)$$

Es liegt Impulserhaltung vor. Dies entspricht der Translationsinvarianz des Systems.

2) Massenpunkt auf einem Kreis in der x - y -Ebene. Die geeignete verallgemeinerte Koordinate ist gegeben durch $q = \varphi$, wobei φ der Winkel ist. Damit lautet die Lagrangefunktion

$$L = \frac{m}{2} r^2 \dot{\varphi}^2, \quad \text{wobei } r \text{ der Radius des Kreises ist.} \quad (3.58)$$

Sie hängt nicht von der verallgemeinerten Koordinate $q = \varphi$ ab. Der zugehörige verallgemeinerte Impuls ist

$$J_z = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = m r^2 \dot{\varphi} = \text{const.} . \quad (3.59)$$

Es liegt Drehimpulserhaltung vor. Damit verbunden ist die Isotropie des Raums.

3.4 Beispiel: Schwingende Hantel

Wir betrachten eine Hantel, die aus zwei Massenpunkten m_1 und m_2 besteht, die durch eine Stange der Länge l verbunden sind. Die Hantel schwingt in der x - y -Ebene unter Einfluss des Schwerfeldes, das in y -Richtung wirkt. Die Aufhängung der Hantel im Massenpunkt m_1 sei in x -Richtung frei beweglich, siehe Abb. 3.3. Wir haben 6 Freiheitsgrade für die zwei

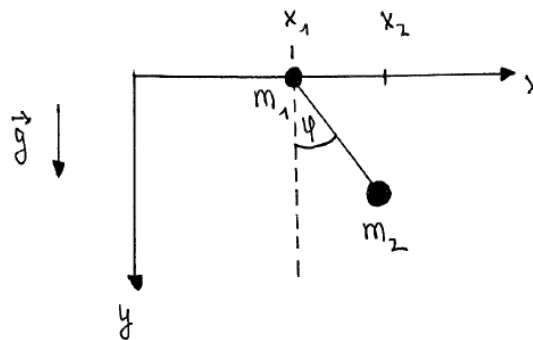


Abbildung 3.3: Bewegung einer Hantel im Schwerfeld mit Erdbeschleunigung \vec{g} .

Massenpunkte, die sich a priori in alle drei Raumrichtungen bewegen können. Sie unterliegen aber 4 holonomen skleronomen Zwangsbedingungen. Diese sind durch

$$z_1 = z_2 = 0, \quad y_1 = 0, \quad (x_1 - x_2)^2 + y_2^2 - l^2 = 0 \quad (3.60)$$

gegeben. Wir haben damit $\alpha = 6 - 4 = 2$ Freiheitsgrade. Als generalisierte Koordinaten bieten sich an

$$q_1 = x_1 \quad \text{und} \quad q_2 = \varphi . \quad (3.61)$$

Mit

$$x_1 = q_1 \quad (3.62)$$

$$x_2 = q_1 + l \sin q_2 \quad (3.63)$$

$$y_1 = z_1 = z_2 = 0 \quad (3.64)$$

$$y_2 = l \cos q_2 \quad (3.65)$$

sowie

$$\dot{x}_1 = \dot{q}_1 \quad (3.66)$$

$$\dot{x}_2 = \dot{q}_1 + l\dot{q}_2 \cos q_2 \quad (3.67)$$

$$\dot{y}_2 = -l\dot{q}_2 \sin q_2 \quad (3.68)$$

haben wir für die kinetische Energie T

$$T = \frac{1}{2}m_1\dot{x}_1^2 + \frac{1}{2}m_2(\dot{x}_2^2 + \dot{y}_2^2) \quad (3.69)$$

$$= \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\dot{q}_1^2 + \frac{1}{2}m_2(l^2\dot{q}_2^2 + 2l\dot{q}_1\dot{q}_2 \cos q_2) . \quad (3.70)$$

Die potentielle Energie ergibt sich zu

$$V = 0 - m_2gl \cos q_2 . \quad (3.71)$$

Die Lagrangefunktion lautet damit

$$L = T - V = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\dot{q}_1^2 + \frac{1}{2}m_2(l^2\dot{q}_2^2 + 2l\dot{q}_1\dot{q}_2 \cos q_2) + m_2gl \cos q_2 . \quad (3.72)$$

Die Lagrangefunktion hängt nicht von q_1 (nur von \dot{q}_1) ab! Bei q_1 handelt es sich um eine zyklische Koordinate. Der zugehörige verallgemeinerte Impuls lautet

$$p_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1} = (m_1 + m_2)\dot{q}_1 + m_2l\dot{q}_2 \cos q_2 = \text{const.} \equiv c' . \quad (3.73)$$

Für \dot{q}_1 finden wir damit ($c = c'/(m_1 + m_2)$)

$$\dot{q}_1 = c - \frac{m_2l}{m_1 + m_2}\dot{q}_2 \cos q_2 . \quad (3.74)$$

Und somit ($a \equiv \text{const.}$)

$$q_1(t) = ct - \frac{m_2l}{m_1 + m_2} \sin q_2(t) + a . \quad (3.75)$$

Mit den Anfangsbedingungen

$$q_1(t=0) = 0 \quad \text{und} \quad q_2(t=0) = 0 \quad (3.76)$$

sowie

$$\dot{q}_1(t=0) = -\frac{m_2l}{m_1 + m_2}\omega_0 \quad \text{und} \quad \dot{q}_2(t=0) = \omega_0 \quad (3.77)$$

finden wir

$$a = c = 0 \quad (3.78)$$

und somit also

$$q_1(t) = -\frac{m_2 l}{m_1 + m_2} \sin q_2(t) . \quad (3.79)$$

Und per Rücktransformation

$$x_1(t) = -\frac{m_2}{m_1 + m_2} l \sin \varphi(t) , \quad y_1(t) = z_1(t) = 0 , \quad (3.80)$$

$$x_2(t) = \frac{m_1}{m_1 + m_2} l \sin \varphi(t) , \quad y_2(t) = l \cos \varphi(t) , \quad z_2(t) = 0 . \quad (3.81)$$

Die Bahnkurve von m_2 ist eine Ellipse:

$$\frac{x_2^2}{\left(\frac{m_1 l}{m_1 + m_2}\right)^2} + \frac{y_2^2}{l^2} = 1 . \quad (3.82)$$

Der genaue zeitliche Verlauf ergibt sich aus der Lösung von $\varphi(t)$ bzw. $q_2(t)$. Mit

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_2} = m_2(l^2 \dot{q}_2 + l \dot{q}_1 \cos q_2) \quad (3.83)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_2} = m_2(l^2 \ddot{q}_2 + l \ddot{q}_1 \cos q_2 - l \dot{q}_1 \dot{q}_2 \sin q_2) \quad (3.84)$$

$$\frac{\partial L}{\partial q_2} = m_2(-l \dot{q}_1 \dot{q}_2 \sin q_2 - gl \sin q_2) . \quad (3.85)$$

ergibt sich aus den Lagrangegleichungen 2. Art

$$l^2 \ddot{q}_2 + l \ddot{q}_1 \cos q_2 + gl \sin q_2 = 0 . \quad (3.86)$$

Mit

$$\ddot{q}_1 = -\frac{m_2 l}{m_1 + m_2} (\ddot{q}_2 \cos q_2 - \dot{q}_2^2 \sin q_2) \quad (3.87)$$

ergibt sich dann

$$l^2 \ddot{q}_2 + l \cos q_2 \left(-\frac{m_2 l}{m_1 + m_2} (\ddot{q}_2 \cos q_2 - \dot{q}_2^2 \sin q_2) \right) + gl \sin q_2 = 0 . \quad (3.88)$$

Dies ist eine komplizierte Differentialgleichung. Sie ist für kleine φ lösbar:

$$\varphi(t) = \frac{\omega_0}{\omega} \sin \omega t , \quad (3.89)$$

mit

$$\omega = \sqrt{\frac{g}{l} \frac{m_1 + m_2}{m_1}} . \quad (3.90)$$

Kapitel 4

Variationsprinzipien in der Mechanik

Die Variationsrechnung beschäftigt sich mit der Lösung von Problemen, bei denen der Extremwert (Minimum oder Maximum) einer Größe gefunden werden soll, die als Integral über einen Funktionalausdruck darzustellen ist.

Die Vorteile der Verwendung von Variationsprinzipien sind mehr grundsätzlicher Natur. So lassen sich damit tiefe Grundstrukturen der Mechanik verstehen und für die Praxis nutzbar machen. Ein Beispiel, das später diskutiert wird, ist der Zusammenhang zwischen Symmetrien und Erhaltungssätzen.

Funktional: Bei der Variationsrechnung betrachtet man Funktionale. Während eine Funktion $y = y(x)$ jedem x -Wert eine Zahl (den y -Wert) zuordnet, wird bei einem Funktional jeder Funktion eine Zahl (der Wert des Funktionals) zugeordnet. Funktionale sind also Funktionen von Funktionen.

Beispiel: Es ist

$$J = J[y] = \int_1^2 ds = \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{1 + y'(x)^2} \quad (4.1)$$

das Funktional, das die Wegstrecke entlang der Kurve $y = y(x)$ zwischen den beiden Punkten $(x_1, y(x_1))$ und $(x_2, y(x_2))$ angibt. Es wird also durch das Funktional jeder Verbindungskurve $y(x)$ zwischen den beiden Punkten eine Zahl, die Weglänge, zugeordnet.

Bemerkung: Oben wurde das Wegelement $ds = \sqrt{dx^2 + dy^2}$ geschrieben als:

$$ds = \sqrt{1 + dy^2/dx^2} dx = \sqrt{1 + y'^2} dx, \quad \text{mit } y' \equiv dy/dx. \quad (4.2)$$

Beispiel: Gesucht ist die Brachystochrone, die schnellste Verbindung zweier Punkte durch eine Bahn, auf der ein Massenpunkt unter dem Einfluß der Gravitationskraft reibungsfrei gleitet, Fig. 4.1. Aus der Energieerhaltung folgt $mv^2/2 = mg(y_1 - y)$. Damit haben wir

$$J[y] = T = \int_1^2 \frac{ds}{v} = \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{\frac{1 + y'(x)^2}{2g(y_1 - y(x))}}. \quad (4.3)$$

4.1 Die Euler-Lagrange-Gleichung

Problemstellung: Gesucht ist die Funktion $y(x)$, deren Randwerte

$$y(x_1) = y_1, \quad y(x_2) = y_2 \quad (4.4)$$

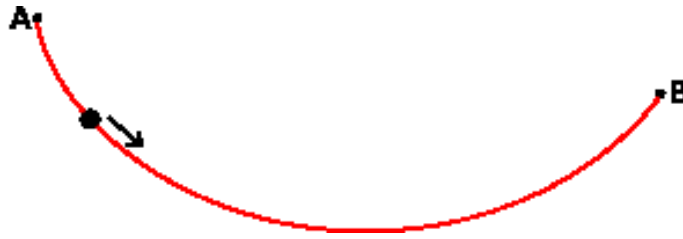


Abbildung 4.1: Brachystochrone

als gegeben vorausgesetzt werden, welche das Funktional

$$J = J[y] = \int_{x_1}^{x_2} dx F(y, y', x) \quad (4.5)$$

minimiert.

Sei $y_0(x)$ die gesuchte Funktion. Für jede infinitesimal davon abweichende Funktion $y(x) = y_0(x) + \delta y(x) = y_0(x) + \epsilon \eta(x)$, mit ϵ infinitesimal, $\eta(x_1) = \eta(x_2) = 0$ muss dann gelten

$$J[y_0 + \epsilon \eta(x)] > J[y_0] \quad , \quad \forall \eta(x) . \quad (4.6)$$

Daraus folgt

$$\frac{d}{d\epsilon} J[y_0 + \epsilon \eta(x)]|_{\epsilon=0} = 0 , \quad (4.7)$$

ganz analog zur Bedingung des Extremums einer Funktion $f(x)$ in $x = x_0$: $f'(x) = 0$ bei $x = x_0$. Aus der Bedingung $dJ/d\epsilon$ ergibt sich eine Differentialgleichung (DGL) für $\eta(x)$:

$$\frac{d}{d\epsilon} J[y_0(x) + \epsilon \eta(x)]|_{\epsilon=0} \stackrel{(4.5)}{=} \int_{x_1}^{x_2} dx \left[\frac{\partial F}{\partial y} \eta(x) + \frac{\partial F}{\partial y'} \eta'(x) \right] \stackrel{!}{=} 0 . \quad (4.8)$$

Daraus ergibt sich nach partieller Integration des 2. Terms¹

$$\int_{x_1}^{x_2} dx \frac{\partial F}{\partial y'} \eta'(x) = \underbrace{\left[\frac{\partial F}{\partial y'} \eta(x) \right]_{x_1}^{x_2}}_{=0} - \int_{x_1}^{x_2} dx \eta(x) \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) \quad (4.9)$$

schließlich

$$\frac{d}{d\epsilon} J[y_0(x) + \epsilon \eta(x)]|_{\epsilon=0} = \int_{x_1}^{x_2} dx \left[\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y'} \right) \right] \eta(x) \stackrel{!}{=} 0 . \quad (4.10)$$

Da das Integral für beliebiges $\eta(x)$ verschwinden soll, muss der Ausdruck in der Klammer null sein. Damit finden wir die Euler-Lagrange-Gleichung

Euler-Lagrange-Gleichung: $\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F(y, y', x)}{\partial y'} \right) = \frac{\partial F(y, y', x)}{\partial y} \quad (4.11)$

¹Zu Erinnerung: $\int f'g = fg - \int fg'$.

Dies ist eine DGL zweiter Ordnung für die gesuchte Funktion $y(x)$. Die Lösungen $y(x)$ dieser DGL sind *stationäre* Punkte von $J[y]$. Im Fall mehrerer Lösungen muss die zum Minimum gehörige Lösung gefunden werden.

Man nennt $\delta y(x) = \epsilon \eta(x)$ Variation von $y(x)$. Das Funktional J ist für das gesuchte $y(x)$ stationär, d.h. die Variation δJ von J verschwindet. In Kurznotation ist die Herleitung der Euler-Lagrange-Gleichung:

$$\delta J = J[y + \delta y] - J[y] = \int dx (F_y \delta y + F_{y'} \delta y') = \int_{x_1}^{x_2} dx \left(F_y - \frac{dF_{y'}}{dx} \right) \delta y = 0. \quad (4.12)$$

Da dies für beliebige δy gilt, folgt daraus

$$\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial F}{\partial y'} = 0 \quad (4.13)$$

und damit die Euler-Lagrange-Gleichung.

Beispiel: Es soll die kürzeste Verbindung zwischen zwei vorgegebenen Punkten gefunden werden. Dies ist die Funktion $y(x)$, für die (4.1) minimal wird. Mit

$$F = \sqrt{1 + y'(x)^2} \quad (4.14)$$

ergibt sich die Euler-Lagrange-Gleichung

$$\frac{d}{dx} \frac{y'(x)}{\sqrt{1 + y'(x)^2}} = 0, \quad (4.15)$$

welche nach Integration

$$y' = \text{const.}, \quad y = ax + b \quad (4.16)$$

liefert. Die Konstanten a, b sind durch die Randpunkte festgelegt. Die Gerade ist also die kürzeste Verbindung zwischen zwei Punkten.

Für mehrere Funktionen $y_i(x)$, also $F(y_1(x), \dots, y_n(x), y_1'(x), \dots, y_n'(x), x)$, ergibt sich die DGL 2. Grades

Euler-Lagrange-Gleichung: $\frac{\partial F}{\partial y_i} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial y_i'} \right) = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (4.17)$

4.2 Hamiltonsches Prinzip

Beim Hamiltonschen Prinzip handelt es sich um ein Variationsprinzip, dessen Euler-Lagrange-Gleichungen die Lagrangegleichungen der Mechanik sind. Es erlaubt, die Grundgesetze der Mechanik elegant zu formulieren und wird auch in anderen Gebieten der Physik angewandt.

Betrachten wir die Form der Lagrangegleichungen

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) = \frac{\partial L}{\partial q_\alpha}, \quad (4.18)$$

so legt sie nahe, sie als Euler-Lagrange-Gleichungen für das Stationaritätsprinzip

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}, t) = \text{stationär} \quad (4.19)$$

aufzufassen. Das *Wirkungsfunktional* S , kurz *Wirkung*, wird jeder Bahnkurve $q(t)$ zugeordnet. Im Argument der Lagrangefunktion L steht q für (q_1, \dots, q_f) und \dot{q} für $(\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f)$. Die Randbedingungen sind dabei, dass die Variation der Endpunkte festgehalten wird, d.h.

$$q_\alpha(t_1) = q_{1\alpha} \quad , \quad q_\alpha(t_2) = q_{2\alpha} \quad . \quad (4.20)$$

Man nennt

Hamiltonsches Prinzip: $\delta S[q] = 0$

Das *Hamiltonsche Prinzip* ist eine Bedingung an die gesuchte Bahnkurve $q(t)$ und äquivalent zu den Lagrangegleichungen 2. Art, also

$$\delta S[q] = 0 \quad \longleftrightarrow \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} = \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} \quad . \quad (4.21)$$

Meist wird S minimal, so dass man vom *Prinzip der kleinsten Wirkung* spricht.

Das Hamiltonsche Prinzip besagt, dass die Bewegung so abläuft, dass die Bahnkurve die Wirkung stationär macht.

Der Bewegungsablauf eines mechanischen Systems wird also folgendermaßen bestimmt:

- Auffinden der Lagrangefunktion L , gegeben durch $L = T - V$, und damit der Wirkung S .
- Betrachte alle Wege $q(t) = \{q_\alpha(t)\}$, die von den Anfangspunkten $q_{1\alpha}$ zur Zeit t_1 zu den Endpunkten $q_{2\alpha}$ zur Zeit t_2 führen. Finde die Wege $q_\alpha(t)$, die das Minimum (oder Extremum) von S ergeben. Falls $\bar{q}(t) \equiv \{\bar{q}_\alpha(t)\}$ der gesuchte Weg ist, so gilt

$$S[q(t)] \geq S[\bar{q}(t)] \quad (4.22)$$

für alle $q(t)$.

- Aus der Stationaritätsbedingung $\delta S = 0$ folgen die Lagrangegleichungen.

4.2.1 Bemerkungen

Das Hamiltonsche Prinzip wird meist nicht explizit angeschrieben, aber mit den Lagrangegleichungen implizit verwendet. Bei allgemeinen Betrachtungen wie etwa Symmetrien oder beim Aufstellen neuer Theorien ist es der geeignete Ausgangspunkt. Das Prinzip der kleinsten Wirkung ist die allgemeinste und kompakteste Formulierung der Mechanik:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \dot{q}, t) = 0 \quad . \quad (4.23)$$

Diese Formulierung ist völlig unabhängig von der Wahl der Koordinaten. Weiterhin vorteilhaft ist, dass sich die Form der Lagrangefunktion durch Symmetriebedingungen stark einschränken lässt. Betrachten wir als Beispiel die Lagrangefunktion eines freien Teilchens. Für sie muss gelten

1. Aufgrund der Homogenität der Zeit kann L nicht explizit von t abhängen.
2. Aufgrund der Homogenität des Raumes kann L nicht explizit von \vec{r} abhängen.
3. Ferner muss L isotrop sein und kann damit nicht von einem Vektor abhängen, der eine bestimmte Raumrichtung auszeichnet.

Damit kann L nur von $\dot{\vec{r}}^2$ abhängen. Die einfachste Möglichkeit ist

$$L = \text{const.} \dot{\vec{r}}^2 . \quad (4.24)$$

Dies liefert mit $\text{const.} = m/2$ die bekannte Form.

4.2.2 Unbestimmtheit der Lagrangefunktion

Es kann verschiedene Lagrangefunktionen geben, die zu denselben Bewegungsgleichungen führen. Sie sind zueinander gleichwertig. Da $\delta \int dt L = 0$ mit den Bewegungsgleichungen äquivalent ist, ist also eine vorgegebene Lagrangefunktion L gleichwertig zu $L^* = \text{const.} L$ oder zu $L^* = L + \text{const.}$.

Eichtransformationen führen zu einer Klasse von gleichwertigen Lagrangefunktionen. Diese Transformationen sind dadurch gegeben, dass zu L die totale Zeitableitung einer beliebigen Funktion $f(q, t)$ addiert wird. Die Funktion hängt nicht von \dot{q} ab. Wir haben also die Transformation

$$L(q, \dot{q}, t) \longrightarrow L^*(q, \dot{q}, t) = L(q, \dot{q}, t) + \frac{d}{dt} f(q, t) . \quad (4.25)$$

Die Lagrangefunktionen L und L^* führen zu denselben Bewegungsgleichungen, wie nun gezeigt wird. Das Wirkungsintegral zu L^* lautet

$$S^* = \int_{t_1}^{t_2} dt L^* = \int_{t_1}^{t_2} dt L + \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d}{dt} f(q, t) = \int_{t_1}^{t_2} dt L + \underbrace{f(q_2, t_2) - f(q_1, t_1)}_{\text{const.}} , \quad (4.26)$$

wobei $f(q_2, t_2) \equiv f(q_\alpha(t_2), t_2) = f(q_1(t_2), \dots, q_f(t_2), t_2)$ und analog $f(q_1, t_1) \equiv f(q_1(t_1), \dots, q_f(t_1), t_1)$. Bei der Variation von S werden die Bahnen $q(t)$ variiert, so dass

$$\delta S^* = \delta S + \sum_{\alpha=1}^f \left(\frac{\partial f}{\partial q_\alpha} \right)_{t_2} \delta q_\alpha(t_2) - \sum_{\alpha=1}^f \left(\frac{\partial f}{\partial q_\alpha} \right)_{t_1} \delta q_\alpha(t_1) = \delta S , \quad (4.27)$$

da die Variation an den Randwerten verschwindet. Damit ist also $\delta S^* = \delta S$, und somit sind die Bedingungen $\delta S^* = 0$ und $\delta S = 0$ identisch. Die Lagrangefunktionen L und L^* sind damit gleichwertig, da sie zu denselben Bewegungsgleichungen führen. Wir betrachten zwei Beispiele.

(i) *Galileitransformation:*

Die Transformation ist durch $\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \vec{v}$ ($\vec{v} = \text{const.}$) gegeben. Damit transformiert sich die Lagrangefunktion gemäß

$$L \rightarrow L + m\dot{\vec{r}}\vec{v} + \frac{m}{2}\vec{v}^2 = L + \frac{d}{dt}(m\vec{r} \cdot \vec{v} + \frac{m}{2}\vec{v}^2 t) . \quad (4.28)$$

Der Zusatzterm kann also als totale Zeitableitung geschrieben werden, so dass beide Lagrangefunktionen zu denselben Bewegungsgleichungen führen.

(ii) *Eichtransformation in der Elektrodynamik:*

Durch die Definitionen

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad , \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad (4.29)$$

sind die elektromagnetischen Potentiale \vec{A} und Φ nur bis auf eine Eichtransformation festgelegt. So sind \vec{E} und \vec{B} unter der Transformation

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda(\vec{r}, t) \quad , \quad \Phi \rightarrow \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (4.30)$$

mit beliebigem $\Lambda(\vec{r}, t)$ invariant. Unter dieser Transformation ändert sich L [$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 - Q\Phi + \frac{Q}{c} \dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}$] gemäß

$$L \rightarrow L + \frac{Q}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} + \frac{Q}{c} \vec{\nabla}\Lambda \cdot \dot{\vec{r}} = L + \frac{Q}{c} \frac{d\Lambda(\vec{r}, t)}{dt} \quad (4.31)$$

Der Zusatzterm ist also durch eine totale zeitliche Ableitung gegeben, und es folgt die Invarianz der Bewegungsgleichungen.

Kapitel 5

Hamiltonformalismus

In der Hamilton'schen Formulierung der Mechanik werden die verallgemeinerten Impulse als Bewegungsgrößen gleichwertig zu den verallgemeinerten Koordinaten betont. Anders formuliert führt der Hamiltonformalismus die DGL 2. Ordnung für die Koordinaten in eine doppelt so große Anzahl von DGL 1. Ordnung für die Koordinaten und Impulse über. Damit ist er der geeignete Ausgangspunkt für die Anknüpfung an die Quantenmechanik, die durch eine DGL 1. Ordnung für den Zustandsvektor beschrieben wird.

Der Hamiltonformalismus bietet zwar für die praktische Lösung von Problemen keine Vorteile gegenüber dem Lagrangeformalismus. Wie oben schon gesagt ist er aber der Ausgangspunkt für die Untersuchung der Relationen zwischen der Mechanik und der Quantenmechanik. Er ist damit von besonderem theoretischen Interesse. So werden einige der verwendeten Begriffe in anderen Bereichen der Theoretischen Physik vorausgesetzt. In der Quantenmechanik geht man bei der Aufstellung des Hamiltonoperators von der *Hamiltonfunktion* aus. In der Statistik wird der Begriff des *Phasenraumvolumens* benötigt. Diese Begriffe und die kanonischen Bewegungsgleichungen werden im folgenden eingeführt.

5.1 Kanonische Gleichungen

Gegeben sei die Lagrangefunktion $L(q, \dot{q}, t)$. Die verallgemeinerten Impulse p_i werden durch

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \quad i = 1, \dots, f, \quad (5.1)$$

definiert. Diese können dazu verwendet werden, die verallgemeinerten Geschwindigkeiten \dot{q}_i zu eliminieren, denn aus

$$p_i = \frac{\partial L(q, \dot{q}, t)}{\partial \dot{q}_i} \quad \text{folgt durch Auflösen} \quad \dot{q}_k = \dot{q}_k(q, p, t), \quad k = 1, \dots, f. \quad (5.2)$$

Wie gehabt verwenden wir in den Argumenten die Abkürzungen

$$q = (q_1, \dots, q_f), \quad \dot{q} = (\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f), \quad p = (p_1, \dots, p_f). \quad (5.3)$$

Betrachten wir das folgende Beispiel:

$$L = \frac{m}{2} \dot{q}^2, \quad p = m\dot{q}, \quad \dot{q} = \frac{p}{m}. \quad (5.4)$$

Wir definieren die *Hamiltonfunktion* H als

$$H(q, p, t) = \sum_{i=1}^f \dot{q}_i p_i - L = \sum_i \dot{q}_i(q, p, t) p_i - L(q, \dot{q}(q, p, t), t). \quad (5.5)$$

Die Hamiltonfunktion hat die Bedeutung der Energie des Systems. Die Lagrangefunktion ist eine Funktion von q, \dot{q}, t . Die Hamiltonfunktion hingegen ist eine Funktion von q, p, t . Aus dem vollständigen Differential der Lagrangefunktion

$$\begin{aligned} dL(q, \dot{q}, t) &= \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i \right) + \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \sum_i (\dot{p}_i dq_i + p_i d\dot{q}_i) + \frac{\partial L}{\partial t} dt, \end{aligned} \quad (5.6)$$

wobei

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad \text{und die Lagrangegleichung} \quad \frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{d}{dt} p_i = \dot{p}_i \quad (5.7)$$

benutzt wurde, folgt

$$\begin{aligned} dH &= d\left(\sum_{i=1}^f \dot{q}_i p_i - L\right) \\ &= \sum_i (\dot{q}_i dp_i + p_i d\dot{q}_i - \dot{p}_i dq_i - p_i d\dot{q}_i) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \sum_i (\dot{q}_i dp_i - \dot{p}_i dq_i) - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i \right) + \frac{\partial H}{\partial t} dt. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Durch Vergleichen findet man die *kanonischen* oder *Hamilton'schen Bewegungsgleichungen*

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad \text{mit } i = 1, 2, \dots, f \quad (5.9)$$

und

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \quad (5.10)$$

Es handelt sich um ein System von $2f$ DGL 1. Ordnung anstelle der f DGL 2. Ordnung im Lagrangeformalismus. Die Bewegung des Systems findet im Raum der p_i und q_i statt. Man nennt diesen Raum Phasenraum.

Beispiel: Teilchen der Masse m im Potential $V(\vec{r})$ in 3 Dimensionen:

$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r}), \quad \vec{p} = m\dot{\vec{r}} \quad (5.11)$$

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \rightsquigarrow \dot{\vec{p}} = -\nabla V(\vec{r}), \quad \dot{\vec{r}} = \frac{\vec{p}}{m}. \quad (5.12)$$

5.1.1 Vorgehen im Hamiltonformalismus

Wir geben hier das Rezept für die Lösung von Problemen im Hamiltonformalismus an:

1. Finde zunächst die generalisierten Koordinaten

$$\vec{q} = (q_1, \dots, q_f) . \quad (5.13)$$

2. Finde die Transformationen

$$\vec{r}_k = \vec{r}_k(q_1, \dots, q_f, t) \quad (5.14)$$

$$\dot{\vec{r}}_k = \dot{\vec{r}}_k(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) . \quad (5.15)$$

3. Drücke die in den Teilchenkoordinaten gegebene kinetische und potentielle Energie durch die generalisierten Koordinaten aus.

4. Bestimme die generalisierten Impulse gemäß

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \Rightarrow p_j = p_j(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) . \quad (5.16)$$

5. Löse (5.16) für \dot{q}_j ,

$$\dot{q}_j = \dot{q}_j(\vec{q}, \vec{p}, t) . \quad (5.17)$$

6. Ersetze dies in der Lagrangefunktion,

$$L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}(\vec{q}, \vec{p}, t), t) = \tilde{L}(\vec{q}, \vec{p}, t) . \quad (5.18)$$

7. Bestimme H mit Hilfe der Legendre-Transformation,

$$H(\vec{q}, \vec{p}, t) = \sum_{j=1}^f p_j \dot{q}_j(\vec{q}, \vec{p}, t) - \tilde{L}(\vec{q}, \vec{p}, t) . \quad (5.19)$$

8. Stelle die kanonischen Bewegungsgleichungen auf und löse sie.

Beispiel Fadenpendel: Wir betrachten ein Fadenpendel mit Masse m , das sich im Schwerfeld der Erde mit Erdbeschleunigung \vec{g} bewegt, siehe Fig. 5.1. Die Zwangsbedingungen sind durch

$$z = \text{const.} = 0 \quad \text{und} \quad x^2 + y^2 = l^2 = \text{const.} \quad (5.20)$$

gegeben. Damit haben wir $f = 3 - 2 = 1$ Freiheitsgrade. Wir wählen als generalisierte Koordinate $q = \varphi$. Damit haben wir

$$x = l \sin q , \quad \dot{x} = l \dot{q} \cos q \quad (5.21)$$

$$y = l \cos q , \quad \dot{y} = -l \dot{q} \sin q . \quad (5.22)$$

Für die kinetische und potentielle Energie und damit die Lagrangefunktion ergibt sich so ausgedrückt in der generalisierten Koordinate

$$T = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) = \frac{1}{2} m l^2 \dot{q}^2 \quad (5.23)$$

$$V = -mgy = -mgl \cos q \quad (5.24)$$

$$L = T - V = \frac{1}{2} m l^2 \dot{q}^2 + mgl \cos q . \quad (5.25)$$

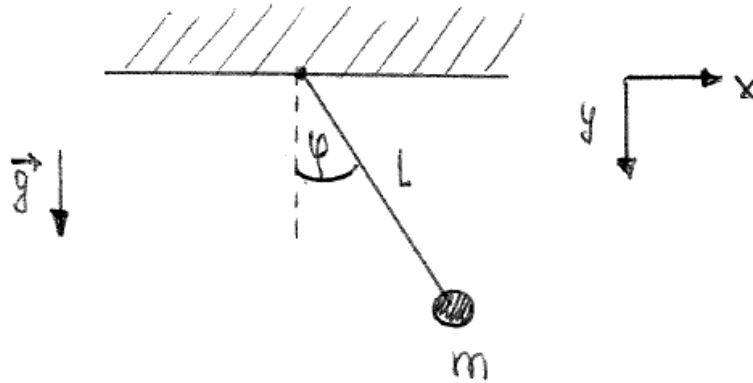


Abbildung 5.1: Fadenpendel.

Hieraus lässt sich der generalisierte Impuls berechnen,

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = ml^2 \dot{q} \quad \Rightarrow \quad \dot{q} = \frac{p}{ml^2} . \quad (5.26)$$

Und die Langrangefunktion \tilde{L} wird

$$\tilde{L}(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{p^2}{2ml^2} + mgl \cos q . \quad (5.27)$$

Mit Hilfe der Legendre-Transformation finden wir für die Hamiltonfunktion

$$\begin{aligned} H &= p\dot{q} - \tilde{L}(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{p^2}{ml^2} - \frac{p^2}{2ml^2} - mgl \cos q \\ &= \frac{p^2}{2ml^2} - mgl \cos q . \end{aligned} \quad (5.28)$$

Die kanonischen Bewegungsgleichungen ergeben sich zu

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{ml^2} \quad (5.29)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -mgl \sin q . \quad (5.30)$$

Hierbei handelt es sich um ein System von $2f = 2$ gekoppelten Differentialgleichungen 1. Ordnung. Durch Einsetzen finden wir 1 Differentialgleichung 2. Ordnung:

$$\ddot{q} = \frac{\dot{p}}{ml^2} = -\frac{g}{l} \sin q . \quad (5.31)$$

Dies ist die bekannte Differentialgleichung des Fadenpendels.

5.2 Poissonklammer

In diesem Abschnitt wird die *Poissonklammer* definiert. Sie ergibt einen Ausdruck für die Zeitableitung einer beliebigen physikalischen Größe und damit eine alternative Form der Bewegungsgleichungen. In der Quantenmechanik hat die Poissonklammer die direkte Entsprechung im *Kommutator* von Operatoren.

Eine physikalischen Größe in einem System, das durch die Koordinaten q_i und die Impulse p_i beschrieben wird, kann nur von diesen Variablen und der Zeit abhängen. Wir betrachten also zwei solche Größen $F(p, q, t)$ und $K(p, q, t)$ der verallgemeinerten Koordinaten und Impulse. Die *Poissonklammer* ist definiert durch

$$\{F, K\} \equiv \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial K}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial K}{\partial q_i} \right). \quad (5.32)$$

Sie wird durch geschweifte Klammern bezeichnet, die zwei Argumente einschließen, $\{, \}$. Zunächst werden einige Eigenschaften und spezielle Poissonklammern betrachtet. So folgt unmittelbar aus der Definition

$$(i) \quad \{F, K\} = -\{K, F\} \quad \text{und} \quad \{F, F\} = 0. \quad (5.33)$$

Da im Hamiltonformalismus die p_i, q_i und t unabhängige Variablen sind, gilt

$$\frac{\partial q_i}{\partial q_j} = \delta_{ij}, \quad \frac{\partial q_i}{\partial p_j} = 0, \quad \frac{\partial q_i}{\partial t} = 0, \quad (5.34)$$

$$\frac{\partial p_i}{\partial q_j} = 0, \quad \frac{\partial p_i}{\partial p_j} = \delta_{ij}, \quad \frac{\partial p_i}{\partial t} = 0. \quad (5.35)$$

Somit ergibt sich aus (5.32) für $K = q_j$ oder $K = p_j$

$$(ii) \quad \frac{\partial F}{\partial p_j} = -\{F, q_j\}, \quad \frac{\partial F}{\partial q_j} = \{F, p_j\}. \quad (5.36)$$

Und mit $F = q_i$ oder $F = p_i$ ergibt sich weiter

$$(iii) \quad \{q_i, q_j\} = 0, \quad \{p_i, p_j\} = 0, \quad \{p_i, q_j\} = -\delta_{ij}. \quad (5.37)$$

Weitere Eigenschaften sind

$$(iv) \quad \{F, c\} = 0, \quad c = \text{const.} \quad (5.38)$$

$$(v) \quad \{F_1 + F_2, K\} = \{F_1, K\} + \{F_2, K\} \quad (5.39)$$

$$(vi) \quad \frac{\partial}{\partial t} \{F, K\} = \left\{ \frac{\partial F}{\partial t}, K \right\} + \left\{ F, \frac{\partial K}{\partial t} \right\} \quad (5.40)$$

$$(vii) \quad \{F, \{K, J\}\} + \{K, \{J, F\}\} + \{J, \{F, K\}\} = 0 \quad \text{Jacobi-Identität.} \quad (5.41)$$

Es wird nun die Zeitabhängigkeit einer beliebigen physikalischen Größe $F(q, p, t)$ berechnet. Also

$$\frac{dF}{dt} = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial F}{\partial t} \quad (5.42)$$

$$= \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial F}{\partial t}, \quad (5.43)$$

wobei im letzten Schritt die kanonischen Gleichungen verwendet wurden. Damit erhalten wir

$$\frac{dF}{dt} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t} \quad (5.44)$$

Durch diese Gleichung wird die Zeitabhängigkeit einer beliebigen physikalischen Größe bestimmt. Man denke bei F z.B. an den Schwerpunktimпульs, den Drehimpuls oder die Energie des Systems. Mithilfe der Glg. (5.44) lässt sich die Frage nach Erhaltungsgrößen neu formulieren. Wenn eine physikalische Größe F nicht explizit von der Zeit abhängt, so ist sie gerade dann eine Erhaltungsgröße, wenn ihre Poissonklammer mit H verschwindet. Und für $F = H$ ergibt sich

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} . \quad (5.45)$$

Falls $\partial H/\partial t = 0$, so ist H eine Erhaltungsgröße. Schließlich folgen aus Glg. (5.44) die kanonischen Gleichungen in der Form

$$\dot{p}_i = \{p_i, H\} \quad , \quad \dot{q}_i = \{q_i, H\} . \quad (5.46)$$

5.3 Hamiltonsches Prinzip

In diesem Abschnitt wird das Hamiltonsche Prinzip für die Hamiltonfunktion formuliert. Es besagt, dass die Wirkung S für die tatsächliche Bewegung stationär ist. Es gilt also

$$\delta S[q] = \delta \int_{t_1}^{t_2} dt L \stackrel{(5.5)}{=} \delta \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\sum_{i=1}^f p_i \dot{q}_i - H(q, p, t) \right) = 0 . \quad (5.47)$$

Es gilt zunächst für $S = S[q]$, d.h. für die Variation der f Funktionen $q_i(t)$ bei festgehaltenen Randwerten. Wir betrachten nun S als Funktional der $2f$ unabhängigen Funktionen $q(t)$ und $p(t)$, also $S = S[q, p]$. Die Randwerte werden festgehalten, also

$$\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0 \quad , \quad \delta p(t_1) = \delta p(t_2) = 0 . \quad (5.48)$$

Damit haben wir für die Variation $S[q, p]$

$$\delta S[q, p] = \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{i=1}^f \left[\left(\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right) \delta p_i - \left(\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \delta q_i \right] . \quad (5.49)$$

Wir haben hier $p_i \delta \dot{q}_i$ durch partielle Integration umgeformt, denn

$$p_i \delta \dot{q}_i = (p_i \delta q_i) \Big|_{t_1}^{t_2} - \dot{p}_i \delta q_i = -\dot{p}_i \delta q_i , \quad (5.50)$$

wobei wir die Randbedingungen Glg. (5.48) verwendet haben. Aus (5.49) und den kanonischen Gleichungen folgt $\delta S[q, p] = 0$. Da andererseits δq_i und δp_i beliebig sind, folgen

umgekehrt die kanonischen Gleichungen aus $\delta S[q, p] = 0$. Somit können wir genauso wie im Lagrangeformalismus die Bewegungsgleichungen durch das Hamiltonsche Prinzip ersetzen:

$$\delta S = \delta S[q, p] = 0 \quad \text{Hamiltonsches Prinzip} \quad (5.51)$$

Gegenüber dem Hamiltonschen Prinzip, das wir bereits kennengelernt haben, ist es dadurch modifiziert, dass es nach anderen, doppelt so vielen, Größen variiert wird.

Da wir (5.48) haben, kann zum Integranden in (5.47) die totale Zeitableitung einer beliebigen Funktion $F(q, p, t)$ addiert werden, ohne dass sich die Aussage ändert. So lässt also die Transformation

$$\sum_{i=1}^f p_i \dot{q}_i - H \rightarrow \sum_{i=1}^f p_i \dot{q}_i - H + \frac{d}{dt} F(q, p, t) \quad (5.52)$$

die kanonischen Gleichungen invariant.

5.4 Zustand eines Systems

Wir stellen die Frage: Welche Informationen sind notwendig, um ein System vollständig zu beschreiben? Die unterschiedlichen Räume zur Beschreibung eines Systems sollen am Beispiel des einfachen harmonischen Oszillators betrachtet werden.

Konfigurationsraum: Der Konfigurationsraum wird durch die generalisierten Koordinaten beschrieben, also

$$\vec{q} = (q_1, \dots, q_f) . \quad (5.53)$$

Er ist f -dimensional. Die Bahn des harmonischen Oszillators im Konfigurationsraum ist eine Bahn zwischen den Anfangs- und Endpunkten der Bewegung, die durch die Amplitude gegeben sind, siehe Abb. 5.2 (a). Es gibt hier aber keinerlei zeitliche Information.

Ereignisraum: Hier wird auch die Zeit mit angegeben, d.h. wir haben

$$\vec{q} = (q_1, \dots, q_f) \quad \text{und} \quad t . \quad (5.54)$$

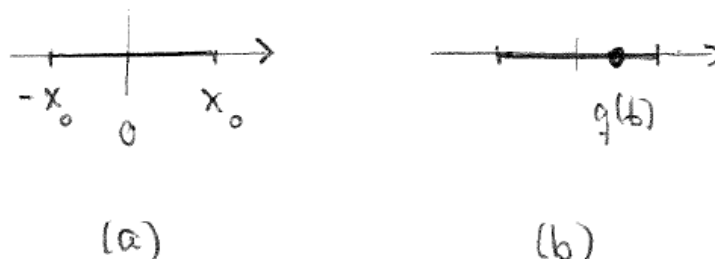


Abbildung 5.2: Bewegung des harmonischen Oszillators im Konfigurationsraum (a) und im Ereignisraum (b).

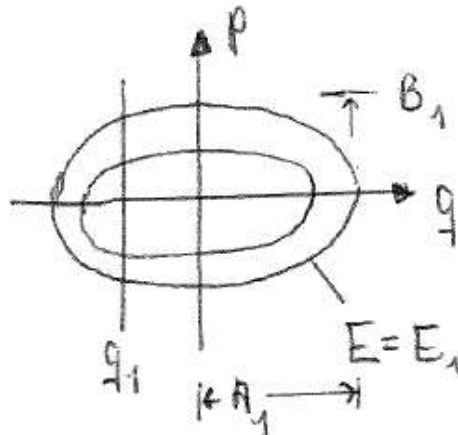


Abbildung 5.3: Bewegung des harmonischen Oszillators im Phasenraum.

Der Raum ist $(f + 1)$ -dimensional. Die Bahn (\vec{q}, t) wird im Lagrangeformalismus aus $2f$ Anfangsbedingungen bestimmt. Durch den Konfigurationsraum wird nur die aktuelle Konfiguration bzw. der aktuelle Zustand beschrieben, siehe Abb. 5.2 (b). Er bildet nicht den Impuls der einzelnen Elemente ab. Daher kann die weitere Bewegung der einzelnen Elemente nicht abgeleitet werden.

Phasenraum: Der Phasenraum besteht aus den verallgemeinerten Koordinaten und Impulsen, d.h.

$$\vec{q} = (q_1, \dots, q_f) \quad \text{und} \quad \vec{p} = (p_1, \dots, p_f). \quad (5.55)$$

Er ist $2f$ -dimensional. Der Phasenraum beschreibt die Menge aller möglichen Zustände eines physikalischen Systems. Dabei entspricht jeder Zustand des Systems einem Punkt im Phasenraum.

Die Bahnen des harmonischen Oszillators sind im Phasenraum Ellipsen, denn mit $E = T + V$ ist

$$\begin{aligned} \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 &= E \\ \Leftrightarrow \frac{p^2}{2mE} + \frac{q^2}{2E/(m\omega^2)} &= 1. \end{aligned} \quad (5.56)$$

Die Halbachsen sind

$$A = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \quad \text{und} \quad B = \sqrt{2mE}. \quad (5.57)$$

Bei fester Energie haben wir eine Ellipse. Wir sehen (siehe Abb. 5.3), ein Punkt q_1 im Konfigurationsraum reicht nicht aus, um das System vollständig zu beschreiben. Wir müssen auch Information über die Impulse geben. Dies führt zum Phasenraum.

Zustandsraum: Der Zustandsraum erweitert den Phasenraum um die Zeit, d.h.

$$\vec{q} = (q_1, \dots, q_f), \quad \vec{p} = (p_1, \dots, p_f) \quad \text{und} \quad t. \quad (5.58)$$

Er ist $(2f + 1)$ -dimensional. Er ist in der Mechanik der Darstellungsraum mit der größten Information und legt das System fest. Der Konfigurationsraum, der Ereignisraum und der Phasenraum sind Projektionen des Zustandsraumes und enthalten damit weniger Information. Punkte im Zustandsraum $\vec{\Pi}(t)$ werden im Hamiltonformalismus durch DGLs 1. Ordnung beschrieben. Somit erhalten wir aus $\vec{\Pi}(t_0)$ unter Kenntnis von $H \vec{\Pi}(t \neq t_0)$.

Der Zustand ψ : Darunter versteht man die Gesamtheit aller Informationen, die zur vollständigen Beschreibung der momentanen Eigenschaften des Systems erforderlich sind. In der Mechanik wird jede Eigenschaft der Massenpunkte durch eine Funktion im Phasenraum $f(\vec{q}, \vec{p}) = f(\vec{\Pi})$ beschrieben. Der Zustand ψ entspricht also einem Punkt $\vec{\Pi}$ im Phasenraum. Die Menge der möglichen Zustände bildet den Zustandsraum oder Phasenraum des betrachteten physikalischen Systems.

Wenn aus der Kenntnis des Anfangszustandes $\psi_0 \equiv \psi(t_0)$ der Zustand $\psi(t)$ zum Zeitpunkt t festgelegt werden kann, dann wird die Bewegung durch eine DGL 1. Ordnung beschrieben, also hier

$$\dot{\psi}(t) = \tilde{f}(\psi(t)) . \tag{5.59}$$

Die Hamiltonschen kanonischen Gleichungen sind DGLs 1. Ordnung in der Zeit. Damit spielt also die Hamiltonfunktion eine fundamentale Rolle.

Kapitel 6

Spezielle Relativitätstheorie

Literatur, z.B.:

- L.D. Landau, Ju.B. Rumer, *Was ist die Relativitätstheorie*, Teubner, Leipzig, 1985
- H. Melcher, *Relativitätstheorie in elementarer Darstellung mit Aufgaben und Lösungen*, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1984
- A. Einstein, *Über spezielle und allgemeine Relativitätstheorie*, Akademie Verlag, Berlin, 1969
- Walter Greiner, *Spezielle Relativitätstheorie*, Verlag Harri Deutsch, 1992
- E.F. Taylor, J.A. Wheeler, *Spacetime Physics*, W.H. Freeman & Co Ltd, 1992

Im Namen *spezielle Relativitätstheorie* (SRT) tritt der Begriff 'Relativität' auf. Dieser geht auf den Begriff *Relativitätsprinzip* zurück. Dieses besagt, dass die physikalischen Gesetze für alle Beobachter dieselbe Form haben. Die Invarianz oder auch Kovarianz der physikalischen Gesetze gilt im Rahmen der klassischen Physik und in der 1905 von Albert Einstein aufgestellten SRT zunächst nur in *Inertialsystemen*, also Systemen, die sich relativ zueinander gleichförmig geradlinig bewegen. Einstein erweiterte dieses Prinzip durch die Forderung, dass in allen, also auch beschleunigten Bezugssystemen, die Gesetze dieselbe Form annehmen müssen. Diese allgemeine Kovarianz wird im Rahmen der *allgemeinen Relativitätstheorie* (ART) formuliert.

Ein wichtiges Kriterium ist die Geschwindigkeit v der beteiligten Systeme. So gilt bei $v \ll c$, wobei c die Lichtgeschwindigkeit bezeichnet, die klassische Mechanik, während bei $v \lesssim c$ die SRT anzuwenden ist. Dabei ist zu beachten, dass die Relativitätstheorie bei kleinen Geschwindigkeiten mit der klassischen Physik übereinstimmt, letztere also ein Spezialfall ersterer ist. Die Theorie ist also so konstruiert, dass die Newtonsche Mechanik als Grenzfall $v \ll c$ enthalten ist.

Der klassischen Physik folgend gibt es Bezugssysteme, die anderen 'überlegen' sind, da in ihnen keine Scheinkräfte wirken. Deshalb wurde in der klassischen Newtonschen Mechanik lange Zeit die Existenz eines *absoluten Raums* vorausgesetzt. Das Relativitätsgesetz besagt dann, dass in Inertialsystemen die gleichen Gesetze der Mechanik gelten wie im absoluten Raum selbst. Ebenso spricht in der klassischen Physik nichts gegen eine *absolute Zeit*. Konkret heißt das, dass in Inertialsystemen (gleichförmig geradlinig zueinander bewegten Systemen) Newtons Gesetz $\vec{F} = m\vec{\ddot{r}}$ gilt und zwar ohne die Hinzunahme von Scheinkräften.

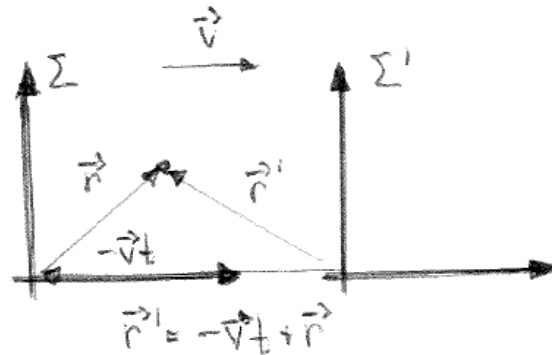


Abbildung 6.1: Zwei Inertialsysteme Σ und Σ' , die sich relativ zueinander mit \vec{v} bewegen.

Betrachten wir dies näher: Unser Ausgangspunktinertialsystem sei Σ . Wir betrachten ein System Σ' , das sich geradlinig gleichförmig mit der Geschwindigkeit \vec{v} relativ zu Σ bewegt. Gemäß dem Relativitätsprinzip ist dies ein Inertialsystem, in dem die gleichen physikalischen Gesetze, insbesondere Newtons Gesetz, gelten. Sei \vec{r} die Position eines Massenpunktes der Masse m in Σ . Dann ist, siehe Abb. 6.1, die Position in Σ'

$$\vec{r}' = \vec{r} - \vec{v}t \quad \text{bzw.} \quad \vec{r} = \vec{r}' + \vec{v}t. \quad (6.1)$$

Damit haben wir

$$\dot{\vec{r}} = \dot{\vec{r}}' + \vec{v} \quad \text{und} \quad \ddot{\vec{r}} = \ddot{\vec{r}}'. \quad (6.2)$$

Somit finden wir

$$\vec{F} = m\ddot{\vec{r}} = m\ddot{\vec{r}}' = \vec{F}'. \quad (6.3)$$

Formal besteht also kein Unterschied zwischen Σ und Σ' . Implizit haben wir hierbei $t = t'$ angenommen. Die physikalischen Gesetze behalten also ihre Gültigkeit unter der *Galilei-Transformation*. Diese lautet für $\vec{v} \parallel \hat{z}$.

$$x = x', \quad y = y', \quad z = z' + vt, \quad t' = t. \quad (6.4)$$

Betrachten wir die Konsequenzen für Lichtwellen, die sich in einem System Σ sphärisch ausbreiten. Wir haben

$$\Sigma: \quad \dot{\vec{r}} = c\hat{r}, \quad \text{mit} \quad \hat{r} = \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|} \quad (6.5)$$

$$\Sigma': \quad \text{per Galilei} \quad \dot{\vec{r}}' = c\hat{r} - \vec{v}. \quad (6.6)$$

Damit haben wir in Σ' keine sphärischen Wellen mehr! Durch die Galilei-Transformation wäre somit die Lichtgeschwindigkeit vom Bezugssystem abhängig. Und somit wären dann also auch die Maxwell-Gleichungen nur in einem einzigen Bezugssystem gültig. Es müsste dann durch Messung der Lichtgeschwindigkeit möglich sein, die Geschwindigkeit relativ zu diesem System zu bestimmen. Es herrschte im 19. Jahrhundert, vor dem Aufstellen der SRT durch Einstein, die Vorstellung, dass es einen ruhenden Äther gäbe, der das Übertragungsmedium für das Licht ist. Das Inertialsystem, in dem der Äther ruht, wurde mit dem *absoluten Raum* Newtons identifiziert. In diesem ruhenden Äther breitet sich das Licht sphärisch aus. Wenn es also solch einen absoluten Raum gibt, muss es möglich sein, den Bewegungszustand der Erde relativ zum Äther nachzuweisen. Die sollte mit dem *Michelson-Morley Experiment* möglich sein.

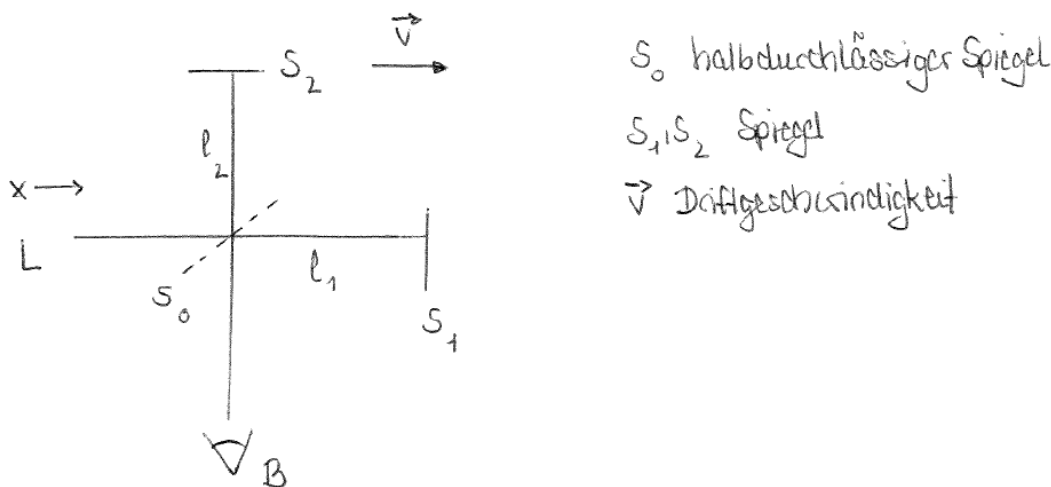


Abbildung 6.2: Das Michelson-Morley Interferometer.

6.1 Das Michelson-Morley Experiment

Da sich das Licht im gesamten Universum ausbreitet, sollte der Äther ebenfalls den gesamten Raum einnehmen, es also einen *Weltäther* geben. Die Erde driftet mit einer Geschwindigkeit von 30 km/s um die Sonne und somit also, wenn es den absoluten Weltäther gibt, durch diesen. Unter dieser Annahme, stellen sich die Fragen:

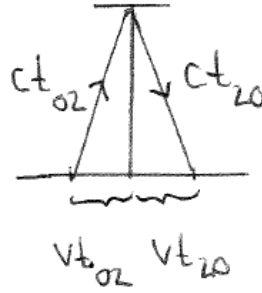
- Breitet sich das Licht zu unterschiedlichen Jahreszeiten unterschiedlich aus?
- Kann man die Geschwindigkeit der Erde relativ zum Äther bzw. des Äthers relativ zur Sonne ermitteln?

Die sollte mit dem Michelson-Morley Interferometer mit zwei zueinander senkrecht stehenden Armen möglich sein. Die Idee dabei ist, dass die Geschwindigkeit des Lichts in zwei verschiedenen Richtungen gemessen wird, einmal in Bewegungsrichtung der Erde und einmal senkrecht dazu. Der Aufbau des Experiments ist in Fig. 6.2 dargestellt. Das von einer Lichtquelle L kommende Licht wird durch einen halbdurchlässigen Spiegel S_0 in zwei Anteile aufgespalten. Ein Anteil läuft zum Spiegel S_1 , wird dort reflektiert und gelangt über den halbdurchlässigen Spiegel zum Beobachter B . Der andere Anteil läuft zum Spiegel S_2 , wird dort reflektiert und gelangt dann ebenfalls zum Beobachter. Die beiden dort ankommenden Lichtanteile interferieren bei B . Abhängig von den vermuteten unterschiedlichen Laufzeiten des Lichts ergibt sich dann eine bestimmte Anordnung der Interferenzstreifen. Wird die Apparatur um 90° gedreht, dann ändern sich die Lichtlaufzeiten relativ zum vermuteten Äther und damit auch die Lage der Interferenzstreifen. Dies soll im Folgenden quantifiziert werden. Es seien l_1 und l_2 jeweils die Abstände zwischen S_0 und S_1 bzw. S_0 und S_2 . Mit \vec{v} sei die Driftgeschwindigkeit bezeichnet. Die beiden möglichen Lichtwege sind:

$$S_0 - S_1 - S_0 - B \quad \text{und} \quad S_0 - S_2 - S_0 - B .$$

Konstruktive Interferenz findet statt, falls für die Wegdifferenz δS gilt

$$\delta S = m \cdot \lambda \quad \text{mit} \quad m \in \mathbb{Z} , \tag{6.7}$$

Abbildung 6.3: Der Weg $S_0 - S_2 - S_0$.

wobei λ die Wellenlänge des Lichts bezeichnet. Wir nehmen die Position des im Äther ruhenden Beobachters ein. Läuft das Licht in Richtung der Driftgeschwindigkeit ($S_0 \rightarrow S_1$) dann vergrößert sich seine Laufzeit t_{01} , läuft es gegen die Driftgeschwindigkeit ($S_1 \rightarrow S_0$), so verringert sich seine Laufzeit t_{10} . Wir erhalten

$$S_0 \rightarrow S_1 : \quad t_{01} = \frac{l_1}{c - v} , \quad (6.8)$$

$$S_1 \rightarrow S_0 : \quad t_{10} = \frac{l_1}{c + v} . \quad (6.9)$$

Somit ergibt sich für die Gesamtlaufzeit T_1 des Weges

$$S_0 - S_1 - S_0 : \quad T_1 = \frac{l_1}{c - v} + \frac{l_1}{c + v} = 2 \frac{l_1}{c} \frac{1}{1 - \frac{v^2}{c^2}} . \quad (6.10)$$

Der Weg $S_0 - S_2 - S_0$ wird senkrecht zur Driftgeschwindigkeit durchlaufen, siehe Fig. 6.3. Wir erhalten

$$S_0 \rightarrow S_2 : \quad c^2 t_{02}^2 = l_2^2 + v^2 t_{02}^2 , \quad (6.11)$$

$$S_2 \rightarrow S_0 : \quad c^2 t_{20}^2 = l_2^2 + v^2 t_{20}^2 \quad (6.12)$$

und damit die Gesamtlaufzeit T_2 des zweiten Weges

$$S_0 - S_2 - S_0 : \quad T_2 = t_{02} + t_{20} = \frac{2l_2}{c} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} . \quad (6.13)$$

Aus dem Laufzeitunterschied der beiden Teilstrahlen ergibt sich für ihre optische Wegdifferenz

$$\delta = c(T_2 - T_1) = 2 \left(\frac{l_2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - \frac{l_1}{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right) . \quad (6.14)$$

Wird nun die Apparatur um 90° gedreht, so vertauschen sich die Rollen von l_1 und l_2 . Damit ergibt sich die optische Wegdifferenz

$$\delta' = c(T_2' - T_1') = 2 \left(\frac{l_2}{1 - \frac{v^2}{c^2}} - \frac{l_1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \right) . \quad (6.15)$$

Die Frage ist nun: Wie muss der Apparat verstellt werden, nachdem er gedreht wurde, um eine Verschiebung um z.B. ein Interferenzmaximum zu erreichen? Wir haben

$$S \equiv \delta' - \delta = 2(l_1 + l_2) \left(\frac{1}{1 - \frac{v^2}{c^2}} - \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \right) \quad (6.16)$$

$$\approx 2(l_1 + l_2) \left(1 + \frac{v^2}{c^2} + \dots - 1 - \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2} + \dots \right) \quad (6.17)$$

$$\Rightarrow S = (l_1 + l_2) \frac{v^2}{c^2}. \quad (6.18)$$

Mit einer angenommenen Äthergeschwindigkeit von $v = 30 \text{ km/s}$, $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ und der Wellenlänge für sichtbares Licht $\lambda = 500 \text{ nm} = 5 \cdot 10^{-7} \text{ m}$ ergibt sich, dass

$$l_1 + l_2 \approx 50 \text{ m} \quad (6.19)$$

betragen muss, um die Verschiebung um ein Interferenzmaximum zu erreichen. Die Länge bei der Apparatur von Michelson-Morley betrug etwa 10 m. Sie ließen den Strahl mehrfach reflektieren. Somit wäre das Experiment also durchaus sensitiv gewesen. Jedoch wurde keine Interferenzverschiebung beobachtet!

Aus der Tatsache, dass keine Intefferenzverschiebung beobachtet wird, ergeben sich die Folgerungen

- Die Lichtgeschwindigkeit ist überall gleich!
- Es gibt keine absolute Zeit und keinen absoluten Raum.
- Wenn es weiterhin Interferenzsysteme geben soll (ja, jetzt erst recht), so muss die Galilei-Transformation falsch sein.
- Ohne unendliche Geschwindigkeiten des Informationsaustausches ist der Begriff der *Gleichzeitigkeit* an die Synchronisation mittels Licht geknüpft. Dies ist für ein ruhendes System klar. Man kann sich etwa eine Person vorstellen, die in jeder Hand eine Lampe hält und diese in genau gleichen Zeitintervallen aufblitzen lässt. Die Blitze entstehen in der gleichen Entfernung von ihr und treffen daher gleichzeitig bei ihr ein. Für einen Beobachter, gegen den sich die Person relativ mit konstanter Geschwindigkeit bewegt, ist der Begriff der Gleichzeitigkeit komplizierter.

6.2 Die Einsteinschen Postulate

Einstein hielt an der Idee der Gleichberechtigung aller Bezugssysteme fest. Er stellte folgende Postulate auf:

1. *Relativitätsprinzip*: Die Form der physikalischen Gesetze bleibt in jedem Inertialsystem gleich.
2. *Konstanz der Lichtgeschwindigkeit*: Die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum ist in allen Inertialsystemen gleich. (Also unabhängig von der Bewegung der Quellen.)

Diese Postulate bilden die axiomatische Grundlage der SRT. Ihre rigorose Anwendung führt zur Erweiterung der Galilei-Transformation auf die Lorentz-Transformation. Es handelt sich hier um Transformationsformeln insbesondere für Raum und Zeit. Die Lorentztransformation enthält als Grenzfall für $v \ll c$ die Galilei-Transformation.

6.3 Die Lorentztransformation

Wir betrachten zwei Inertialsysteme Σ und Σ' . Σ' bewegt sich in gleichförmig geradliniger Bewegung gegenüber Σ mit der Geschwindigkeit v . Zum Zeitpunkt $t = 0$ in Σ seien beide Systeme identisch, $\Sigma = \Sigma'$. Wir vergleichen zwei Lichtblitze, die zum Zeitpunkt $t = 0$ im Ursprung von Σ und Σ' ausgesandt werden. Die sich ausbreitende Kugelwelle genügt der Gleichung

$$c^2 t^2 = \vec{r}^2 = x^2 + y^2 + z^2 . \quad (6.20)$$

Wegen Konstanz der Lichtgeschwindigkeit gilt aber auch

$$c^2 t'^2 = x'^2 + y'^2 + z'^2 = \vec{r}'^2 . \quad (6.21)$$

Dies zeigt uns, dass Raum und Zeit verknüpft sind. Wir bezeichnen deshalb als *Ereignis* etwas, das in Raum und Zeit lokalisiert ist. Ein Ereignis können wir mit Hilfe eines *Vierervektors* beschreiben, der Raum- und Zeitkomponenten enthält:

$$\underline{\text{Vierervektor:}} \quad x = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, \vec{r}) = (ct, x, y, z) . \quad (6.22)$$

6.3.1 Einschub: Index Notation

Wir können Gleichungen entweder mit Vektoren oder in Komponenten schreiben:

$$\vec{F} = m\vec{a} \quad \leftrightarrow \quad F_i = ma_i \quad (6.23)$$

$$s = \vec{a}\vec{b} \quad \leftrightarrow \quad s = \sum_{i=1}^3 a_i b_i . \quad (6.24)$$

Und mit den Matrizen M und L

$$\vec{a} = M\vec{b} \quad \leftrightarrow \quad a_i = \sum_j M_{ij} b_j \quad (6.25)$$

$$\vec{a} = LM\vec{b} \quad \leftrightarrow \quad a_i = \sum_{j,k} L_{ij} M_{jk} b_k . \quad (6.26)$$

Wir führen die Einsteinsche Summenkonvention ein. Sie besagt, dass über doppelt auftretende Indizes summiert wird, also

$$a_i = M_{ij} b_j = \text{Summation über } j \quad (6.27)$$

$$a_i = L_{ij} M_{jk} b_k = \text{Summation über } j, \text{ über } k \text{ etc.} . \quad (6.28)$$

Wir bezeichnen die Komponenten von Vierervektoren mit griechischen Indizes, also

$$x^\mu, \quad x_\mu . \quad (6.29)$$

Die x^μ , x_μ sind nicht euklidisch, sondern Elemente im Minkowski-Raum. Die beiden Viervektoren in (6.29) unterscheiden sich wegen der Minkowski-Metrik

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (6.30)$$

im Vorzeichen ihrer räumlichen Komponenten. Es gilt

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} \quad (6.31)$$

und

$$x_\mu = g_{\mu\nu}x^\nu \quad \text{sowie} \quad x^\mu = g^{\mu\nu}x_\nu. \quad (6.32)$$

Mit dem kontravarianten Vierervektor

$$x^\mu = (ct, \vec{x}) \quad (6.33)$$

gilt für den kovarianten Vierervektor

$$x_\mu = (ct, -\vec{x}). \quad (6.34)$$

Beim Skalarprodukt werden immer nur obere und untere Indizes kontrahiert,

$$x_\mu y^\mu = g_{\mu\nu}x^\nu y^\mu = x^\mu y_\mu = g^{\mu\nu}x_\nu y_\mu = x^0 y^0 - \vec{x}\vec{y}. \quad (6.35)$$

Beachte, dass $x_0 = x^0$. Die Matrixmultiplikation schreibt sich gemäß

$$\begin{aligned} x'^\mu &= \underbrace{L^\mu_\nu}_{\text{Matrizelemente}} x^\nu \equiv \sum_{\nu=0,1,2,3} L^\mu_\nu x^\nu \\ &= L^\mu_0 x^0 + L^\mu_1 x^1 + L^\mu_2 x^2 + L^\mu_3 x^3. \end{aligned} \quad (6.36)$$

Mit

$$x^2 = (x^0)^2 - (x^1)^2 - (x^2)^2 - (x^3)^2 = c^2 t^2 - \vec{x}^2 \quad (6.37)$$

ist also die gleiche Ausbreitung der Kugelwellen in Σ und Σ' gleichbedeutend mit der Invarianz des Viererimpulsquadrats im Minkowski-Raum,

$$x^2 = x'^2 \quad (6.38)$$

oder

$$c^2 t^2 - x^2 - y^2 - z^2 = c^2 t'^2 - x'^2 - y'^2 - z'^2. \quad (6.39)$$

Die gesuchte Transformation, die dies gewährleistet, wenn man von Σ nach Σ' übergeht, ist die Lorentz-Transformation.

6.3.2 Herleitung der Lorentz-Transformation

Die Wahl der Koordinatenachsen ist offenbar willkürlich. Die allgemeine Lorentztransformation ist einfach gegeben durch die spezielle Lorentztransformation (bei der \vec{v} entlang einer Achse gerichtet ist) multipliziert mit einer Drehung. Wir betrachten im folgenden der Einfachheit halber o.B.d.A. eine gleichförmig geradlinige Bewegung entlang der z -Achse. Die Lorentztransformation wird durch die Matrix L_{ν}^{μ} vermittelt. Die Transformation muss eine lineare Beziehung sein, damit die gleichförmige Bewegung in Σ auch in Σ' gleichförmig bleibt¹, also

$$x'^{\mu} = L_{\nu}^{\mu} x^{\nu} \left(= \sum_{\nu=0,1,2,3} L_{\nu}^{\mu} x^{\nu} \right). \quad (6.40)$$

Da sich gemäß unserer gewählten Bewegungsrichtung x und y nicht verändern, sind diese auch zunächst unabhängig von der Transformation und somit

$$x' = x \quad \text{und} \quad y' = y. \quad (6.41)$$

Die Gestalt der Transformationsmatrix ist also gegeben durch

$$L = \begin{pmatrix} L_{00} & 0 & 0 & L_{03} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ L_{30} & 0 & 0 & L_{33} \end{pmatrix}. \quad (6.42)$$

Es werden also nur die z - und die t -Komponenten vermischt. Die Komponenten x und y bleiben invariant. Damit wird aus Glg. (6.39) mit

$$x^0 \equiv ct, \quad x^1 \equiv x, \quad x^2 \equiv y, \quad x^3 \equiv z \quad (6.43)$$

schließlich

$$\begin{aligned} (x^0)^2 - (x^3)^2 &= (x^{0'})^2 - (x^{3'})^2 \\ &= (L_{00}x^0 + L_{03}x^3)^2 - (L_{30}x^0 + L_{33}x^3)^2 \\ &= (L_{00}^2 - L_{30}^2)(x^0)^2 + (L_{03}^2 - L_{33}^2)(x^3)^2 + 2(L_{00}L_{03} - L_{30}L_{33})x^0x^3. \end{aligned} \quad (6.44)$$

Koeffizientenvergleich liefert:

$$L_{00}^2 - L_{30}^2 = 1 \quad (6.45)$$

$$L_{03}^2 - L_{33}^2 = -1 \quad (6.46)$$

$$L_{00}L_{03} - L_{30}L_{33} = 0. \quad (6.47)$$

Wir haben somit 3 Gleichungen für 4 Unbekannte. Wir haben somit einen freien Parameter. Sei dieser y . Eine mögliche Lösung ist somit

$$L_{00} = L_{33} = \cosh y \quad (6.48)$$

$$L_{30} = L_{03} = -\sinh y. \quad (6.49)$$

¹Diese Linearität der Transformation reflektiert die Homogenität des Raumes, was bedeutet, dass alle Raumzeitpunkte äquivalent sind. So dürfen z.B. die Resultate der Messung eines Längen- oder Zeitintervalls eines Ereignisses nicht davon abhängen, wo und wann ein solches Intervall in unserem Referenzsystem stattfindet.

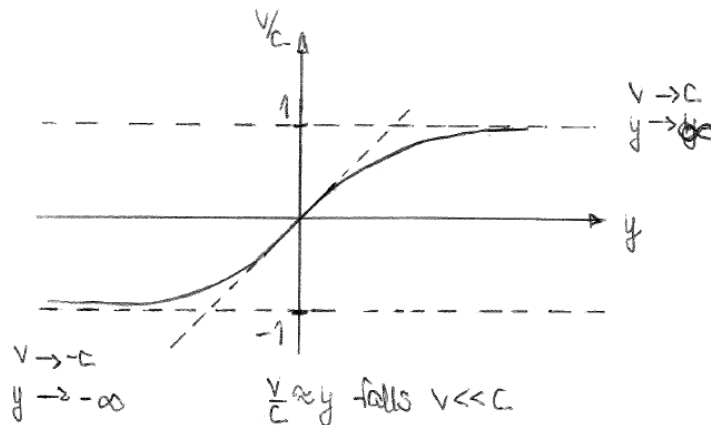


Abbildung 6.4: Die Rapidity y .

Das Vorzeichen wird ermittelt, indem der Grenzfall zur Galilei-Transformation ($v \ll c$) gebildet wird. Somit erhalten wir also für die Lorentz-Transformationsmatrix

$$L = \begin{pmatrix} \cosh y & 0 & 0 & -\sinh y \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\sinh y & 0 & 0 & \cosh y \end{pmatrix}. \tag{6.50}$$

Wir wollen nun den Zusammenhang zwischen y und der Geschwindigkeit v ermitteln. Betrachten wir hierzu die Bewegung des Ursprungs von Σ' . Nach der Zeit t hat er die Position $x^3(t)$ im System Σ . Diese ist gegeben durch

$$x^3(t) = vt = \frac{v}{c} ct = \frac{v}{c} x^0. \tag{6.51}$$

Im System Σ' hingegen hat er offensichtlich die Position

$$x^{3'} = 0 = \cosh y x^3 - \sinh y x^0 = \left(\frac{v}{c} \cosh y - \sinh y\right) x^0. \tag{6.52}$$

Dies ist erfüllt für

$$\frac{\sinh y}{\cosh y} = \tanh y = \frac{v}{c}. \tag{6.53}$$

Man nennt y die *Rapidity* bzw. verallgemeinerte Geschwindigkeit. Die Rapidity ist in Fig. 6.4 dargestellt. Die Rapidity verhält sich folgendermaßen

$$y \rightarrow \infty \quad \text{für} \quad v \rightarrow c \tag{6.54}$$

$$y \rightarrow -\infty \quad \text{für} \quad v \rightarrow -c \tag{6.55}$$

$$y \approx \frac{v}{c} \quad \text{für} \quad v \ll c. \tag{6.56}$$

Weiterhin gilt mit

$$\cosh^2 y - \sinh^2 y = 1 \Leftrightarrow \cosh^2 y (1 - \tanh^2 y) = 1 \Rightarrow \tag{6.57}$$

$$\cosh y = \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh^2 y}} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \tag{6.58}$$

sowie

$$\sinh y = \cosh y \tanh y = \frac{\frac{v}{c}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} . \quad (6.59)$$

Gängige Abkürzungen sind

$$\beta = \frac{v}{c} \quad \text{und} \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} . \quad (6.60)$$

Damit haben wir also

$$\cosh y = \gamma \quad \text{und} \quad \sinh y = \gamma\beta . \quad (6.61)$$

Für L bekommen wir

$$L = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & -\gamma\beta \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\gamma\beta & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} . \quad (6.62)$$

Es ist, wie man sich leicht überzeugt,

$$L(-v)L(v) = \mathbf{1}_4 , \quad \text{also} \quad L(-v) = L^{-1}(v) . \quad (6.63)$$

Ferner ist

$$\det L = \gamma^2 - \gamma^2\beta^2 = \cosh^2 y - \sinh^2 y = 1 . \quad (6.64)$$

Bei der Lorentztransformation L handelt es sich um eine verallgemeinerte Drehung. Die Lorentz-Transformationsformeln sind für unseren betrachteten Fall gegeben durch:

$$x' = x \quad (6.65)$$

$$y' = y \quad (6.66)$$

$$z' = \gamma(z - \beta ct) \quad (6.67)$$

$$ct' = \gamma(ct - \beta z) . \quad (6.68)$$

Bemerkungen:

1. Im Grenzfall $v \ll c$ ergibt sich die Galilei-Transformation.
2. Die mögliche Maximalgeschwindigkeit ist c . Ansonsten wird die Wurzel imaginär.
3. Die inverse Lorentz-Transformation ist durch $L^{-1} = L(v \rightarrow -v)$ gegeben. Dies ist klar, denn Σ bewegt sich von Σ' aus gesehen mit $-v$ entlang der z -Achse.
4. Neben $x^2 = (x^0)^2 - \vec{x}^2$ sind alle Quadrate von Minkowski-4er-Vektoren *invariant* unter Lorentz-Transformationen. Ebenso alle Skalarprodukte

$$x_\mu y^\mu = x \cdot y = x^0 y^0 - \vec{x} \vec{y} \quad \text{'Lorentz-Skalare'} . \quad (6.69)$$

5. Zur Notation: Griechische Indizes laufen über die Raum- und Zeitkomponenten, lateinische nur über die Raumkomponenten, also $\mu = 0, 1, 2, 3$ und $i = 1, 2, 3$. Ferner bezeichnen i räumliche Komponenten, 0 zeitliche Komponenten.

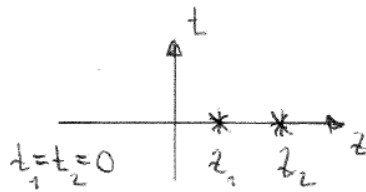


Abbildung 6.5: Gleichzeitigkeit zweier Ereignisse.

6.4 Folgerungen aus der Lorentz-Transformation

Gleichzeitigkeit: Seien Σ und Σ' zwei Bezugssysteme, die sich relativ mit der Geschwindigkeit v in z -Richtung zueinander bewegen. Damit erhalten wir in Σ'

$$z' = \gamma(z - \beta ct) \tag{6.70}$$

$$ct' = \gamma(ct - \beta z) . \tag{6.71}$$

In zwei verschiedenen Bezugssystemen Σ und Σ' vergeht die Zeit also unterschiedlich schnell. Was bedeutet dann Gleichzeitigkeit? Betrachten wir das System Σ , so bedeutet die Gleichzeitigkeit zweier Ereignisse bei z_1 und z_2 , siehe Fig. 6.5, dass

$$t_1 = t_2 , \quad \text{also} \quad \Delta t = t_2 - t_1 = 0 . \tag{6.72}$$

In Σ' hingegen haben wir

$$ct'_1 = \gamma(ct_1 - \beta z_1) \quad \text{und} \quad ct'_2 = \gamma(ct_2 - \beta z_2) , \tag{6.73}$$

und damit ($t_2 = t_1$)

$$c\Delta t' = c(t'_2 - t'_1) = \gamma\beta(z_1 - z_2) \neq 0 . \tag{6.74}$$

Das Vorzeichen von $\Delta t'$ hängt nur vom Vorzeichen von $(z_1 - z_2)$ ab. Damit ist die Reihenfolge der Ereignisse variabel, siehe Fig. 6.6, und es stellt sich die Frage: Kann Ursache und Wirkung vertauscht werden? Kann die Kausalität verletzt werden? Betrachten wir zwei Ereignisse in Σ , für die gelten soll

$$t_2 > t_1 . \tag{6.75}$$

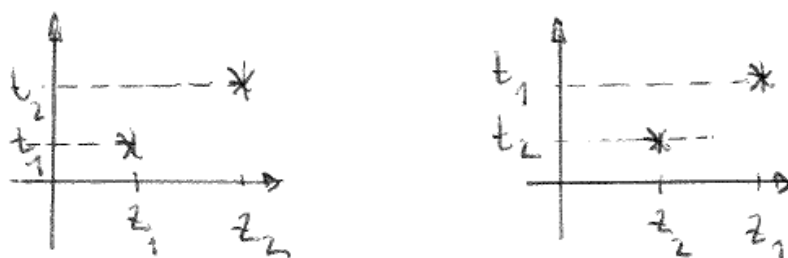


Abbildung 6.6: Zwei Ereignisse.

Damit haben wir in Σ' dann

$$c(t'_2 - t'_1) = \gamma(c(t_2 - t_1) - \beta(z_2 - z_1)) . \quad (6.76)$$

Wir haben $(t'_2 - t'_1) > 0$ und damit einen kausalen Zusammenhang, wenn

$$\gamma(c(t_2 - t_1) - \beta(z_2 - z_1)) > 0 \quad \Leftrightarrow \quad (6.77)$$

$$c(t_2 - t_1) > \beta(z_2 - z_1) . \quad (6.78)$$

Da $\beta \leq 1$, gilt in jedem Fall

$$c(t_2 - t_1) \geq z_2 - z_1 , \quad (6.79)$$

falls $t_2 \geq t_1$, also Kausalität vorausgesetzt wird. Da wir

$$c\Delta t \geq \Delta z \quad (6.80)$$

haben, kann also ein Lichtsignal Informationen zwischen z_1 und z_2 übertragen, und die Kausalität bleibt erhalten ($t'_2 > t'_1$). Falls aber

$$c\Delta t < \Delta z , \quad (6.81)$$

dann ist keine Informationsübertragung möglich. Die Punkte z_1 und z_2 liegen zu weit auseinander. Die Abfolge der Ereignisse kann umgekehrt werden, allerdings nur dann, wenn sie nicht kausal miteinander verknüpft sind. Die Form der Lorentz-Transformationen erzwingt also die Kausalität. Die Bezeichnung der verschiedenen Situationen für 4er-Vektoren $x = (ct, \vec{x})$ ist

$$c^2t^2 > \vec{x}^2 \quad \text{“zeitartig”} \quad \text{und } x^2 > 0 \quad (6.82)$$

$$c^2t^2 < \vec{x}^2 \quad \text{“raumartig”} \quad \text{und } x^2 < 0 \quad (6.83)$$

$$c^2t^2 = \vec{x}^2 \quad \text{“lichtartig”} \quad \text{und } x^2 = 0 . \quad (6.84)$$

Betrachten wir die Frage möglicherweise kausaler Ereignisse nochmals anhand von Fig. 6.7. Im Zentrum steht ein Ereignis, welches sich im Ursprung des Raum-Zeit-Diagramms befindet. Die Gesamtheit der Ereignisse, die für dieses Ereignis Ursache hätten sein können, die sich also in der absoluten Vergangenheit befinden, sind auf einen *Vergangenheits-Lichtkegel* beschränkt. Dessen Einhüllende wird durch die Lichtgeschwindigkeit gebildet. Ein Ereignis *auf* der Oberfläche des Vergangenheits-Lichtkegels, in der Entfernung $\Delta x = c\Delta t$, kann nur dann eine Ursache sein, wenn Information mit Lichtgeschwindigkeit von dort zum Ursprung übertragen wurde. Ereignisse in der Vergangenheit, die sich *außerhalb* des Vergangenheits-Lichtkegels befinden, sind zu weit voneinander entfernt, um kausal miteinander verknüpft zu sein. Diese Region wird als Bereich *raumartiger Ereignisse* bezeichnet. Zum Zeitpunkt null verengt sich der Lichtkegel auf einen einzigen Punkt. Dies liegt daran, dass sich kein Ereignis, das irgendwo anders stattfindet, instantan auf ein Ereignis im Ursprung der Raumzeit auswirken kann. Innerhalb des *Zukunfts-Lichtkegels* liegen alle Ereignisse, die nicht zu weit entfernt sind, um durch Ereignisse am Ursprung der Raumzeit beeinflusst zu werden. Je weiter die Zeit voranschreitet, desto mehr weitet sich dieser Bereich natürlich aus.

Zeitdilatation: Wir betrachten im Inertialsystem Σ zwei Ereignisse, z.B. zwei Lichtblitze, die *am selben Ort* z aber zu unterschiedlichen Zeiten t_1 und t_2 stattfinden. Wir haben also

$$\Delta t = t_2 - t_1 \neq 0 . \quad (6.85)$$

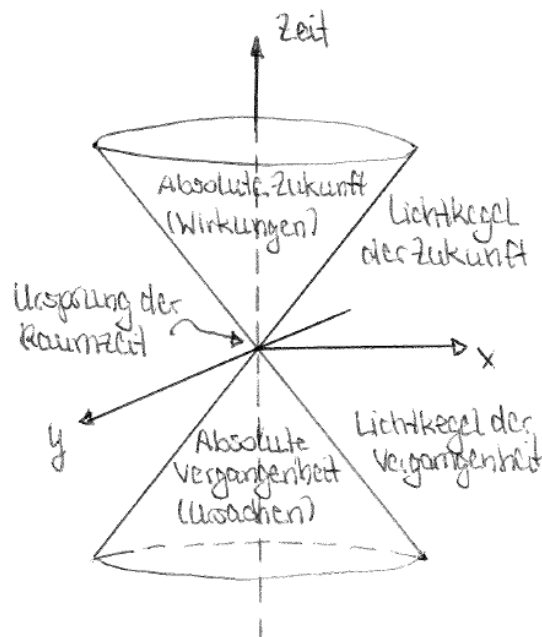


Abbildung 6.7: Lichtkegel der Zukunft und der Vergangenheit.

Im relativ dazu bewegten Inertialsystem Σ' erhalten wir mit der Lorentz-Transformation

$$ct'_1 = \gamma(ct_1 - \beta z) \quad \text{und} \quad ct'_2 = \gamma(ct_2 - \beta z), \quad \text{so dass} \quad (6.86)$$

$$t'_2 - t'_1 = \Delta t' = \gamma \Delta t = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \Delta t. \quad (6.87)$$

Da $\gamma > 1$ ist also die Zeit in Σ' gedehnt. Wir sprechen von *Zeitdilatation*. Dies wirkt zunächst paradox, ist es aber nicht, da sich auch z_1 und z_2 transformieren. So erhalten wir

$$z'_1 = \gamma(z - \beta ct_1) \quad \text{und} \quad z'_2 = \gamma(z - \beta ct_2), \quad \text{so dass} \quad (6.88)$$

$$z'_2 - z'_1 = \Delta z' = -\gamma \beta c \Delta t = -c \beta \Delta t' \neq 0. \quad (6.89)$$

In Σ findet das Ereignis an einem Ort statt und wird dort mit einer Uhr gemessen. In Σ' hingegen findet das Ereignis an zwei verschiedenen Orten statt. Es sind zwei Uhren notwendig, eine bei z'_1 und eine andere bei z'_2 , die miteinander synchronisiert werden müssen. Es findet also ein ganz anderer Messprozess statt. Wir nennen die Zeit, die in dem Bezugssystem verstreicht, in dem alle Ereignisse am selben Ort stattfinden, die *Eigenzeit* $\Delta\tau$. Also

$$\Delta t' = \gamma \Delta\tau. \quad (6.90)$$

Ein eindrucksvolles Beispiel für die Zeitdilatation ist der μ -Zerfall. Myonen zerfallen in der Erdatmosphäre gemäß

$$\mu^\pm \rightarrow e^\pm + \nu_1 + \nu_2 \quad (6.91)$$

in Elektronen und Neutrinos. Ihre mittlere Lebensdauer beträgt $2.2 \mu s$. Damit sollten sie eigentlich nicht bis zur Erdoberfläche gelangen. Jedoch ist für den irdischen Beobachter die Zeit von der oberen Atmosphäre bis zur Erdoberfläche gleich der dilatierten Eigenzeit des

Myons.

Längenkontraktion: Wir betrachten im System Σ einen Stab der Länge l in Ruhe. Die Messung der Länge ergibt damit offenbar

$$l = z_2 - z_1 . \quad (6.92)$$

In Σ' haben wir

$$z'_1 = \gamma(z_1 - \beta ct_1) \quad \text{und} \quad z'_2 = \gamma(z_2 - \beta ct_2) . \quad (6.93)$$

In Σ' wird die Länge l' zu gleichen Zeiten t'_1 und t'_2 gemessen. Also

$$l' = z'_2 - z'_1 = \gamma(z_2 - z_1) - \gamma\beta c(t_2 - t_1) \quad (6.94)$$

und mit

$$ct'_1 = \gamma(ct_1 - \beta z_1) = ct'_2 = \gamma(ct_2 - \beta z_2) \quad (6.95)$$

haben wir ($t'_1 = t'_2$)

$$ct_1 - \beta z_1 = ct_2 - \beta z_2 \quad \Leftrightarrow \quad c(t_2 - t_1) = \beta(z_2 - z_1) . \quad (6.96)$$

Damit ist

$$l' = \gamma(z_2 - z_1) - \gamma\beta^2(z_2 - z_1) = \gamma(1 - \beta^2)(z_2 - z_1) = \frac{l}{\gamma} . \quad (6.97)$$

Wir finden somit

$$l' = \frac{l}{\gamma} < l . \quad (6.98)$$

Die im bewegten System gemessene Länge ist kürzer als die im Ruhesystem. Die Länge eines Objekts in einem Bezugssystem, in dem es sich in Ruhe befindet, wird Eigenlänge l_0 genannt.

Die Messvorschrift 'Gleichzeitigkeit' hat Folgendes zur Konsequenz: Der ruhende Beobachter misst die Länge des Stabes, indem er gleichzeitig die beiden Enden z_1 und z_2 betrachtet. Die Information hierüber gelangt bei ihm gleichzeitig an. Wenn sich nun aber für den bewegten Beobachter der Stab relativ zu ihm bewegt, würde bei ihm wegen der Endlichkeit der Lichtgeschwindigkeit die Information über z'_1 und z'_2 nicht mehr gleichzeitig ankommen. Damit dies auch weiterhin der Fall ist, muss in Σ das Signal von dem Ende, das sich von ihm fortbewegt, früher ausgesandt werden, damit die Messung gleichzeitig stattfinden kann. Es kommt somit zur Verkürzung des Stabes, zur Längenkontraktion.

Das Paradoxon der Längenkontraktion entsteht, wenn die wechselseitige Längenkontraktion ohne Berücksichtigung der Relativität der Gleichzeitigkeit betrachtet wird. Zwei Ereignisse, die in einem Bezugssystem zwar an unterschiedlichen Orten, aber gleichzeitig eintreten, sind in einem zweiten, dazu bewegten Bezugssystem nicht mehr gleichzeitig.

Addition von Geschwindigkeiten: Wir stellen uns die Frage, welche Geschwindigkeit v_3 sich ergibt, wenn eine Geschwindigkeit v_1 um v_2 geboostet wird. Um sie zu beantworten, vergleiche

chen wir zwei hintereinander ausgeführte boosts mit einem boost. Also

$$\begin{aligned}
 L(\beta_3) &= L(\beta_2) L(\beta_1) & (6.99) \\
 \begin{pmatrix} \gamma_3 & 0 & 0 & -\beta_3\gamma_3 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\beta_3\gamma_3 & 0 & 0 & \gamma_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \gamma_2 & 0 & 0 & -\beta_2\gamma_2 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\beta_2\gamma_2 & 0 & 0 & \gamma_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & 0 & -\beta_1\gamma_1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\beta_1\gamma_1 & 0 & 0 & \gamma_1 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \gamma_1\gamma_2(1 + \beta_1\beta_2) & 0 & 0 & -\gamma_1\gamma_2(\beta_1 + \beta_2) \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\gamma_1\gamma_2(\beta_1 + \beta_2) & 0 & 0 & \gamma_1\gamma_2(1 + \beta_1\beta_2) \end{pmatrix}. & (6.100)
 \end{aligned}$$

Koeffizientenvergleich liefert

$$\gamma_3 = \gamma_1\gamma_2(1 + \beta_1\beta_2) \quad (6.101)$$

$$\beta_3\gamma_3 = \gamma_1\gamma_2(\beta_1 + \beta_2). \quad (6.102)$$

Und damit

$$\beta_3 = \frac{\beta_1 + \beta_2}{1 + \beta_1\beta_2}. \quad (6.103)$$

Wir erhalten z.B. für $v_1 = v_2 = c/2$, also $\beta_1 = \beta_2 = 1/2$

$$\beta_3 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}} = \frac{4}{5}. \quad (6.104)$$

Wir betrachten den Extremfall der Lichtgeschwindigkeit, also $\beta_1 = 1$. Damit erhalten wir

$$\beta_3 = \frac{1 + \beta_2}{1 + \beta_2} = 1. \quad (6.105)$$

Und zwar unabhängig davon, wie sich das System 2 bewegt. Selbst für $\beta_2 = -1$ erhalten wir $\beta_3 = 1$!

Betrachten wir die Rapiditäten². Wir haben

$$\gamma_3 = \cosh \eta_3 \quad (6.106)$$

$$\beta_3\gamma_3 = \sinh \eta_3 \quad (6.107)$$

und damit

$$\begin{aligned}
 \gamma_3 &= \cosh \eta_3 = \gamma_1\gamma_2 + \gamma_1\beta_1\gamma_2\beta_2 = \cosh \eta_1 \cosh \eta_2 + \sinh \eta_1 \sinh \eta_2 \\
 &= \frac{1}{4}(e^{\eta_1} + e^{-\eta_1})(e^{\eta_2} + e^{-\eta_2}) + \frac{1}{4}(e^{\eta_1} - e^{-\eta_1})(e^{\eta_2} - e^{-\eta_2}) \\
 &= \frac{1}{4}(e^{\eta_1}e^{\eta_2} + e^{-\eta_1}e^{-\eta_2} + e^{\eta_1}e^{-\eta_2} + e^{-\eta_1}e^{\eta_2}) \\
 &\quad + \frac{1}{4}(e^{\eta_1}e^{\eta_2} + e^{-\eta_1}e^{-\eta_2} - e^{\eta_1}e^{-\eta_2} - e^{-\eta_1}e^{\eta_2}) \\
 &= \frac{1}{2}(e^{\eta_1}e^{\eta_2} + e^{-\eta_1}e^{-\eta_2}) \\
 &= \frac{1}{2}(e^{\eta_1 + \eta_2} + e^{-(\eta_1 + \eta_2)}) \\
 &= \cosh(\eta_1 + \eta_2). & (6.108)
 \end{aligned}$$

²Die Rapidität wurde in Glg. (6.53) eingeführt, dort aber nicht η sondern y genannt.

Analog findet man

$$\sinh \eta_3 = \sinh(\eta_1 + \eta_2) . \quad (6.109)$$

Die Rapiditäten (η) werden also einfach addiert. Dies liefert umso mehr einen Grund, die Rapiditäten als verallgemeinerte Geschwindigkeiten zu sehen.

6.5 Relativistische Mechanik

Die Konstanz der Lichtgeschwindigkeit und die Lorentz-Invarianz der SRT ist nicht auf die Elektrodynamik beschränkt, sondern hat allgemeine Gültigkeit in der Physik. In diesem Abschnitt wollen wir uns damit beschäftigen, wie die Gesetze der Mechanik verändert werden müssen, um sie konsistent mit der Lorentz-Transformation zu machen.

6.5.1 Relativistische Geschwindigkeit

Zur Bestimmung der relativistischen Geschwindigkeit eines Teilchens betrachten wir das 'differentielle Ereignis' dx ,

$$dx = (cdt, dx^1, dx^2, dx^3) . \quad (6.110)$$

Damit haben wir

$$\begin{aligned} (dx)^2 \equiv ds^2 &= c^2 dt^2 - (d\vec{x})^2 = c^2 dt^2 - \left(\frac{dx^2}{dt^2} + \frac{dy^2}{dt^2} + \frac{dz^2}{dt^2} \right) dt^2 \\ &= c^2 dt^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) . \end{aligned} \quad (6.111)$$

Wir erinnern uns, dass die *Eigenzeit* die Zeit ist, die in dem Bezugssystem verstreicht, in dem alle Ereignisse am selben Ort stattfinden. Dementsprechend definieren wir das *Eigenzeit-Intervall* $d\tau$ als das Zeitintervall, das im Ruhesystem des Teilchens verstreicht, d.h.

$$d\tau = \frac{1}{c} ds . \quad (6.112)$$

Andererseits ist wegen Glg. (6.111)

$$d\tau = \frac{1}{\gamma} dt . \quad (6.113)$$

Damit ist also

$$t = \gamma \tau . \quad (6.114)$$

Wir definieren die relativistische 4er-Geschwindigkeit nun über die Eigenzeit $d\tau$ des Teilchens. Dies macht Sinn, da die Eigenzeit ein Lorentz-Skalar ist. (Aus (6.112) folgt $c^2 d\tau^2 = ds^2 \Leftrightarrow c^2 d\tau^2 = c^2 dt^2 - d\vec{x}^2$.) Also ist die so definierte 4er-Geschwindigkeit ein kontravarianter 4er-Vektor,

$$\begin{aligned} u^\mu &\equiv \frac{dx^\mu}{d\tau} = \frac{dx^\mu}{dt} \frac{dt}{d\tau} = \gamma \frac{dx^\mu}{dt} \\ &= \gamma \frac{d}{dt} (cdt, dx, dy, dz) = \gamma (c, \vec{v}) . \end{aligned} \quad (6.115)$$

Und das 4er-Geschwindigkeits-Produkt ist ein Lorentzskalar,

$$u^2 = u_\mu u^\mu = \gamma^2 (c^2 - \vec{v}^2) = \gamma^2 c^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) = c^2 . \quad (6.116)$$

6.5.2 Verallgemeinerte Kraftgleichung

Für die verallgemeinerte Kraftgleichung machen wir folgenden Ansatz,

$$K^\mu = m \frac{du^\mu}{d\tau} . \quad (6.117)$$

Damit haben wir für die Raumkomponenten

$$\begin{aligned} K^i &= m \frac{d}{d\tau} u^i = m\gamma \frac{d}{dt} \gamma v^i = \gamma \frac{d}{dt} (m\gamma v^i) \\ &= \gamma \frac{d}{dt} p^i . \end{aligned} \quad (6.118)$$

Wir definieren hierüber also den relativistischen Impuls p^i . Damit haben wir also verallgemeinert (nicht-relativistisch \equiv n.r.)

$$p^i = \gamma m v^i \xrightarrow{\text{n.r.}} m v^i \quad (6.119)$$

$$K^i = \gamma F^i \xrightarrow{\text{n.r.}} F_{\text{n.r.}}^i . \quad (6.120)$$

Die Frage ist, was K_0 bedeutet. Wir betrachten hierzu

$$\begin{aligned} K^\mu u_\mu &= K^0 u^0 - \vec{K} \vec{u} = \left(m \frac{d}{d\tau} u^0 \right) u^0 - \left(m \frac{d}{d\tau} \vec{u} \right) \vec{u} \\ &= \frac{1}{2} m \frac{d}{d\tau} (u^0 u^0 - \vec{u} \vec{u}) = \frac{1}{2} m \frac{d}{d\tau} u^2 = \frac{1}{2} m \frac{d}{d\tau} c^2 = 0 . \end{aligned} \quad (6.121)$$

Daraus folgt

$$K^0 u^0 = \vec{K} \vec{u} \Leftrightarrow K^0 \gamma c = \gamma^2 \vec{F} \vec{v} \Rightarrow K^0 = \gamma \frac{\vec{F} \vec{v}}{c} . \quad (6.122)$$

Wir haben also somit für die verallgemeinerte 4er-Kraft

$$K^\mu = \gamma \left(\frac{\vec{F} \vec{v}}{c}, \vec{F} \right) . \quad (6.123)$$

Betrachten wir die Nullkomponente der Minkowski-Kraft genauer:

$$\gamma \frac{\vec{F} \vec{v}}{c} = m \frac{d}{d\tau} u^0 = m\gamma \frac{d}{dt} \gamma c \Rightarrow \vec{F} \vec{v} = \frac{d}{dt} \frac{m c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} . \quad (6.124)$$

Bei $|\vec{F} \vec{v}|$ handelt es sich um die Arbeit pro Zeit. Also

$$\vec{F} \cdot \vec{v} = \frac{d}{dt} T_r , \quad (6.125)$$

wobei wir mit T_r die relativistische kinetische Energie bezeichnen. Also ist

$$T_r = \frac{m c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \gamma m c^2 . \quad (6.126)$$

Mit

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \stackrel{v \ll c}{\approx} 1 + \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2} + \dots \quad (6.127)$$

erhalten wir für $v \ll c$

$$T_r \approx mc^2 + \frac{1}{2}mv^2 + \dots \quad (6.128)$$

Beim 2. Term handelt es sich um die bekannte kinetische Energie. Der erste Term hingegen bezeichnet die Ruheenergie des Teilchens. Man beachte, dass die Energie ohnehin nur bis auf eine additive Konstante bestimmt ist. Dies ist hier die Ruheenergie des Teilchens mit der Ruhemasse m ,

$$E_0 = mc^2 . \quad (6.129)$$

6.5.3 Der Vierer-Impuls

Wir definieren den Viererimpuls über die Vierer-Geschwindigkeit und die Ruhemasse,

$$p^\mu = mu^\mu = m\gamma(c, \vec{v}) = (\gamma mc, \gamma m\vec{v}) = (\text{kin. Energie}/c, \text{Impuls}) = (E/c, \vec{p}) . \quad (6.130)$$

D.h. genauso wie wir eine Zeit-Raum Beziehung haben, haben wir hier eine Energie-Impuls Beziehung. Und für den Lorentz-Skalar finden wir

$$\begin{aligned} p^\mu p_\mu &= p^2 = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 \\ &= m^2 u^2 = m^2 c^2 = \text{konstant} . \end{aligned} \quad (6.131)$$

Da nun p^2 ein Lorentz-Skalar ist und auch c^2 , folgt daraus, dass auch die Masse m ein Lorentz-Skalar ist. Wir haben also den relativistischen Energiesatz

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2} . \quad (6.132)$$

Für kleine Geschwindigkeiten haben wir

$$\begin{aligned} E &= mc^2 \sqrt{1 + \frac{\vec{p}^2}{m^2 c^2}} \approx mc^2 \left(1 + \frac{m^2 \vec{v}^2}{2m^2 c^2} + \dots \right) \\ &= \underbrace{mc^2}_{\text{Ruheenergie}} + \underbrace{\frac{1}{2}mv^2}_{\text{kinetische Energie}} + \dots \end{aligned} \quad (6.133)$$

Wir finden also wiederum für die Ruheenergie eines Teilchens

$$E_0 = mc^2 , \quad (6.134)$$

mit der Ruhemasse m . Das heißt, dass die Masse eine Form von Energie ist! Diese kann beträchtlich sein. Siehe z.B. die bei einer Kernspaltung frei werdende Energie! Beachte, dass die Energie E in Glg. (6.133) für $m > 0$ im Fall $v \rightarrow c$ gegen unendlich geht. D.h., dass Teilchen mit nicht-verschwindender Ruhemasse sich langsamer als das Licht bewegen.

6.6 Zusammenfassung einiger wichtiger Relationen

Vierervektor: Ein Vierervektor ist ein 4-komponentiger Vektor x^μ oder x_μ , der sich unter einer Lorentzstransformation L^μ_ν ($= 4 \times 4$ Matrix) transformiert gemäß

$$x'^\mu = L^\mu_\nu x^\nu . \quad (6.135)$$

Er besteht aus einer Zeitkomponente (Index 0) und drei Raumkomponenten (Indizes 1,2,3).

Notation: griechische Indizes $\mu = 0, 1, 2, 3$; lateinische Indizes nur Raumkomponenten, also $i = 1, 2, 3$. Mit

$$x^\mu = \begin{pmatrix} ct \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (6.136)$$

ist also $x^0 = ct$, und die Raumkomponenten sind die x^i . Sie bilden den 3-er Vektor

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \vec{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} . \quad (6.137)$$

Damit ist also

$$x^\mu = \begin{pmatrix} ct \\ \vec{x} \end{pmatrix} . \quad (6.138)$$

Der kontravariante Vierervektor ist definiert als

$$x^\mu = \begin{pmatrix} ct \\ \vec{x} \end{pmatrix} . \quad (6.139)$$

Der kovariante Vierervektor ist definiert als

$$x_\mu = \begin{pmatrix} ct \\ -\vec{x} \end{pmatrix} . \quad (6.140)$$

Mit Hilfe des metrischen Tensors

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} . \quad (6.141)$$

können Indizes nach oben und nach unten gezogen werden. So ist z.B. (über doppelt auftretende Indizes wird summiert - Einsteinsche Summenregel)

$$x^\mu = g^{\mu\nu} x_\nu , \quad x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu . \quad (6.142)$$

Die Anwendung des metrischen Tensors ändert das Vorzeichen in den Raumkomponenten. Also z.B.

$$x^\mu = \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad x_\nu = g_{\nu\mu} x^\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ct \\ -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix} . \quad (6.143)$$

Analog

$$x_\mu = \begin{pmatrix} ct \\ -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix} \text{ und } x^\nu = g^{\nu\mu} x_\mu = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \quad (6.144)$$

Beachte, dass

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu}. \quad (6.145)$$

Das *Vierervektor-Produkt* ist definiert als das Produkt zwischen einem kontra- und einem kovarianten Vektor. Also z.B.

$$x^2 \equiv x_\mu x^\mu = (ct)^2 - x^2 - y^2 - z^2 \quad (6.146)$$

da

$$\begin{aligned} x_\mu x^\mu &= x^\mu x_\mu = x^\mu g_{\mu\nu} x^\nu = \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix} = (ct)^2 - x^2 - y^2 - z^2 = (ct)^2 - \vec{x}^2. \end{aligned} \quad (6.147)$$

Ebenso

$$\begin{aligned} x_\mu y^\mu &= x^\mu y_\mu = x^\mu g_{\mu\nu} y^\nu = \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y^0 \\ y^1 \\ y^2 \\ y^3 \end{pmatrix} \\ &= x^0 y^0 - x^1 y^1 - x^2 y^2 - x^3 y^3 = x^0 y^0 - \vec{x} \vec{y}. \end{aligned} \quad (6.148)$$

Für einen boost in z -Richtung ist die Lorentz-Transformation gegeben durch

$$L^\mu_\nu = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & -\beta\gamma \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\gamma\beta & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix}. \quad (6.149)$$

Also ist

$$x'^\mu = L^\mu_\nu x^\nu = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & -\beta\gamma \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\gamma\beta & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma ct - \beta\gamma z \\ x \\ y \\ -\gamma\beta ct + \gamma z \end{pmatrix}. \quad (6.150)$$

Also

$$ct' = \gamma(ct - \beta z), \quad x' = x, \quad y' = y, \quad z' = \gamma(z - \beta ct). \quad (6.151)$$

Folgerungen aus der Lorentz-Transformation:

Zeitdilatation:

$$\Delta t' = \gamma \Delta \tau . \quad (6.152)$$

$\Delta \tau$ ist die Eigenzeit. Dies ist die Zeit, die in einem Bezugssystem verstreicht, in dem alle Ereignisse am selben Ort stattfinden.

Längenkontraktion:

$$l' = \frac{l_0}{\gamma} . \quad (6.153)$$

Es ist l_0 die Eigenlänge. Dies ist die Länge eines Objekts in einem Bezugssystem, in dem es sich in Ruhe befindet.

Die Eigenzeit $\tau = t/\gamma$ ist ein Lorentz-Skalar (= invariant unter Lorentz-Transformation).

Relativistische Geschwindigkeitsaddition:

$$\beta_3 = \frac{\beta_1 + \beta_2}{1 + \beta_1 \beta_2} \quad (6.154)$$

oder

$$\cosh \eta_3 = \cosh(\eta_1 + \eta_2) . \quad (6.155)$$

Relativistische Mechanik:

Relativistische Geschwindigkeit:

$$u^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau} = \gamma(c, \vec{v}) . \quad (6.156)$$

Dies ist ein Vierervektor. Wir haben

$$u^2 \equiv u_\mu u^\mu = \gamma^2(c^2 - v^2) = c^2 . \quad (6.157)$$

Das Produkt zweier Vierer-Geschwindigkeitsvektoren ist ein Lorentz-Skalar, wie es sein soll.

Relativistischer Impuls:

$$p^\mu = mu^\mu = (\gamma mc, \gamma m \vec{v}) = (E/c, \gamma m \vec{v}) . \quad (6.158)$$

Bei E handelt es sich um die Gesamtenergie des Teilchens. Bei m handelt es sich um die Ruhemasse. Sie wird oft auch m_0 genannt. Die Gesamtenergie eines Teilchens ist

$$E = \gamma m c^2 \stackrel{v/c \ll 1}{\approx} m c^2 + \frac{1}{2} m v^2 . \quad (6.159)$$

Bei dem ersten Term auf der rechten Seite handelt es sich um die Ruheenergie des Teilchens. Beim zweiten Term handelt es sich um die kinetische Energie des Teilchens. Wir haben

$$p^2 = p_\mu p^\mu = m^2 u_\mu u^\mu = m^2 c^2 . \quad (6.160)$$

Ebenso ist aber auch

$$p^2 = p^0 p^0 - \vec{p} \vec{p} = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 . \quad (6.161)$$

Gleichsetzen von Glg. (6.160) und (6.161) liefert dann

$$\frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 = m^2 c^2 \quad (6.162)$$

und damit also

$$E^2 = m^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2 \quad \text{bzw.} \quad E = \sqrt{m^2 c^4 + \vec{p}^2 c^2} . \quad (6.163)$$

Relativistische Kraft:

$$K^\mu = m \frac{du^\mu}{d\tau} = \gamma \left(\begin{array}{c} \frac{\vec{F}\vec{v}}{c} \\ \vec{F} \end{array} \right) , \quad (6.164)$$

wobei \vec{F} die relativistische Kraft ist,

$$\vec{F} = \frac{d}{dt}(m\gamma\vec{v}) = \frac{d}{dt}\vec{p} . \quad (6.165)$$

Bei $\vec{p} = m\gamma\vec{v}$ handelt es sich um den relativistischen Impuls. Es ist

$$\vec{F}\vec{v} = \frac{d}{dt}(\gamma mc^2) = \frac{d}{dt}E . \quad (6.166)$$

Kapitel 7

Quantenmechanik

Literatur, z.B.:

- C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, *Quantenmechanik*, de Gruyter, 1999
- A. Messiah, *Quantenmechanik*, de Gruyter, 1991
- J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, 1994
- F. Schwabl, *Quantenmechanik*, Springer, 2002
- L. Landau, E. Lifschitz, *Theoretische Physik III*, Verlag Harri Deutsch
- W. Nolting, *Quantenmechanik I/II*, Springer, 2001
- T. Fliebach, *Quantenmechanik*, Spektrum, Akad. Verl., 1995

Die Quantenmechanik spielt für das Verständnis einer großen Gruppe von Naturerscheinungen eine wichtige Rolle. Sie ist unabdingbar im atomaren oder subatomaren Bereich. So können ohne sie die Struktur der Elektronenhüllen der Atome, das Auftreten diskreter Energieniveaus, chemische Bindungen nicht erklärt werden. Aber auch die Physik makroskopischer Körper kann mit Hilfe klassischer Modelle keine widerspruchsfreien Erklärungen z.B. für Struktur und Stabilität der Materie, für elektrische und thermische Leitfähigkeit, für Phänomene wie Supraleitung, Ferromagnetismus, Quantenkristalle und Neutronensterne geben. Auch in der Elektrodynamik und Optik gibt es klassisch nicht erklärbare Effekte wie Hohlraumstrahlung und photoelektrischer Effekt.

Die Quantenphysik hat wesentlich zu Vereinheitlichung der physikalischen Grundlagen beigetragen. So unterschied man bis zum Ende des 19. Jahrhunderts grundsätzlich zwischen Materie und Strahlung und beschrieb sie durch völlig verschiedene Gesetze, zum einen durch die Newtonschen Gesetze und zum anderen durch die Maxwellschen Gleichungen. Zu Beginn des 20. Jahrhunderts kam es in der Physik zu grundlegenden Umwälzungen, an deren Ende die Relativitätstheorie und die Quantenmechanik standen. Beide wurden weitgehend unabhängig voneinander entwickelt, da sie die klassische Physik in verschiedenen Bereichen in Frage stellten. So wird die Relativitätstheorie bei Geschwindigkeiten nahe der Lichtgeschwindigkeit relevant, während die Quantenmechanik im atomaren und subatomaren Bereich unabdingbar ist. In beiden Fällen ist die klassische Physik als Grenzfall in der neuen

Theorie enthalten.

In diesem Kapitel werden wir uns mit der nicht-relativistischen Quantenmechanik beschäftigen. Im folgenden soll zunächst an einigen historischen Beispielen die Notwendigkeit des Entwickelns einer neuen Theorie aufgezeigt werden.

7.1 Historische Experimente, Widersprüche und Erkenntnisse

Ende des 19. und Anfang des 20. Jahrhunderts wurde die Unzulänglichkeit der klassischen Physik anhand verschiedener Beobachtungen immer offener. Dies soll an den folgenden Beispielen erläutert werden.

7.1.1 Hohlraumstrahlung

Man versteht darunter die elektromagnetische Strahlung innerhalb eines abgeschlossenen Hohlraums im thermischen Gleichgewicht. Wir betrachten einen evakuierten Hohlraum, dessen Wände aus einem beliebigem nichttransparentem Material bestehen, die eine konstante Temperatur T haben. Die Wände geben Wärmestrahlung ab. Nach hinreichend langer Zeit stellt sich dann ein thermisches Gleichgewicht ein. Die den Hohlraum im Gleichgewichtszustand erfüllende elektromagnetische Strahlung nennt man Hohlraumstrahlung. Die spektrale Energiedichte

$$w_\nu = \frac{dE}{d\nu} \quad (7.1)$$

ist unabhängig von der Beschaffenheit der Wände. Sie ist ferner homogen, isotrop und unpolarisiert. Sie ist eine nur von der Frequenz und Temperatur abhängige universelle Funktion,

$$w_\nu = f(\nu, T) . \quad (7.2)$$

Versucht man, die spektrale Strahlungsdichte mit Hilfe der klassischen Physik herzuleiten, so läuft man in Probleme. Dies soll nun gezeigt werden. Wir betrachten den Hohlraum. Gemäß der klassischen Theorie des Elektromagnetismus existiert die Strahlung im Inneren des Hohlraums in Form von stehenden Wellen. Für einen Hohlraum der Länge a muss also gelten

$$n_i \frac{\lambda}{2} = a \quad \text{für } n_x, n_y, n_z \text{ ganzzahlig und positiv} . \quad (7.3)$$

Damit gilt für den Wellenzahlvektor $|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$, wobei der Vektor \vec{k} senkrecht auf der Wellenfront einer Welle steht,

$$\vec{k} = \frac{\pi}{a} \vec{n} , \quad (7.4)$$

und also mit $\nu = c/(2\pi)|\vec{k}|$

$$\nu = \frac{c}{2a} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} . \quad (7.5)$$

Mit Hilfe von Glg. (7.5) können die möglichen Frequenzen einer elektromagnetischen Strahlung in einem Hohlraum bestimmt werden. Diese Frequenzen bilden eine diskontinuierliche Reihe, die durch alle positiven Triplets (n_x, n_y, n_z) bestimmt wird. Jedem Triplet entspricht ein gegebener Wellenzahlvektor \vec{k} , der sich im ersten Oktanten des Tetraeders $Oxyz$ befindet. Man kann zeigen, dass die Anzahl der Wellenzahlvektoren im Frequenzintervall $[\nu, \nu + d\nu]$ unabhängig von der bestimmten Form des Hohlraums ist und nur von dessen Volumen abhängt. In einer Dimension hat man, da $k_i a = \pi n_i$, dann a/π mögliche Werte von k_i pro Wellenzahleinheit. In drei Dimensionen hat man a^3/π^3 mögliche Werte von \vec{k} pro Wellenzahleinheit. Damit ist die Anzahl der Moden zwischen k und $k + dk$ gegeben durch

$$2 \times \frac{a^3}{\pi^3} \times \frac{4\pi k^2 dk}{8} = \frac{k^2 dk}{\pi^2} a^3 . \quad (7.6)$$

Dabei ist $(4\pi k^2 dk)/8$ das Volumen zwischen den Sphären der Radien k und $k + dk$ im ersten Oktanten, was den Faktor $1/8$ bedingt. Der Faktor 2 stammt von den beiden unabhängigen transversalen Polarisierungen. Pro Volumeneinheit a^3 ergeben sich also $k^2 dk/\pi^2$ Moden im Wellenzahlintervall k und $k + dk$. Das heißt, wir haben $8\pi\nu^2 d\nu/c^3$ Moden im Frequenzintervall $[\nu, \nu + d\nu]$. Und somit erhalten wir, wenn \bar{E} die mittlere Energie einer stehenden Welle der Frequenz ν bezeichnet, die spektrale Energiedichte

$$w_\nu d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \bar{E} d\nu . \quad (7.7)$$

Nach den Gesetzen der klassischen Thermodynamik ist die mittlere Energie im thermodynamischen Gleichgewicht gegeben durch

$$\bar{E} = k_B T , \quad (7.8)$$

wobei $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} J/K$ die Boltzmann Konstante bezeichnet. Damit finden wir

$$w_\nu(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T d\nu . \quad (7.9)$$

Dieses *Rayleigh-Jeans Gesetz* reproduziert die spektrale Energiedichte gut für kleine Frequenzen (siehe Fig. 7.1), aber ist im kompletten Widerspruch mit den experimentellen Daten (Existenz eines Maximums, Verlauf für große Frequenzen). Weiterhin ergibt sich für die Gesamtenergie

$$w_\nu(T) = \int_0^\infty w_\nu(\nu, T) d\nu = \int_0^\infty \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T d\nu . \quad (7.10)$$

Dies ist aber ein divergentes Integral. Dieses Ergebnis ist unter dem Namen Ultraviolett-Katastrophe bekannt.

Berechnung nach Planck: Um das Problem der Ultraviolett-Katastrophe zu lösen, schlug Planck 1900 einen anderen Ausdruck der spektralen Energiedichte vor, der in perfekter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten ist. Er ging von folgenden Überlegungen aus:

- Die Atome der Wand können Energie nur in Form von diskreten Energiepaketen

$$E_n = n\epsilon_0 , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.11)$$

austauschen.

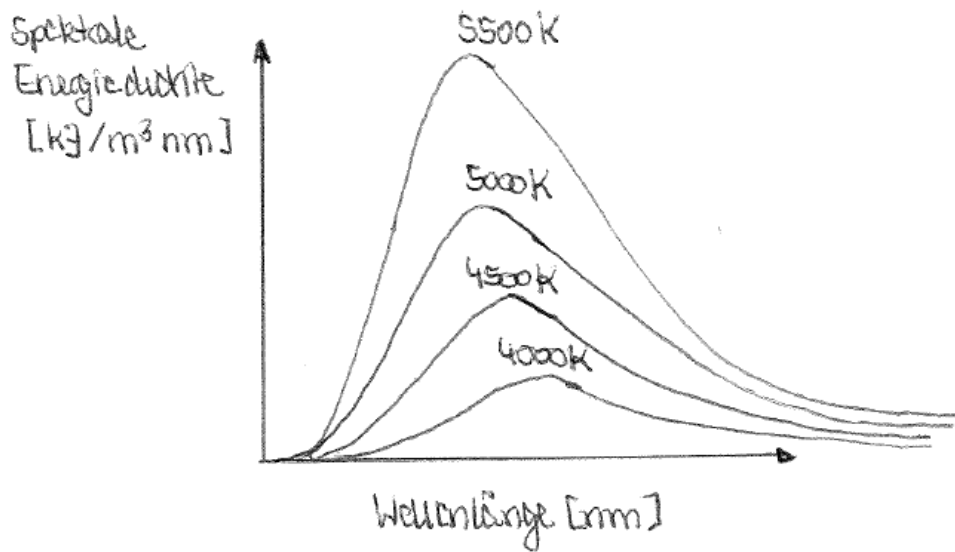


Abbildung 7.1: Schwarzkörperstrahlung.

- Das elementare Energiepaket ϵ_0 einer Strahlung mit Frequenz ν ist

$$\epsilon_0 = h\nu, \quad (7.12)$$

wobei h die Plancksche Wirkungskonstante

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad (7.13)$$

bezeichnet.

Wir haben insgesamt $N(n)$ Oszillatoren im Zustand $E_n = n\epsilon_0$. Somit ist die Gesamtenergie

$$E = \sum_{n=0}^{\infty} N(n)n\epsilon_0. \quad (7.14)$$

Die mittlere Energie pro Oszillator ist

$$\bar{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} N(n)n\epsilon_0}{\sum_{n=0}^{\infty} N(n)}, \quad (7.15)$$

anstatt von $k_B T$. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Energieniveau $E_n = n\epsilon_0$ eingenommen wird, ist durch die Boltzmann Verteilung gegeben. Somit ist die mittlere Besetzungszahl $N(n)$

$$N(n) \sim e^{-\beta n\epsilon_0}, \quad (7.16)$$

wobei $\beta = 1/k_B T$. Also haben wir

$$\bar{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\epsilon_0 e^{-\beta n\epsilon_0}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n\epsilon_0}} = -\frac{d}{d\beta} \ln \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n\epsilon_0} \right). \quad (7.17)$$

Wir haben für $\beta, \epsilon_0 > 0$ eine geometrische Reihe

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n \epsilon_0} = \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-\beta \epsilon_0})^n = \frac{1}{1 - e^{-\beta \epsilon_0}}. \quad (7.18)$$

Damit ist

$$\bar{E} = \frac{\epsilon_0}{e^{\beta \epsilon_0} - 1} \neq k_B T! \quad (7.19)$$

Wir ersetzen \bar{E} im Rayleigh-Jeans Gesetz durch diese Formel und finden mit $\epsilon_0 = h\nu$ dann

$$w_\nu = \frac{8\pi\nu^3}{c^3} \frac{h}{e^{\beta h\nu} - 1}. \quad (7.20)$$

Die Formel enthält die beiden Grenzfälle

$$h\nu \ll k_B T : w_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T \quad \text{Rayleigh-Jeans Gesetz} \quad (7.21)$$

$$h\nu \gg k_B T : w_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} e^{-\frac{h\nu}{k_B T}} \quad \text{Wien'sches Gesetz.} \quad (7.22)$$

Integration über sämtliche Frequenzen liefert

$$w_\nu(T) = \frac{8\pi^5 k_B^4}{15c^3 h^3} T^4. \quad (7.23)$$

Dies ist das Stefan-Boltzmann Gesetz.

7.1.2 Welle-Teilchen Dualismus

Licht hat sowohl Wellen- als auch Teilcheneigenschaften. Welche dieser Eigenschaften es hat, hängt von der jeweiligen experimentellen Situation ab. Wir reden vom Welle-Teilchen-Dualismus.

Interferenz von Lichtwellen

Wir bestrahlen einen Doppelspalt (Abstand d), siehe Fig. 7.2, mit kohärentem Licht, also mit monochromatischem Licht der Wellenlänge λ mit hinreichend langen Wellenpaketen. Falls der Weglängenunterschied der von den jeweiligen Spalten ausgehenden Lichtstrahlen

$$g = m\lambda \quad (7.24)$$

beträgt, so beobachtet man in der Raumrichtung α ,

$$g = d \sin \alpha \quad \Rightarrow \quad \sin \alpha = \frac{m\lambda}{d} \quad (7.25)$$

konstruktive Interferenz, d.h. Maxima der Intensität. Dies und viele ähnliche Phänomene sind ein klarer Hinweis für den Wellencharakter des Lichts.

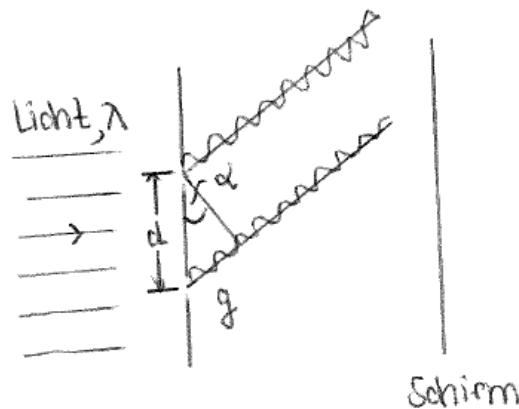


Abbildung 7.2: Doppelspalt-Versuch.

Photoelektrischer Effekt

Beim photoelektrischen Effekt (Heinrich Hertz, 1887, Karlsruhe), siehe Fig. 7.3, wird eine Kathode mit Licht bestrahlt. Es werden Elektronen herausgeschlagen, welche sich aufgrund ihrer kinetischen Energie E_{kin} zur Anode bewegen. Der Photostrom wird mit Hilfe eines Ampèremeters gemessen. Wird eine von 0 verschiedene Gegenspannung U_g angelegt, so müssen die Elektronen zusätzlich zu ihrer Austrittsarbeit W_A auch das erzeugte elektrische Feld überwinden. Die Anode wird erreicht für

$$eU_g = \text{kinetische Energie der Elektronen} . \quad (7.26)$$

Es werden folgende Beobachtungen gemacht:

- Der Photoeffekt tritt nur für Licht oberhalb einer Grenzfrequenz ν_g auf.
- Die kinetische Energie E_{kin} der Elektronen hängt nur von der Frequenz ν ab und nicht von der Intensität des Lichts, wie man von einem klassischen Feld erwartet hätte.

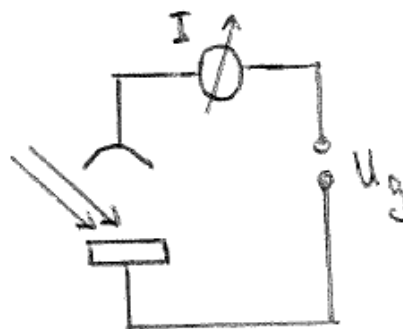


Abbildung 7.3: Versuchsaufbau Photoelektrischer Effekt.

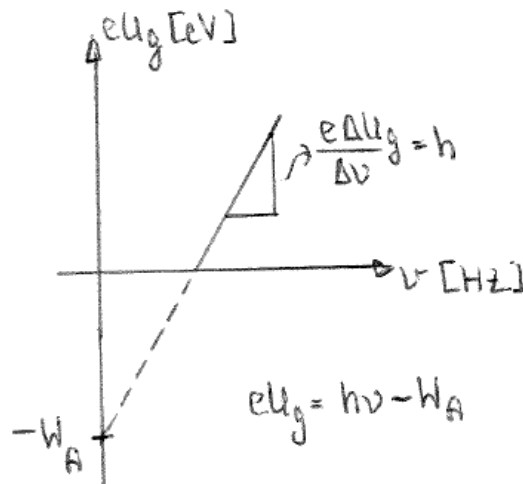


Abbildung 7.4: Kinetische Energie der Elektronen in Abhängigkeit von der Frequenz des Lichts.

- Oberhalb der Frequenz ν_g , also für $\nu > \nu_g$, ist die Anzahl der ankommenden Elektronen proportional zur Intensität.
- Der Effekt erfolgt instantan. Es kann also keine Energie aufgesammelt werden.

Diese Beobachtungen können mit Hilfe der Lichtquantenhypothese von Einstein (1905) erklärt werden. Das Licht besteht aus einem Strom von Teilchen, den *Photonen*, die Energie in Form von Quanten

$$E = h\nu \quad (7.27)$$

tragen. Damit ergibt sich für den Photoeffekt folgende Energiebilanz,

$$h\nu = E_{\text{kin}} + W_A . \quad (7.28)$$

Die Deutung des Lichts als Teilchen ermöglicht es, die Beobachtungen zu erklären. Aus der Bestimmung der Gegenspannung $U_g = E_{\text{kin}}/e$, ab der jeweils kein Strom mehr fließt, in Abhängigkeit von der Frequenz des Lichts kann sowohl h (Steigung der Geraden, Fig. 7.4) als auch W_A ermittelt werden.

7.1.3 Atomphysik

Im Rutherfordschen Atommodell (1911) umkreisen negativ geladene Elektronen den positiv geladenen Atomkern planetenartig mit sehr kleinem Radius. Das Problem hierbei ist, dass der Elektronenumlauf auf gekrümmten Bahnen eine beschleunigte Bewegung darstellt. Die Elektronen müssten deshalb wie ein Hertzscher Dipol ständig Energie abstrahlen und spiralförmig in den Kern stürzen. Die Umlauffrequenz würde kontinuierlich variieren, so dass ein kontinuierliches Emissionsspektrum von Licht zu erwarten wäre. Statt dessen jedoch beobachtet man in den Experimenten diskrete Emissionslinien. Beim Wasserstoffatom entsprechen diese der verallgemeinerten Balmer-Formel

$$h\nu = Ry \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) , \quad (7.29)$$

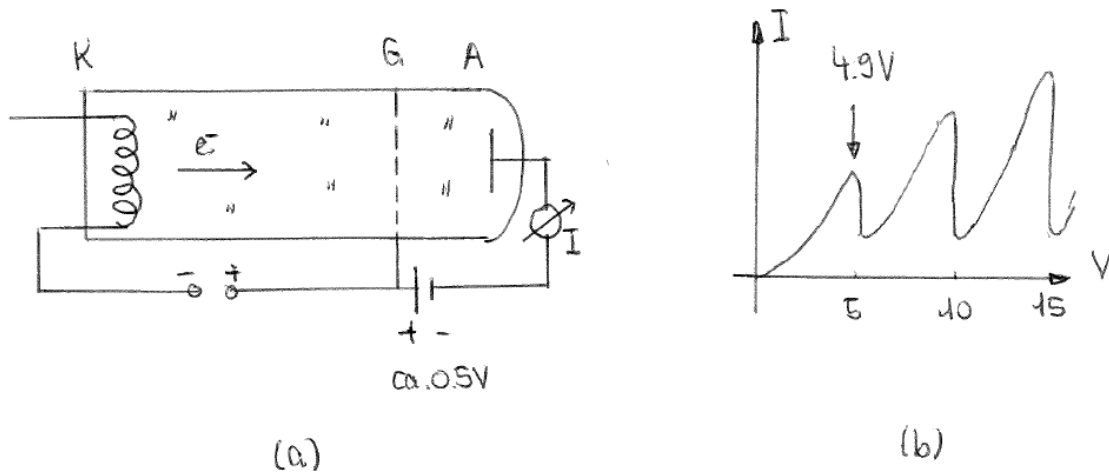


Abbildung 7.5: (a) Franck-Hertz Versuchsanordnung: K - Kathode, G - Gitter, A - Anode. (b) Stromverlauf.

wobei Ry die Rydberg-Konstante bezeichnet und n und m natürliche Zahlen sind. Um dies zu erklären, führte Bohr 1913 eine Quantisierungsbedingung ein. Er postulierte als stationäre Zustände diejenigen klassischen Bahnen, für welche der Drehimpuls ein ganzzahliges Vielfaches des reduzierten Planckschen Wirkungsquantums ($\hbar = h/(2\pi)$) ist. Ferner ist die Emission (und Absorption) von Lichtquanten nur für bestimmte diskrete Energien erlaubt,

$$h\nu = E_m - E_n . \quad (7.30)$$

Diese Quantenhypothese für die Elektronenbahnen wird durch den Franck-Hertz Versuch gestützt. Bei diesem Versuch, siehe Fig. 7.5, werden die von der Kathode emittierten Elektronen im elektrischen Feld zwischen Kathode und Gitter beschleunigt. Anschließend müssen sie eine kleine Gegenspannung durchlaufen, bevor sie die Anode erreichen. Die Röhre ist mit Quecksilberdampf gefüllt. Wird die Spannung zwischen K und G erhöht, so steigt der Strom zunächst an. Wenn die kinetische Energie der Elektronen am Gitter schließlich groß genug ist, um beim Stoß ein Quecksilberatom vom Grundzustand in den ersten angeregten Zustand zu überführen, so verlieren sie größtenteils ihre kinetische Energie und können die Anode wegen der negativen Gegenspannung nicht mehr erreichen. Dies geschieht bei etwa 5V Spannung das erste Mal. Bei 10V findet der Anregungsprozeß auf halbem Weg zwischen Anode und Gitter statt und ein zweites Mal beim Gitter. Es können also nur ganz bestimmte Elektronenenergien von den Quecksilberatomen aufgenommen werden. Die Frequenz des abgestrahlten Lichts entspricht dieser Energie.

7.1.4 Teilchenwellen

Die Dualität, die für Lichtwellen gefunden wurde, gilt auch für die konventionellen Teilchen der klassischen Physik. So haben Davisson und Germer mit Elektronen Beugungsexperimente durchgeführt. Durchsetzt z.B. ein Materiestrahl aus Elektronen ein Kristallgitter, so treten Interferenzerscheinungen auf, ganz so wie bei der Optik für sichtbares Licht, siehe Fig. 7.6.

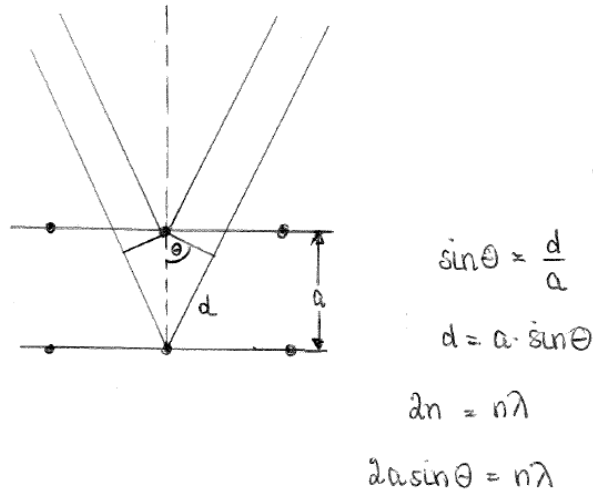


Abbildung 7.6: Die Bragg-Bedingung für konstruktive Interferenz.

So ordnete *de Broglie* in seiner 1923 aufgestellten Hypothese einem Teilchen mit Gesamtenergie E und Impuls \vec{p} eine Frequenz

$$\nu = \frac{E}{h} \quad (7.31)$$

und eine Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (7.32)$$

zu. Und in Vektorschreibweise haben wir

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}, \quad (7.33)$$

wobei \vec{k} der Wellenvektor der Materiewelle ist, der ihre Ausbreitungsrichtung angibt und den Betrag $k = 2\pi/\lambda$ hat, und \hbar das reduzierte Planck'sche Wirkungsquantum,

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054 \cdot 10^{-34} \text{ Js}, \quad (7.34)$$

bezeichnet.

7.2 Schrödinger-Gleichung

7.2.1 Die Wellenfunktion und ihre Wahrscheinlichkeitsinterpretation

Dem Elektron kommen also auch Welleneigenschaften zu, wie wir gesehen haben. Die Welle, die das Elektron beschreibt, sei $\psi(\vec{x}, t)$. Im Einklang mit den Beugungsexperimenten kann diese Welle für freie Elektronen mit Impuls \vec{p} und Energie $E = \vec{p}^2/(2m)$ als freie ebene Welle angesetzt werden,

$$\psi(\vec{x}, t) = C e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)} \quad \text{mit} \quad \omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}. \quad (7.35)$$

Um zu verstehen, welche physikalische Bedeutung diese Wellenfunktion hat, machen wir ein idealisiertes Beugungsexperiment, d.h. ein Gedankenexperiment. Licht, bzw. Photonen, treffen auf eine Blende mit Doppelspalt, siehe Fig. 7.7. Eine Photoplatte in der Schirmebene dahinter gibt Informationen über das von den auftreffenden Photonen erzeugte Bild. Zunächst ist jeweils einer der beiden Spalte geschlossen. Es ergibt sich die Verteilung $\rho_1(x)$ bzw. $\rho_2(x)$ auf dem Schirm. Wenn beide Spalte offen sind, so entsteht ein Interferenzbild. Die Intensität ist dort verstärkt, wo die Wegdifferenz Δl der beiden Strahlen ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge λ beträgt, $\Delta l = n\lambda$. Aufgrund der Interferenz gilt für die Intensitäten $\rho(x) \neq \rho_1(x) + \rho_2(x)$. Von Spalt 1 geht eine elektromagnetische Welle mit elektrischem Feldvektor $\vec{E}_1(\vec{x}, t)$ aus, und von Spalt 2 eine mit $\vec{E}_2(\vec{x}, t)$. Ist nur der Spalt 1 geöffnet, so ist die Intensitätsverteilung am Schirm gegeben durch $I_1(\vec{x}) = |\vec{E}_1(\vec{x}, t)|^2$. Für den Fall, dass Spalt 2 geöffnet ist, haben wir $I_2(\vec{x}) = |\vec{E}_2(\vec{x}, t)|^2$. Sind beide Spalte offen, so überlagern sich die beiden Wellen,

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \vec{E}_1(\vec{x}, t) + \vec{E}_2(\vec{x}, t). \quad (7.36)$$

Die Gesamtintensität ist dann

$$I = |\vec{E}(\vec{x}, t)|^2 = I_1 + I_2 + 2\text{Re}(\vec{E}_1^* \vec{E}_2) \neq I_1 + I_2. \quad (7.37)$$

Bei dem dritten Term handelt es sich um den Interferenzterm.

Wenn die Quelle die Photonen einzeln nacheinander emittiert, so werden weder die Vorhersagen der Wellentheorie noch die der Teilchentheorie durch die Beobachtung bestätigt. Belichtet man einen Film auf dem Schirm so lange, dass man bei jeder Aufnahme viele Photonen erhält, so sieht man nach der Entwicklung, dass die Interferenzstreifen nach wie vor auftreten. Damit ist eine reine Teilcheninterpretation nicht möglich. Belichtet man hingegen den Schirm so kurz, dass auf ihm nur wenige Photonen auftreffen, so sieht man, dass jedes Photon auf dem Schirm einen lokalisierten Stoß macht. Es entsteht keine Interferenzfigur,

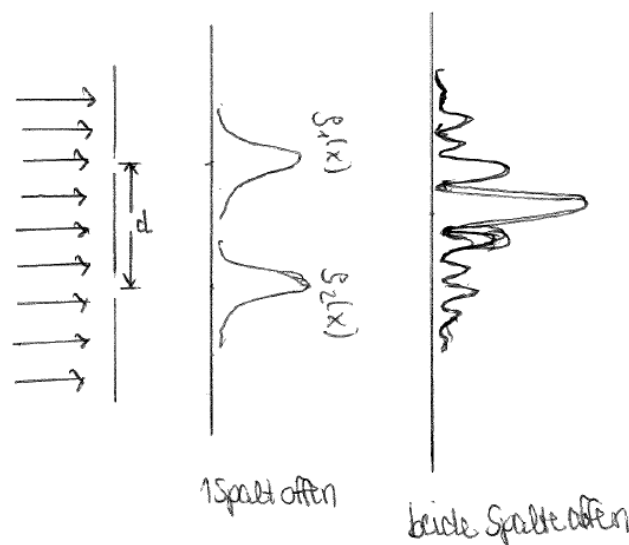


Abbildung 7.7: Licht fällt auf einen Doppelspalt.

und eine Welleninterpretation ist nicht möglich. Die Stöße der auftreffenden Photonen zeigen eine Zufallsverteilung. Erst wenn man eine genügend große Anzahl hat, nimmt diese Verteilung einen kontinuierlichen Aspekt an, und die Dichte der Stöße in jedem Punkt des Schirms entspricht den Interferenzstreifen.

Will man feststellen, durch welchen Spalt ein Photon gegangen ist, das auf dem Schirm auftrifft, so kann man das dadurch tun, dass man hinter dem jeweiligen Spalt einen Detektor (Photomultiplier) anbringt. Die auf diese Weise registrierten Photonen werden jedoch absorbiert und erreichen den Schirm nicht. Nimmt man daher z.B. den Detektor hinter dem Schirm 1 weg, so findet man mit Hilfe von Detektor 2, dass bei einer großen Anzahl von Photonen etwa die Hälfte durch den Spalt 2 geht. Die anderen Photonen gehen also durch Spalt 1. Jedoch entsteht nun auf dem Schirm kein Interferenzmuster mehr, da ja Spalt 2 abgedeckt ist. Dies zeigt eine neue Eigenschaft bei mikroskopischen Systemen: Die Messung an einem mikroskopischen System stört dieses.

Wir haben gesehen, dass das Verhalten eines Photons davon abhängt, ob der andere Spalt geöffnet ist oder nicht. Sobald wir versuchten, das Photon nach seinem Durchgang durch den Spalt nachzuweisen, erreichte dieses den Schirm nicht mehr. Es ist also unmöglich, ein Interferenzmuster zu beobachten und gleichzeitig zu wissen, durch welchen Spalt das Photon getreten ist. Andererseits erzeugen die einzelnen auf dem Schirm auftreffenden Photonen ein Interferenzmuster. Da alle Photonen unter denselben Bedingungen emittiert werden, weiß man also nicht mit Sicherheit im voraus, wo das Photon auf dem Schirm auftreffen wird. Man kann nur sagen, das ein Photon nach seiner Emission mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit an der Stelle x auftrifft. Diese ist proportional zur Intensität $I(x)$, also zu $|\vec{E}(\vec{x}, t)|^2$. All diese und andere Beobachtungen führten schließlich zu folgenden Interpretationen:

- Der Wellen- und Teilchenaspekt sind untrennbar miteinander verbunden. So verhält sich Licht zugleich wie eine Welle und wie ein Teilchenstrom. Die Welle erlaubt die Berechnung der Wahrscheinlichkeit, mit der ein Teilchen in Erscheinung tritt.
- Über das Verhalten eines Photons, oder allgemein eines Teilchens, kann man nur Wahrscheinlichkeitsaussagen machen.
- Die Information über ein Teilchen zum Zeitpunkt t wird durch die Wellenfunktion gegeben. Die Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ wird als Wahrscheinlichkeitsamplitude für das Auftreten eines Teilchens zum Zeitpunkt t am Ort \vec{x} interpretiert. Die zugehörige Wahrscheinlichkeitsverteilung ist durch $|\psi(\vec{x}, t)|^2$ gegeben. Und es ist dann $|\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$ die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t am Ort \vec{x} im Volumenelement d^3x zu finden.

7.2.2 Die Schrödingergleichung

Wir suchen nun eine Bewegungsgleichung für ein freies Teilchen. Wenn wir der Hypothese von de Broglie folgen, so müssen die Betrachtungen für Photonen (Doppelspaltexperiment) auf die materiellen Teilchen übertragen werden. Wir müssen also das klassische Konzept der Bahn eines Teilchens ersetzen durch den Begriff des von der Zeit t abhängigen Zustands. Der Quantenzustand eines Teilchens wird hierbei durch eine Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$ beschrieben. Sie enthält die gesamte Information, die man über das Teilchen haben kann. Die Bewegungsgleichung muss folgende Forderungen erfüllen:

1. Sie muss eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit sein. Damit kann $\psi(\vec{x}, t)$ eindeutig aus einem Anfangszustand $\psi(\vec{x}, t_0)$ bestimmt werden.

2. Sie muss linear in ψ sein, damit das Superpositionsprinzip gilt. Dies besagt, dass Linearkombinationen von Lösungen wiederum Lösungen der Differentialgleichung sind. Damit können Interferenzeffekte beschrieben werden. Außerdem können auch Wellenpakete konstruiert werden, was für die Normierung der Wellenfunktion wichtig ist (siehe unten).
3. Sie muss homogen sein. Damit ist dann

$$\int d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2 = 1 \quad (7.38)$$

für alle Zeiten erfüllt. Die Gleichung besagt, dass die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo im Raum zu finden, 1 ist.

4. Die ebenen Wellen

$$\psi(\vec{x}, t) = C \exp \left\{ i \left(\vec{k}\vec{x} - \omega t \right) \right\} \quad (7.39)$$

sollen Lösungen der Differentialgleichung sein.

Damit erhält man die *zeitabhängige Schrödingergleichung* für freie Teilchen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = H \psi(\vec{x}, t) . \quad (7.40)$$

Bei H handelt es sich um einen Operator. Ganz analog zur Hamiltonfunktion ist der durch die Summe aus kinetischer und potentieller Energie gegeben. Im Fall eines freien Teilchens ist das Potential null. Wir haben damit

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} . \quad (7.41)$$

Bei \vec{p} handelt es sich um den Impuls-Operator. In der Ortsdarstellung (siehe unten) ist er durch

$$\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla} \quad (7.42)$$

gegeben. Somit haben wir für die *zeitabhängige Schrödingergleichung*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{x}, t) . \quad (7.43)$$

Der Laplace-Operator Δ wirkt auf die Wellenfunktion ψ . Einsetzen von ψ aus Glg. (7.39) in Glg. (7.43) liefert

$$\hbar\omega \psi(\vec{x}, t) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \psi(\vec{x}, t) . \quad (7.44)$$

Dies ist erfüllt, da die Energie $E = \hbar\omega$ gleich der kinetischen Energie $\hbar^2 \vec{k}^2 / (2m) = \vec{p}^2 / (2m)$ des freien Teilchens ist. Findet die Bewegung des Teilchens in einem nicht-verschwindenden äußeren Potential statt, so ist der Hamilton-Operator H um dieses Potential zu erweitern. Wir haben dann für die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = H \psi(\vec{x}, t) \quad \text{mit} \quad H = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) . \quad (7.45)$$

Beachte, dass das Potential hier ein Operator ist, der auf ψ wirkt.

7.2.3 Einschub: Operatoren und Skalarprodukt

Wir legen den Raum L^2 der quadratintegriblen Funktionen zugrunde (wegen der Normierungsbedingung).

Definition: Ein *Operator* A ist definiert durch eine Vorschrift so, dass für $\psi(\vec{x})$ aus L^2 folgt

$$A\psi(\vec{x}) = \varphi(\vec{x}) \in L^2 . \quad (7.46)$$

Beispiele:

$$A\psi = \psi^2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \psi, \quad A\psi = e^\psi \psi \quad (\text{nicht-linear}) . \quad (7.47)$$

Definition: A heißt *linearer Operator*, wenn mit $A\psi_1 = \varphi_1$ und $A\psi_2 = \varphi_2$ gilt

$$A(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 , \quad (7.48)$$

wobei c_1, c_2 komplexe Zahlen sind. Beispiele linearer Operatoren sind:

$$x_i, \quad \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad \vec{\nabla}^2, \quad \frac{\partial}{\partial t}, \quad f(\vec{x}, t) \quad \text{als Multiplikator} . \quad (7.49)$$

Zwei spezielle Operatoren sind

$$\text{Einheitsoperator: } 1 \quad 1\psi = \psi \quad (7.50)$$

$$\text{Nulloperator: } 0 \quad 0\psi = 0 . \quad (7.51)$$

Im allgemeinen sind Operatoren nicht kommutativ, $AB \neq BA$. D.h., es ist $AB\psi \neq BA\psi$.

Definition: *Kommutator* $[A, B]$: A, B seien Operatoren. Dann ist der Kommutator durch

$$[A, B] = AB - BA \quad (7.52)$$

definiert. Verschwindet der Kommutator zweier Operatoren, so sagt man: Die beiden Operatoren kommutieren (vertauschen) miteinander.

Skalarprodukt: *Skalarprodukt* (φ, ψ) : Das Skalarprodukt zweier Wellenfunktionen ψ und φ ist durch

$$(\varphi, \psi) := \int d^3x \varphi^*(x) \psi(x) \quad (7.53)$$

definiert. Es besitzt folgende Eigenschaften

$$(\varphi, \psi)^* = (\psi, \varphi) \quad (7.54)$$

$$(\varphi, c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1(\varphi, \psi_1) + c_2(\varphi, \psi_2) \quad (7.55)$$

$$(c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2, \psi) = c_1^*(\varphi_1, \psi) + c_2^*(\varphi_2, \psi) . \quad (7.56)$$

Des weiteren gilt

$$(\varphi, \varphi) \geq 0, \quad \text{und somit} \quad (\varphi, \varphi) = 0 \Leftrightarrow \varphi \equiv 0 . \quad (7.57)$$

Operatoren im Skalarprodukt:

$$(\varphi, A\psi) = \int d^3x \varphi^*(x) A\psi(x) . \quad (7.58)$$

Definition: A^\dagger heißt “zu A adjungierter Operator”, wenn gilt

$$(A^\dagger \varphi, \psi) = (\varphi, A\psi), \quad \text{d.h.} \quad \int d^3x (A^\dagger \varphi)^* \psi = \int d^3x \varphi^* A\psi, \quad (7.59)$$

für beliebige φ und ψ .

Definition: Der Operator A heißt *hermitesch* (auch selbstadjungiert), wenn $A^\dagger \equiv A$.

Es gilt

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger. \quad (7.60)$$

7.2.4 Normierung der Wellenfunktion

Damit die Wahrscheinlichkeitsinterpretation angewandt werden kann, muss die Wellenfunktion normierbar sein, d.h. es muss gelten

$$\int d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2 < \infty. \quad (7.61)$$

Wegen der Deutung von $|\psi(\vec{x}, t)|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte kommt es auf eine globale Phase $\psi = \psi e^{i\varphi}$ nicht an. Die relative Phase zweier Lösungen ist jedoch bei der Beschreibung von Interferenz-Phänomenen wichtig!

Wenn wir die ebene Welle normieren wollen, so erhalten wir

$$\int d^3x |\psi(\vec{x}, t)|^2 = \int d^3x |C|^2 e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega t)} e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega t)} = |C|^2 \int d^3x \rightarrow \infty. \quad (7.62)$$

Das Problem kann durch die Einführung von Wellenpaketen gelöst werden. Hierzu nutzen wir das Superpositionsprinzip aus, das auf der Linearität der Schrödinger-Gleichung beruht. Damit ist auch die folgende Überlagerung von ebenen Wellen wieder eine Lösung,

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} a(\vec{k}) \sum_{\omega} b(\omega) e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}. \quad (7.63)$$

Bei kontinuierlichem \vec{k} und ω geht diese Fourier-Reihe in eine Fouriertransformation über,

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d^3k d\omega \tilde{\psi}(\vec{k}, \omega) e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}. \quad (7.64)$$

Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung ($H = -\hbar^2/(2m)\Delta$)

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (7.65)$$

liefert

$$\int d^3k d\omega \tilde{\psi}(\vec{k}, \omega) \left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} = 0. \quad (7.66)$$

Daraus folgt

$$\tilde{\psi}(\vec{k}, \omega) = \tilde{\psi}(\vec{k}) \underbrace{\delta(\omega - \omega(\vec{k}))}_{\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}. \quad (7.67)$$

Damit ist also¹

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d^3k \tilde{\psi}(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega(\vec{k})t)}. \quad (7.68)$$

Hierbei handelt es sich um ein Wellenpaket. Dabei ist $\tilde{\psi}(\vec{k})$ die Amplitudenfunktion. Diese wird so gewählt, dass als Resultat auch $\psi(\vec{r}, t)$ in einem Raumbereich beschränkt ist. Wir betrachten hierzu als einfaches Beispiel im Eindimensionalen

$$\tilde{\psi}(\vec{k}) = \begin{cases} \tilde{\psi}_0 & \text{für } k_0 - \Delta k_0 < k_0 < k_0 + \Delta k_0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (7.69)$$

Damit erhalten wir (eindimensional)

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int dk \tilde{\psi}(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} \\ &= \tilde{\psi}_0 \int_{k_0 - \Delta k_0}^{k_0 + \Delta k_0} e^{i(kx - \omega(k)t)} dk. \end{aligned} \quad (7.70)$$

Wir betrachten ein kleines Intervall $\Delta k_0/k_0 \ll 1$. Damit können wir $\omega(k)$ um k_0 entwickeln,

$$\omega(k) = \hbar \frac{k^2}{2m} = \frac{\hbar k_0^2}{2m} + \frac{\hbar k_0}{m} (k - k_0) + \dots = -\frac{\hbar k_0^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} k k_0 + \dots \quad (7.71)$$

Wir behalten den Term bis zu linearer Ordnung in k und erhalten

$$\omega(k) \approx -\frac{\hbar k_0^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} k_0 k. \quad (7.72)$$

Damit ist

$$\psi(x, t) = \tilde{\psi}_0 \int_{k_0 - \Delta k_0}^{k_0 + \Delta k_0} dk e^{i\left(kx + \frac{\hbar k_0^2}{2m}t - \frac{\hbar k_0}{m}kt\right)} \quad (7.73)$$

$$= \tilde{\psi}_0 e^{i\frac{\hbar k_0^2}{2m}t} \int_{k_0 - \Delta k_0}^{k_0 + \Delta k_0} e^{i\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)k} dk. \quad (7.74)$$

Wir definieren

$$c \equiv x - \frac{\hbar k_0}{m}t \quad (7.75)$$

und betrachten weiter

$$\begin{aligned} \int_{k_a}^{k_b} e^{ick} dk &= \frac{1}{ic} e^{ick} \Big|_{k_a}^{k_b} = \frac{1}{ic} (e^{ick_b} - e^{ick_a}) \\ &= \frac{e^{i\frac{c}{2}(k_a+k_b)}}{ic} \underbrace{\left(e^{\frac{i(k_b-k_a)c}{2}} - e^{-\frac{i(k_b-k_a)c}{2}} \right)}_{=2i \sin \frac{k_b-k_a}{2}c} \\ &= \frac{2e^{ic\frac{k_a+k_b}{2}}}{c} \sin \left(\frac{k_b - k_a}{2}c \right). \end{aligned} \quad (7.76)$$

¹Zur Erinnerung: $\int f(x)\delta(x-x_0)dx = f(x_0)$

Damit finden wir

$$\psi(x, t) = 2\tilde{\psi}_0 e^{i\frac{\hbar k_0^2}{2m}t} e^{i(x - \frac{\hbar k_0}{m}t)k_0} \Delta k_0 \frac{\sin(\Delta k_0(x - \frac{\hbar k_0}{m}t))}{\Delta k_0(x - \frac{\hbar k_0}{m}t)}. \quad (7.77)$$

Hierbei ist die Gruppengeschwindigkeit, die die Geschwindigkeit des Maximums der Wellenfunktion beschreibt, gegeben durch

$$v_g = \frac{\hbar k_0}{m}. \quad (7.78)$$

Wir definieren

$$x(t) = x - v_g t \quad (7.79)$$

und betrachten

$$\frac{\sin(\Delta k_0 x(t))}{\Delta k_0 x(t)} = \frac{\sin y}{y}. \quad (7.80)$$

Für kleine y haben wir

$$\sin y \approx y + \dots \quad \text{für} \quad y \approx 0. \quad (7.81)$$

Damit ist

$$\lim_{y \rightarrow 0} \frac{\sin y}{y} = 1. \quad (7.82)$$

Für große y hingegen fällt das Maximum der Sinus-Funktion proportional zu $1/y$ ab. Wir erhalten für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$$|\psi|^2 \sim \frac{\sin^2(\Delta k_0(x - v_g t))}{(\Delta k_0(x - v_g t))^2}. \quad (7.83)$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist im wesentlichen auf

$$-\pi < \Delta k_0 x(t) < \pi \quad (7.84)$$

beschränkt, also

$$\Delta k_0(x_A - x_E) = 2\pi = \Delta x \Delta k_0. \quad (7.85)$$

Das bedeutet: Je genauer der Impuls bekannt ist, desto unschärfer ist der Ort, und umgekehrt. Die Gleichung ist ein Spezialfall der allgemeinen Relation²

$$\Delta x \Delta p \geq h. \quad (7.86)$$

²Im folgenden (in den Übungen) wird die Heisenbergsche Unschärferelation hergeleitet werden, die von ähnlicher Form ist.

7.2.5 Vertauschungsrelation, Korrespondenzprinzip

Die Unschärferelation steht im Zusammenhang mit der Vertauschungsrelation von Ort und Impuls

$$[p_x, x] = p_x x - x p_x . \quad (7.87)$$

Anwenden auf die Wellenfunktion liefert

$$\begin{aligned} [p_x, x]\psi(\vec{r}, t) &= \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} x - x(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \right) \psi(\vec{r}, t) \\ &= -i\hbar \left(\left(\frac{\partial}{\partial x} x \right) \psi + x \frac{\partial}{\partial x} \psi - x \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) = -i\hbar \psi(\vec{r}, t) . \end{aligned} \quad (7.88)$$

Daraus folgt die fundamentale Vertauschungsrelation

$$-[p_x, x] = [x, p_x] = i\hbar . \quad (7.89)$$

Bei der Besprechung der Schrödinger-Gleichung haben wir gesehen, dass die Anwendung von $-i\hbar \vec{\nabla}$ auf die ebene Wellenfunktion den Impuls \vec{p} liefert. Ebenso liefert Anwenden von $i\hbar \partial/\partial t$ auf ψ die Energie $E = \hbar\omega$. Es gilt also das *Korrespondenzprinzip*

$$\begin{aligned} \text{Impuls } \vec{p} &\rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \\ \text{Energie } E &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \end{aligned} \quad (7.90)$$

Die Energie-Impuls-Beziehung

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (7.91)$$

kann mit dem Korrespondenzprinzip aber nur nach Anwendung auf Zustände

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi \quad (7.92)$$

abgeleitet werden. Dies ist dann wiederum gerade die Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen. Aus der klassischen Energie-Impuls-Beziehung, also der klassischen Hamiltonfunktion für freie Teilchen, haben wir so die Schrödinger-Gleichung der freien Teilchen erhalten.

Die Vertauschungsrelation (7.89) wurde durch Anwenden von Orts- und Impulsoperator auf die Wellenfunktion abgeleitet. Wir können sie so interpretieren, dass nicht vertauschbare 'Observable', hier Ort und Impuls, nicht gleichzeitig genau gemessen werden können.

7.2.6 Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

Bisher haben wir nur die Schrödinger-Gleichung des freien Teilchens betrachtet. Wir können aber auch die Bewegung eines Teilchens in einem Potential $V(\vec{r}, t)$ betrachten. Damit ist die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H \psi(\vec{r}, t) , \quad \text{mit } H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r, t) . \quad (7.93)$$

Falls das Potential zeitunabhängig ist ($V = V(r)$), dann hängt der Hamiltonoperator H nur noch von Ortsoperatoren ab. Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung kann dann zur

zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung vereinfacht werden. Hierzu wählt man den Separationsansatz

$$\psi(\vec{r}, t) = \chi(t)\varphi(\vec{r}) . \quad (7.94)$$

Einsetzen in die Schrödingergleichung liefert

$$\varphi(\vec{r})i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi(t) = \chi(t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) \right) \varphi(\vec{r}) . \quad (7.95)$$

Teilen durch ψ liefert

$$\frac{i\hbar\partial_t\chi(t)}{\chi(t)} = \frac{H\varphi(\vec{r})}{\varphi(\vec{r})} . \quad (7.96)$$

Die linke Seite hängt nur von t ab, die rechte Seite nur von \vec{r} . Damit müssen beide gleich einer Konstanten sein. Wir setzen diese gleich E . Somit erhalten wir für den zeitabhängigen Teil

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi(t) = E\chi(t) . \quad (7.97)$$

Die Lösung hiervon ist

$$\chi(t) = \chi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}Et} . \quad (7.98)$$

Der ortsabhängige Teil liefert die

$$\text{Zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung: } H\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}) . \quad (7.99)$$

7.3 Eindimensionale Rechteckpotentiale

Die Potentiale, die die Wirkung von äußeren Kräften beschreiben, sind mitunter recht kompliziert. Jedoch hat man in der Kern- und auch der Festkörperphysik oft Potentiale, die in Regionen zerfallen, innerhalb derer sie relativ konstant sind. Der Übergang von einem Bereich zum anderen erfolgt innerhalb sehr kurzer Distanzen. Im folgenden soll im Rahmen dieser Idealisierungen die Bewegung in Potentialstufen und ähnlichem untersucht werden. Zur Vereinfachung betrachten wir nur eindimensionale Potentiale.

7.3.1 Allgemeine Eigenschaften

Das Potential $V(x)$ ist bei einem Rechteckpotential innerhalb eines bestimmten Raumbereichs konstant. Also $V(x) = V$. Die dazugehörige Differentialgleichung der Wellenfunktion lautet dann

$$\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\varphi(x) = 0 . \quad (7.100)$$

Hierbei sind folgende Fälle zu unterscheiden:

Fall 1: $E > V$: Wir definieren die Konstante k durch

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E - V . \quad (7.101)$$

Da $E - V > 0$ ist $k^2 > 0$ und damit k reell. Die allgemeine Lösung von (7.100) ist damit gegeben durch

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} . \quad (7.102)$$

Dabei sind A, B Konstanten, die aus den (unten angegebenen) Randbedingungen zu bestimmen sind.

Fall 2: $E < V$: Wir sind hier nun in Raumbereichen, die gemäß den Gesetzen der klassischen Physik verboten wären. Wir definieren nun die Konstante ρ durch

$$\frac{\hbar^2 \rho^2}{2m} = V - E . \quad (7.103)$$

Diese ist aufgrund $V - E > 0$ positiv. Die allgemeine Lösung ist nun gegeben durch

$$\varphi(x) = Ce^{\rho x} + De^{-\rho x} , \quad (7.104)$$

wobei C und D zu bestimmende Konstanten sind.

Fall 3: $E = V$: In diesem Fall ist $\varphi(x)$ eine lineare Funktion in x .

7.3.2 Anschlußbedingungen

Sei $V(x)$ ein eindimensionales Potential mit einer Unstetigkeit bei $x = a$. Das Rechteckpotential kann als Grenzwert eines Potentials V_δ aufgefasst werden, das außerhalb des Intervalls $[a - \delta, a + \delta]$ mit $V(x)$ übereinstimmt, sich innerhalb des Intervalls aber stetig ändert. Wir betrachten die Gleichung

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi_\delta(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V_\delta(x)] \varphi_\delta(x) = 0 . \quad (7.105)$$

Dabei soll V_δ im Intervall $[a - \delta, a + \delta]$ für alle δ beschränkt sein. Ferner nehmen wir an, dass φ_δ in der Umgebung von $x = a$ für jedes δ beschränkt ist. Integration von Glg. (7.105) zwischen $a - \delta$ und $a + \delta$ liefert

$$\left. \frac{d\varphi_\delta}{dx} \right|_{a+\delta} - \left. \frac{d\varphi_\delta}{dx} \right|_{a-\delta} = \int_{a-\delta}^{a+\delta} \frac{2m}{\hbar^2} (V_\delta(x) - E) \varphi_\delta(x) dx . \quad (7.106)$$

Nach Voraussetzung bleibt der Integrand auf der rechten Seite der Gleichung für $\delta \rightarrow 0$ beschränkt, so dass damit das Integral für $\delta \rightarrow 0$ gegen 0 strebt und somit

$$\left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x \rightarrow a^+} = \left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x \rightarrow a^-} . \quad (7.107)$$

Im Grenzfall ist also $d\varphi/dx$ an der Stelle $x = a$ stetig und damit auch $\varphi(x)$ als Stammfunktion einer stetigen Funktion.³

³Die Voraussetzung der Beschränktheit von V_δ ist hier wesentlich. Falls das Potential von der Form $C\delta(x)$ ist, so bleibt $\varphi(x)$ in diesem Fall stetig, aber die erste Ableitung $d\varphi/dx$ nicht.

7.3.3 Potentialstufe

Wir betrachten eine Potentialstufe, d.h. ein Potential der Form

$$V(x) = V_0 \Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x > 0 \\ 0 & \text{für } x < 0 \end{cases} \quad (7.108)$$

wobei $V_0 \geq 0$ konstant ist. In den Gebieten I und II haben wir dann jeweils die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} I : x < 0 & \quad \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \varphi \\ II : x > 0 & \quad \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = -\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} \varphi \end{aligned} \quad (7.109)$$

Die Stetigkeitsbedingungen an φ und φ' bei $x = 0$ liefern die Relationen zwischen den freien Konstanten der Lösungen im Gebiet I und II . Wir untersuchen die beiden unterschiedlichen physikalischen Situationen mit $E > V_0$ und $E < V_0$.

Teilchenenergie oberhalb der Potentialstufe ($E > V_0$)

Wir definieren die beiden Wellenzahlen k und q und erhalten damit die folgenden Formen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung in Gebiet I und II ,

$$\begin{aligned} I : x < 0 & \quad \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = -k^2 \varphi, \quad \text{mit } k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ II : x > 0 & \quad \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = -q^2 \varphi, \quad \text{mit } q \equiv \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} \end{aligned} \quad (7.110)$$

Hierbei handelt es sich um Schwingungsgleichungen mit den beiden fundamentalen Lösungen

$$e^{iKx}, \quad e^{-iKx}, \quad K = \begin{cases} k, & \text{für } x < 0 \\ q, & \text{für } x > 0 \end{cases} \quad (7.111)$$

Wenn wir voraussetzen, dass das Teilchen von links einfällt, so haben wir in Gebiet I die Überlagerung einer von links einfallenden Welle und einer reflektierten Welle. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit setzen wir die Amplitude der von links einfallenden Welle gleich 1. Die der reflektierten Welle sei R . Im Gebiet II haben wir eine durchgehende Welle mit der Amplitude T . Also haben wir die Lösungen

$$\varphi_I(x) = e^{ikx} + R e^{-ikx} \quad (7.112)$$

$$\varphi_{II}(x) = T e^{iqx}, \quad (7.113)$$

und die Gesamtlösung

$$\varphi(x) = \Theta(-x) \varphi_I(x) + \Theta(x) \varphi_{II}(x). \quad (7.114)$$

Die Koeffizienten werden durch die Stetigkeitsbedingungen bei $x = 0$ bestimmt, die gegeben sind durch

$$\varphi_I(x=0) = \varphi_{II}(x=0) \quad \text{und} \quad \varphi'_I(x=0) = \varphi'_{II}(x=0). \quad (7.115)$$

Diese Stetigkeitsbedingungen liefern

$$1 + R = T \quad \text{und} \quad ik(1 - R) = iqT. \quad (7.116)$$

Damit findet man

$$R = \frac{k - q}{k + q} \quad \text{und} \quad T = \frac{2k}{k + q}. \quad (7.117)$$

Wir wollen diesen beiden Koeffizienten eine physikalische Bedeutung geben. Hierzu betrachten wir die Wahrscheinlichkeitsstromdichten in den Gebieten *I* und *II*. Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte muss zunächst noch eingeführt werden:

Die zeitliche Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte, gegeben durch $|\psi|^2$, ergibt sich aus der Schrödinger-Gleichung zu

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) \equiv \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = \psi^* \dot{\psi} + \dot{\psi}^* \psi = \frac{1}{i\hbar} \psi^* (H\psi) + \frac{1}{-i\hbar} (H\psi^*) \psi. \quad (7.118)$$

Hierbei haben wir ausgenutzt, dass H hermitesch ist. Die Terme mit dem Potential fallen weg, so dass wir

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\hbar}{2mi} [-\psi^* (\Delta\psi) + (\Delta\psi^*) \psi] \quad (7.119)$$

erhalten. Man definiert die *Wahrscheinlichkeitsstromdichte* durch

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* (\vec{\nabla}\psi) - (\vec{\nabla}\psi^*) \psi]. \quad (7.120)$$

Damit erhalten wir die *Kontinuitätsgleichung*

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0. \quad (7.121)$$

Wir erhalten also in den Gebieten *I* und *II* die Wahrscheinlichkeitsstromdichten (*c.c.* bedeutet konjugiert komplex)

$$\begin{aligned} j_I(x) &= \frac{\hbar}{2mi} [(e^{-ikx} + R^* e^{ikx}) ik (e^{ikx} - R e^{-ikx}) - c.c.] \\ &= \frac{\hbar}{2mi} [ik(1 - |R|^2 - R e^{-2ikx} + R^* e^{2ikx}) - c.c.] \\ &= \frac{\hbar k}{m} (1 - |R|^2) \equiv j_{\text{ein}} - j_{\text{refl}} \end{aligned} \quad (7.122)$$

$$j_{II}(x) = \frac{\hbar q}{m} |T|^2 \equiv j_{\text{trans}}. \quad (7.123)$$

Hierbei wurden die Stromdichten in den Gebieten *I* und *II* in eine einfallende, reflektierte und transmittierte Stromdichte zerlegt. Als Reflexions- und Transmissionskoeffizient, r und t , erhält man

$$r \equiv \frac{j_{\text{refl}}}{j_{\text{ein}}} = |R|^2 \quad (7.124)$$

$$t \equiv \frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{ein}}} = \frac{q}{k} |T|^2 \quad (7.125)$$

Wir haben also Folgendes gefunden:

1. Das Teilchen wird mit der Wahrscheinlichkeit r reflektiert. Im klassischen Fall würde keine Reflexion stattfinden. Das Teilchen würde sich rechts der Schwelle lediglich mit kleinerer Geschwindigkeit weiterbewegen. Bei der Reflexion handelt es sich um ein Wellenphänomen, ganz analog zur Reflexion von Licht an der Trennfläche zweier Medien mit unterschiedlichen Brechungsindizes.
2. Im Grenzfall $E \rightarrow \infty$ ($E \gg V_0$) erhält man

$$q \rightarrow k : \quad R \rightarrow 0, \quad T \rightarrow 1. \quad (7.126)$$

Die reflektierte Welle verschwindet also.

3. Es gilt Teilchenzahlerhaltung. Aus Glg. (7.117) folgt

$$\frac{\hbar k}{m}(1 - |R|^2) = \frac{\hbar q}{m}|T|^2 \quad (7.127)$$

und somit

$$j_I = j_{II}, \quad \text{also} \quad j_{\text{ein}} = j_{\text{refl}} + j_{\text{trans}}. \quad (7.128)$$

Es ist also der einfallende Teilchenfluß gleich der Summe von transmittiertem und reflektiertem Teilchenfluß.

Teilchenenergie unterhalb der Potentialstufe ($E < V_0$)

Wir betrachten nun den Fall, dass die Energie E des von links einfallenden Teilchens kleiner als die Höhe V_0 der Potentialstufe ist. Die Schrödinger-Gleichung im Gebiet I bleibt unverändert und wird durch (7.112) gelöst. Im Gebiet II haben wir aber nun die Schrödinger-Gleichung

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \kappa^2\varphi, \quad \text{mit} \quad \kappa \equiv \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \quad (7.129)$$

Die Lösungen dieser Gleichung sind durch exponentiell ansteigende oder abfallende Funktionen gegeben. Um ohne große Rechnung die Lösungen samt Stetigkeitsbedingungen zu finden, ersetzen wir lediglich

$$q = i\kappa \quad (7.130)$$

in den bereits im Fall $E > V_0$ gefundenen Lösungen. Damit lautet die Lösung im Gebiet II ⁴

$$\varphi_{II}(x) = T e^{-\kappa x}. \quad (7.131)$$

Die Reflexions- und Transmissions-Wahrscheinlichkeitskoeffizienten ergeben sich aus (7.117)

$$R = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \quad \text{und} \quad T = \frac{2k}{k + i\kappa}. \quad (7.132)$$

Wir haben damit Folgendes gefunden:

⁴Die im Prinzip auch mögliche Lösung $\sim e^{+\kappa x}$ führt nicht auf endliche Wahrscheinlichkeitsdichten und wird damit als unphysikalisch verworfen.

1. Wir finden

$$|R|^2 = 1 . \quad (7.133)$$

Es tritt also vollständige Reflexion auf.

2. Wegen $T \neq 0$ dringen Teilchen bis zu einer Tiefe κ^{-1} in die Stufe ein. Wie man an Glg. (7.133) und an $j_{II} = 0$ sieht, findet allerdings kein Teilchenfluß nach rechts statt.

Die Gesamtlösung ist gegeben durch

$$\varphi(x) = \left\{ \left(\cos kx - \frac{\kappa}{k} \sin kx \right) \Theta(-x) + e^{-\kappa x} \Theta(x) \right\} \frac{2}{1 + i\kappa/k} . \quad (7.134)$$

Grenzfall einer unendlich hohen Potentialschwelle

Im Grenzfall $V_0 \rightarrow \infty$ geht $\kappa \rightarrow \infty$. Damit ist

$$T = 0 \quad \text{und} \quad R = -1 . \quad (7.135)$$

Damit wird

$$\varphi_I = e^{ikx} - e^{-ikx} . \quad (7.136)$$

Also ist

$$\varphi_I(0) = 0 . \quad (7.137)$$

Daraus ergibt sich die *allgemeine Randbedingung an einer unendlich hohen Schwelle* zu

$$\varphi|_{\text{Schwelle}} = 0 . \quad (7.138)$$

7.3.4 Tunneleffekt, Potentialschwelle

Wir betrachten ein Potential, das bei $x = -a$ eine Schwelle der Höhe V_0 hat, die bei $x = a$ wieder auf 0 abfällt. Wir haben also die Potentialbarriere

$$V(x) = V_0 \Theta(a - |x|) . \quad (7.139)$$

Wir betrachten nur den Fall $E < V_0$. Klassisch würde das Teilchen vollständig von der Barriere reflektiert. Wir haben aber bereits gesehen, dass das Teilchen in der Quantenmechanik in den verbotenen Bereich eindringen kann. Es kann also sein, dass Teilchen auf die andere Seite der Barriere dringen können. Wir können 3 Bereiche angeben, zwei außerhalb der Schelle, einen innerhalb. Die allgemeine Lösung lautet mit den vorigen Überlegungen

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < -a \\ Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x} & -a \leq x \leq a \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} & x > a \end{cases} , \quad (7.140)$$

mit

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{und} \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} . \quad (7.141)$$

Wir haben die folgenden Anschlussbedingungen bei $x = -a$ ($\varphi_I(x = -a) = \varphi_{II}(x = -a)$, $d\varphi_I/dx(x = -a) = d\varphi_{II}/dx(x = -a)$)

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = Ce^{\kappa a} + De^{-\kappa a} \quad (7.142)$$

$$ik(Ae^{-ika} - Be^{ika}) = -\kappa(Ce^{\kappa a} - De^{-\kappa a}) . \quad (7.143)$$

Entsprechend findet man die Anschlussbedingungen bei $x = a$. Damit haben wir 4 Gleichungen für 6 Unbekannte ($A \dots G$). Wie betrachten ein von links einlaufendes Teilchen. Damit ergibt sich $G = 0$. Nach einer kleinen Rechnung (siehe Übung!) findet man

$$A = F(\cosh 2\kappa a + \frac{i\epsilon}{2} \sinh 2\kappa a)e^{2ika} \quad (7.144)$$

$$B = F\frac{-i\eta}{2} \sinh 2\kappa a , \quad (7.145)$$

mit

$$\epsilon = \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa} \quad (7.146)$$

$$\eta = \frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa} . \quad (7.147)$$

Um die Transmission zu charakterisieren, definieren wir die *Transmissionsamplitude* durch

$$S(E) \equiv \frac{F}{A} = \frac{e^{-2ika}}{\cosh 2\kappa a + (i\epsilon/2) \sinh 2\kappa a} . \quad (7.148)$$

Damit ergibt sich der *Durchlässigkeitskoeffizient* zu

$$|S(E)|^2 = \frac{1}{1 + (1 + (\epsilon^2/4)) \sinh^2 2\kappa a} . \quad (7.149)$$

Hier gibt $|S(E)|^2$ die Wahrscheinlichkeit an, dass ein Teilchen, welches auf die Potentialschwelle trifft, diese durchdringt. Im *Grenzfall einer sehr hohen und sehr breiten Barriere* ist $\kappa a \gg 1$. D.h. wir haben dann $\sinh 2\kappa a \approx (1/2)e^{2\kappa a} \gg 1$. Damit ist

$$|S(E)|^2 \approx \left(1 + \frac{\epsilon^2}{4}\right)^{-1} 4e^{-4\kappa a} = \frac{16(\kappa k)^2}{(\kappa^2 + k^2)^2} e^{-4\kappa a} . \quad (7.150)$$

Mit den Definitionen von κ und k ist dies

$$|S(E)|^2 = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp \left\{ -4\sqrt{2m(V_0 - E)}\frac{a}{\hbar} \right\} . \quad (7.151)$$

Hineinziehen des Vorfaktors in den Exponenten liefert

$$|S(E)|^2 = \exp \left\{ -4\sqrt{2m(V_0 - E)}\frac{a}{\hbar} + \log \left(\frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \right) \right\} . \quad (7.152)$$

Vernachlässigen des logarithmischen Terms liefert dann schließlich

$$|S(E)|^2 \approx \exp \left\{ -4\sqrt{2m(V_0 - E)}\frac{a}{\hbar} \right\} . \quad (7.153)$$

Klassisch würde ein Teilchen mit $E < V_0$ von der Barriere reflektiert werden. Quantenmechanisch ergibt sich jedoch auch in diesem Fall eine endliche Durchgangswahrscheinlichkeit, gegeben durch die Gleichungen (7.149) und (7.153). Man bezeichnet dieses rein quantenmechanische Phänomen als *Tunneleffekt*. Wichtige Beispiele für den Tunneleffekt sind der Alpha-Zerfall von Kernen und die kalte Emission von Elektronen aus Metallen.

7.4 Mathematische Hilfsmittel

Manche der hier vorgestellten Dinge wurden bereits vorher behandelt. Sie sind hier der Vollständigkeit halber nochmals angegeben.

7.4.1 Zustandsraum der Wellenfunktionen

(1) Zustandsraum \mathcal{F}

Der Zustandsraum \mathcal{F} der Wellenfunktionen ist der Raum der quadratintegrablen Funktionen.

(i) \mathcal{F} ist ein Vektorraum/linearer Raum:

$$\psi_1(\vec{r}) \in \mathcal{F}, \quad \psi_2(\vec{r}) \in \mathcal{F}, \quad \Rightarrow \psi(\vec{r}) = \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 \in \mathcal{F}. \quad (7.154)$$

(ii) Mit $\varphi(\vec{r}), \psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ ist das Skalarprodukt definiert durch

$$(\varphi, \psi) \equiv \int d^3r \varphi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}). \quad (7.155)$$

Es gilt

$$(\varphi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\varphi, \psi_1) + \lambda_2(\varphi, \psi_2) \quad (7.156)$$

$$(\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2, \psi) = \lambda_1^*(\varphi_1, \psi) + \lambda_2^*(\varphi_2, \psi). \quad (7.157)$$

Das Skalarprodukt ist linear bezüglich ψ und antilinear bezüglich φ . Falls $(\varphi, \psi) = 0$, so heißen φ und ψ zueinander orthogonal. Es ist

$$(\psi, \psi) \geq 0 \in \mathbb{R} \quad \text{und} \quad (\psi, \psi) = 0 \Leftrightarrow \psi = 0. \quad (7.158)$$

Die Norm in \mathcal{F} ist gegeben durch

$$|\psi| \equiv (\psi, \psi)^{1/2}. \quad (7.159)$$

(iii) Lineare Operatoren: Sei A ein Operator, also

$$\varphi(\vec{r}) = A\psi(\vec{r}) \quad (7.160)$$

mit $\varphi, \psi \in \mathcal{F}$. Dann gilt

$$A(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1A\psi_1 + \lambda_2A\psi_2. \quad (7.161)$$

Beispiele für Operatoren sind

$$\text{Ortsoperator } X = \text{Multiplikation mit } x : X\psi(x, y, z) = x\psi(x, y, z) \quad (7.162)$$

$$\text{Differentialoperator } D_x : D_x\psi(x, y, z) = \frac{\partial}{\partial x}\psi(x, y, z) \quad (7.163)$$

$$\text{Paritätsoperator } \Pi : \Pi\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z) \quad (7.164)$$

$$\text{Hamiltonoperator } H : H\psi(x, y, z) = \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V(x, y, z) \right) \psi(x, y, z). \quad (7.165)$$

(iv) Produkte von Operatoren: Seien A, B Operatoren, so ist

$$(AB)\psi = A(B\psi) . \quad (7.166)$$

Im allgemeinen ist $AB \neq BA$! Der Kommutator ist definiert durch

$$[A, B] \equiv AB - BA . \quad (7.167)$$

(2) Orthonormierte Basis:

Ein Vektor wird charakterisiert durch Komponenten bezüglich einer orthonormierten Basis $\{u_i\}$ ($i = 1, 2, \dots$, abzählbar), $u_i \in \mathcal{F}$. Die Basis ist

$$\text{orthonormiert: } \Leftrightarrow (u_i, u_j) = \delta_{ij} = \int d^3r u_i^*(\vec{r}) u_j(\vec{r}) . \quad (7.168)$$

Die $\{u_i(\vec{r})\}$ bilden eine Basis in \mathcal{F} , wenn jede Funktion $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ auf genau eine Weise nach den $u_i(\vec{r})$ entwickelt werden kann. Also

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}) . \quad (7.169)$$

Dabei sind c_i die Komponenten einer Funktion in Bezug auf eine Basis $\{u_i(\vec{r})\}$. Die Koeffizienten erhält man folgendermaßen,

$$\int d^3r u_j^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \sum_i c_i \underbrace{\int d^3r u_j^*(\vec{r}) u_i(\vec{r})}_{\delta_{ij}} \Rightarrow c_j = \int d^3r u_j^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) . \quad (7.170)$$

Das Skalarprodukt ist in Komponentenschreibweise mit

$$\varphi(\vec{r}) = \sum_i b_i u_i(\vec{r}) , \quad \psi(\vec{r}) = \sum_i c_i u_i(\vec{r}) \quad (7.171)$$

gegeben durch

$$\int d^3r \varphi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \sum_i b_i^* c_i . \quad (7.172)$$

Insbesondere

$$(\psi, \psi) = \sum_i |c_i|^2 . \quad (7.173)$$

Zur Vollständigkeitsrelation: Für jede Funktion $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ gilt

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \sum_i c_i u_i(\vec{r}) = \sum_i \int d^3r' u_i^*(\vec{r}') \psi(\vec{r}') u_i(\vec{r}) = \int d^3r' \psi(\vec{r}') \left(\sum_i u_i(\vec{r}) u_i^*(\vec{r}') \right) \\ &= \int d^3r' \psi(\vec{r}') F(\vec{r}, \vec{r}') . \end{aligned} \quad (7.174)$$

Wenn dies für alle ψ gilt, so ist

$$\sum_i u_i(\vec{r}) u_i^*(\vec{r}') = \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') . \quad (7.175)$$

Dies ist die Vollständigkeitsrelation. Die u_i sind vollständig. Erfüllt umgekehrt eine orthonormierte Funktionenmenge $\{u_i(\vec{r})\}$ die Vollständigkeitsrelation, so bildet sie eine Basis in \mathcal{F} .

7.4.2 Dirac-Notation

Der Zustand eines Teilchens zu einem bestimmten Zeitpunkt wird charakterisiert durch eine Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ oder durch Komponenten bezüglich einer Basis. Wir betrachten die Analogie zum Vektor \vec{a} im \mathbb{R}_3 . So haben wir

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \sum_i a_i \vec{e}_i \quad (7.176)$$

bezüglich der Basis $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$. Wir können einen Basiswechsel in eine Basis mit den neuen Basisvektoren \vec{e}'_i durchführen, mit $\vec{e}_i = O \vec{e}'_i$. Bei O handelt es sich um eine orthogonale Drehmatrix. Wir haben dann

$$\vec{a} = \sum_i a'_i \vec{e}'_i, \quad (7.177)$$

wobei

$$a'_j = \sum_i a_i \vec{e}'_j \vec{e}_i = \sum_i a_i \underbrace{\vec{e}'_j O \vec{e}_i}_{\equiv O_{ji}}. \quad (7.178)$$

Der Beweis hierfür ist

$$\sum_i a_i \vec{e}_i = \sum_j a'_j \vec{e}'_j \Leftrightarrow \sum_i a_i \vec{e}_i \vec{e}'_k = \sum_j a'_j \vec{e}'_j \vec{e}'_k \Leftrightarrow \sum_i a_i \vec{e}_i \vec{e}'_k = a'_k. \quad (7.179)$$

Mit (7.178) können wir zeigen, dass \vec{a} eine Bedeutung unabhängig von der Basis hat. D.h. $\vec{a}\vec{b}$ liefert in jeder Basis das gleiche Resultat unabhängig von der Basis:

$$\sum_i a_i b_i = \sum_j a'_j b'_j = \sum_{k,l} a_k O_{jk} b_l O_{jl} = \sum_{k,l} a_k b_l \underbrace{O_{kj}^T O_{jl}}_{\delta_{kl}} = \sum_k a_k b_k, \quad (7.180)$$

wobei wir ausgenutzt haben, dass O eine orthogonale Matrix ist, also $O^T O = 1$.

ket und bra Notation: (\rightarrow bracket) Bei dieser Notation handelt es sich um die Beschreibung eines Zustands ohne Bezug auf die Ortsvariable. Dies ist manchmal einfach nur bequem, manchmal aber auch unvermeidlich.

ket: Bei einem 'ket' handelt es sich um ein Element des Zustandsraums H , symbolisiert durch $|a\rangle$. Speziell gilt für jedes

$$\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F} \quad \Leftrightarrow \quad |\psi\rangle \in H_r. \quad (7.181)$$

Hierbei charakterisiert $|\psi\rangle$ den Zustand ohne Bezug auf ein Koordinatensystem. Insbesondere taucht also kein \vec{r} auf. Bei \vec{r} handelt es sich lediglich um einen kontinuierlichen Index. $\psi(\vec{r})$ ist die Gesamtheit der Komponenten des Kets $|\psi\rangle$ bezüglich einer speziellen Basis (hier der Ortsbasis).

Bei H handelt es sich um einen Hilbertraum. Dies ist ein ∞ -dimensionaler Raum mit Skalarprodukt und der Möglichkeit, eine Basis zu definieren. Im Hilbertraum werden die Elemente untereinander oder mit \mathbb{C} -Zahlen verknüpft. Also ($c, d \in \mathbb{C}$)

$$|\psi\rangle + |\varphi\rangle \in H \quad \text{und} \quad c|\psi\rangle + d|\varphi\rangle \in H. \quad (7.182)$$

Es gibt Nullelemente:

$$|\alpha\rangle + |0\rangle = |\alpha\rangle \quad (7.183)$$

$$0 \cdot |\alpha\rangle = |0\rangle \quad (7.184)$$

$$c \cdot |0\rangle = |0\rangle . \quad (7.185)$$

Und das Inverse:

$$|\alpha\rangle - |\alpha\rangle = |\alpha\rangle + |-\alpha\rangle = 0 . \quad (7.186)$$

Es gilt ferner

$$c(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = c|\alpha\rangle + c|\beta\rangle \quad (7.187)$$

$$(c_1 + c_2)|\alpha\rangle = c_1|\alpha\rangle + c_2|\alpha\rangle . \quad (7.188)$$

bra: Zu jedem Ket $|\varphi\rangle$ gehört ein 'Bra' $\langle\varphi|$, der zusammen mit einem beliebigen Ket $|\psi\rangle$ eine komplexe Zahl definiert. Also

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \text{komplexe Zahl} . \quad (7.189)$$

Es gilt

$$\langle\varphi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\varphi\rangle \quad (7.190)$$

$$\langle\alpha|\beta + \gamma\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle + \langle\alpha|\gamma\rangle \quad (7.191)$$

$$\langle\varphi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1\langle\varphi|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\varphi|\psi_2\rangle \quad (7.192)$$

$$\langle\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2|\psi\rangle = \lambda_1^*\langle\varphi_1|\psi\rangle + \lambda_2^*\langle\varphi_2|\psi\rangle . \quad (7.193)$$

Das Skalarprodukt ist in Bezug auf den vorderen Faktor antilinear. Ferner

$$\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0 . \quad (7.194)$$

Die Norm ist definiert durch

$$\|\alpha\| = \sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle} . \quad (7.195)$$

Ein Ket und Bra sind orthogonal, wenn

$$\langle\alpha|\beta\rangle = 0 . \quad (7.196)$$

Wir haben eine Basis mit $|n\rangle$, für die

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn} \quad (7.197)$$

(Orthogonalität), am besten auch $\|n\| = 1$. Ein beliebiger Zustand ist dann darstellbar durch

$$\langle n|\psi\rangle = \text{Projektion auf } |n\rangle . \quad (7.198)$$

Vollständigkeit bedeutet

$$\sum |n\rangle\langle n| = 1 . \quad (7.199)$$

Damit ist

$$|\psi\rangle = 1|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle . \quad (7.200)$$

Hierbei kann n ∞ -dimensional sein. Wir haben dann einen kontinuierlichen Index, z.B. $\psi(x)$. Damit ist der Vektor $\psi(x)$ gegeben durch

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle. \quad (7.201)$$

Man nennt dies Ortsdarstellung (siehe auch oben). Ebenso

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r}|\psi\rangle. \quad (7.202)$$

Das Skalarprodukt kann als Integral geschrieben werden

$$\langle \varphi|\psi\rangle = \sum_n \langle \varphi|n\rangle \langle n|\psi\rangle. \quad (7.203)$$

Oder auch

$$\int d^3r \langle \varphi|\vec{r}\rangle \langle \vec{r}|\psi\rangle = \int d^3r \varphi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}). \quad (7.204)$$

Die Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ ist eine konkrete Darstellung des abstrakten Zustands $|\psi\rangle$.

Lineare Operatoren: Ein linearer Operator ordnet jedem $|\psi\rangle \in H$ einen ket $|\psi'\rangle \in H$ zu, so dass der Zusammenhang linear ist. Also

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle = |A\psi\rangle \quad (7.205)$$

ist wieder ein ket. Und es gilt

$$A(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1 A|\psi_1\rangle + \lambda_2 A|\psi_2\rangle. \quad (7.206)$$

Es ist

$$(A + B)|\psi\rangle = A|\psi\rangle + B|\psi\rangle. \quad (7.207)$$

Zwei Operatoren A und B sind gleich, $A = B$, wenn für alle $|\psi\rangle$ gilt

$$A|\psi\rangle = B|\psi\rangle. \quad (7.208)$$

Das Produkt zweier linearer Operatoren ist definiert durch

$$(AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle) = A(|B\psi\rangle). \quad (7.209)$$

Im allgemeinen ist

$$AB \neq BA. \quad (7.210)$$

Es ist

$$\langle \varphi|(A|\psi\rangle) \quad (7.211)$$

einerseits das Skalarprodukt von $\langle \varphi|$ mit $A|\psi\rangle$. Andererseits ist es das Matrixelement von A zwischen $|\varphi\rangle$ und $|\psi\rangle$. Dies ist eine Zahl, die linear von $|\psi\rangle$, aber antilinear von $|\varphi\rangle$ abhängt.

Es seien $|\psi_1\rangle$ und $\langle \varphi_1|$ gegeben und fest. Dann definiert $|\psi_1\rangle \langle \varphi_1|$ einen linearen Operator auf einen beliebigen Ket $|\psi\rangle$ durch

$$\underbrace{|\psi_1\rangle}_{\text{ket}} \underbrace{\langle \varphi_1|\psi\rangle}_{\text{Zahl}}. \quad (7.212)$$

Die Anwendung von $|\psi_1\rangle\langle\varphi_1|$ führt auf einen anderen Ket und stellt deshalb einen Operator dar. Bei Kets und Bras ist die Reihenfolge wichtig.

Hermitesche Konjugation (adjungierter Operator): A angewandt auf den Ket $|\psi\rangle$ liefert $A|\psi\rangle$. Die Anwendung von A auf den Bra $\langle\varphi|$ liefert $\langle\varphi|A$. Dies ist festgelegt durch

$$(\langle\varphi|A)|\psi\rangle = \langle\varphi|(A|\psi\rangle). \quad (7.213)$$

Bei $\langle\varphi|A|\psi\rangle$ handelt es sich um ein "Matrixelement". Der zu A adjungierte Operator A^\dagger ist definiert durch (Analogie Matrix - transponiert und konjugiert komplex)

$$\langle\varphi|A^\dagger|\psi\rangle \equiv \langle\psi|A|\varphi\rangle^*. \quad (7.214)$$

Es ist

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\varphi|A\psi\rangle = \langle A^\dagger\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle^*. \quad (7.215)$$

Beachte

$$|A\psi\rangle = A|\psi\rangle, \quad \text{aber} \quad \langle A\psi| = \langle\psi|A^\dagger. \quad (7.216)$$

Eigenschaften:

$$(A^\dagger)^\dagger = A, \quad (\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger, \quad \text{mit } \lambda \in \mathbb{C}, \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger. \quad (7.217)$$

Die Anwendung von A auf einen Zustand führt auf ein Eigenwertproblem:

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle, \quad (7.218)$$

mit $a \in \mathbb{C}$. Bei einem hermiteschen Operator ist $A^\dagger = A$. Damit

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle^* \quad (7.219)$$

und somit

$$a\langle\psi|\psi\rangle = a^*\langle\psi|\psi\rangle, \quad (7.220)$$

also $a = a^*$. Wir erhalten also für hermitesche Operatoren reelle Eigenwerte. Die Eigenvektoren sind orthonormiert.

7.5 Die Grundpostulate der Quantenmechanik

Dieses Kapitel behandelt die Postulate, auf denen die quantenmechanische Beschreibung physikalischer Systeme basiert. Die Postulate lauten:

P1 - Der Zustand eines Systems: Der Zustand eines physikalischen Systems zu einem bestimmten Zeitpunkt t_0 wird durch die Angabe eines Kets $|\psi(t_0)\rangle$ aus dem Zustandsraum H definiert.

P2 - Physikalische Größen: Jede messbare physikalische Größe (Ort, Impuls, Energie, ...) wird durch einen im Zustandsraum H wirkenden hermiteschen Operator A beschrieben. Dieser Operator ist eine Observable.

P3 - Messung physikalischer Größen: Wird eine physikalische Größe gemessen, so kann das Resultat nur einer der Eigenwerte der zugehörigen Observablen A sein. (Bemerkungen: Weil

A hermitesch ist, liefert eine Messung der physikalischen Größe stets einen reellen Wert. Ist das Spektrum von A diskret, so sind die möglichen Resultate bei der Messung der physikalischen Größe quantisiert.)

P4 - Messwahrscheinlichkeit:

Nicht-entartetes diskretes Spektrum: Sei das Eigenwertspektrum von A diskret. Seien ferner sämtliche Eigenwerte a_n von A nicht-entartet, so dass zu jedem von ihnen genau ein Eigenvektor $|u_n\rangle$ gehört, also

$$A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle . \quad (7.221)$$

Da A eine Observable ist, bildet die Menge der als normiert vorausgesetzten $|u_n\rangle$ in H eine Basis. Damit kann der Zustandsvektor $|\psi\rangle$ in der Form

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle \quad (7.222)$$

geschrieben werden. Bei der Messung der physikalischen Größe \mathcal{A} im normierten Zustand $|\psi\rangle$ ist die Wahrscheinlichkeit $P(a_n)$, bei der Messung der physikalischen Größe \mathcal{A} den nicht-entarteten Eigenwert a_n der zugehörigen Observablen A zu erhalten, gegeben durch

$$P(a_n) = |c_n|^2 = |\langle u_n | \psi \rangle|^2 . \quad (7.223)$$

Entartetes diskretes Spektrum: Sind einige Eigenwerte a_n entartet, so gehören zu ihnen mehrere orthonormierte Eigenvektoren $|u_n^i\rangle$,

$$A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle , \quad i = 1, 2, \dots, g_n , \quad (7.224)$$

wobei g_n den Entartungsgrad bezeichnet. Der Ket $|\psi\rangle$ kann nach der orthonormierten Basis $\{|u_n^i\rangle\}$ entwickelt werden,

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle . \quad (7.225)$$

Bei der Messung der physikalischen Größe \mathcal{A} im normierten Zustand $|\psi\rangle$ ist die Wahrscheinlichkeit $P(a_n)$, bei der Messung der physikalischen Größe \mathcal{A} den entarteten Eigenwert a_n der zugehörigen Observablen A zu erhalten, gegeben durch

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2 . \quad (7.226)$$

Die $\{|u_n^i\rangle\}$ sind ein System von orthonormierten Vektoren, die im Eigenraum H_n zum Eigenwert a_n von A eine Basis bilden.

Kontinuierliches Spektrum: Sei das Spektrum von A kontinuierlich und der Einfachheit halber nicht entartet. Das System der orthonormierten Eigenvektoren $|v_\alpha\rangle$ von A ,

$$A|v_\alpha\rangle = \alpha|v_\alpha\rangle , \quad (7.227)$$

bildet im Zustandsraum H eine kontinuierliche Basis, nach der die $|\psi\rangle$ zerlegt werden können,

$$|\psi\rangle = \int d\alpha c(\alpha) |v_\alpha\rangle . \quad (7.228)$$

Bei der Messung der physikalischen Größe \mathcal{A} im normierten Zustand $|\psi\rangle$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Ergebnis einen Wert zwischen α und $\alpha + d\alpha$ liefert,

$$dP(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha, \quad (7.229)$$

wobei $|v_\alpha\rangle$ der Eigenvektor der zu \mathcal{A} gehörenden Observablen A mit dem Eigenwert α ist.

P5 - Reduktion des Wellenpakets:

Nach der Messung mit Resultat a_n ist der Zustand des Systems unmittelbar nach der Messung gleich der auf 1 normierten Projektion von $|\psi\rangle$ auf den zu a_n gehörenden Eigenraum:

$$|\psi\rangle \Rightarrow \frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}}. \quad (7.230)$$

Hierbei ist P_n der Projektor auf den Zustand mit Eigenwert a_n .⁵ Jede weitere Messung von \mathcal{A} unmittelbar danach ändert den Zustand nicht mehr und liefert das gleiche Resultat:

$$\frac{AP_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}} = a_n \frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}} \quad (7.231)$$

P6 - Zeitliche Entwicklung:

Die zeitliche Entwicklung des Zustandvektors $|\psi\rangle$ wird durch die Schrödinger Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (7.232)$$

bestimmt. Hierbei ist $H(t)$ die der Gesamtenergie des Systems zugeordnete Observable. H ist der Hamilton-Operator des Systems.

P7 - Korrespondenzregeln:

Die quantenmechanischen Observablen werden aus den klassischen Größen abgeleitet. Zum Beispiel in der Ortsdarstellung

$$x_i \rightarrow X_i \quad \text{und} \quad p_i \rightarrow P_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}. \quad (7.233)$$

hierbei ist zu berücksichtigen, dass

$$[X_i, X_j] = 0, \quad [P_i, P_j] = 0, \quad [P_i, X_j] = -i\hbar \delta_{ij}. \quad (7.234)$$

Alle anderen Observablen, die klassisch Funktionen von x und p sind, werden durch diese Substitutionen gewonnen. Es ist dabei die Symmetrisierungsregel,

$$\vec{r} \cdot \vec{p} \rightarrow \frac{1}{2} (\vec{R}\vec{P} + \vec{P}\vec{R}), \quad (7.235)$$

zu beachten. Beachte auch, dass nicht alle Größen ein klassisches Analogon haben. So z.B. der Spin.

⁵Beim Projektor gilt $P_n^2 = P_n$.

7.6 Der harmonische Oszillator

7.6.1 Harmonischer Oszillator in der klassischen Mechanik

Wir betrachten ein Teilchen der Masse m und mit Energie E , das sich in einem Potential der Form

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad (7.236)$$

bewegt. Die Bewegungsgleichung ist gegeben durch

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = F \quad \Leftrightarrow \quad m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{dV}{dx} = -kx. \quad (7.237)$$

Die Lösung ist gegeben durch (siehe Fig. 7.8 für die Definition der Amplitude x_M)

$$x(t) = x_M \cos(\omega t - \varphi), \quad (7.238)$$

mit

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (7.239)$$

Die Amplitude x_M und die Phase φ ergeben sich aus den Anfangsbedingungen. Die kinetische

Abbildung 7.8: Das Potential des harmonischen Oszillators. E bezeichnet die Energie des Teilchens.

Energie T ist gegeben durch

$$T = \frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 = \frac{p^2}{2m}. \quad (7.240)$$

Mit

$$\frac{1}{2}m\dot{x}^2 = \frac{1}{2}mx_M^2\omega^2 \sin^2(\omega t - \varphi) \quad (7.241)$$

$$\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}mx_M^2\omega^2 \cos^2(\omega t - \varphi) \quad (7.242)$$

haben wir für die Gesamtenergie

$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x_M^2 = \text{const.} \quad (7.243)$$

Bemerkung: Die potentielle Energie $U(x)$ vieler physikalischer Systeme hat an einer Stelle $x = x_0$ ein Minimum, siehe Fig. 7.9. Die Entwicklung um $x = x_0$ (für eine kleine Schwingung) liefert

$$U(x) = \underbrace{U(x_0)}_{=0} + \underbrace{U'(x_0)}_{=0}(x - x_0) + \frac{1}{2} \underbrace{U''(x_0)}_{>0 \equiv m\omega^2 = k} (x - x_0)^2 + \dots \quad (7.244)$$

Abbildung 7.9: Die potentielle Energie $U(x)$ eines beliebigen physikalischen Systems.

Wir haben $U(x_0) = 0$, da wir hier den Nullpunkt der Energiezählung gewählt haben. Wir haben $U'(x_0) = 0$, da das Minimum bei $x = x_0$ liegt. Wir haben $U''(x_0) > 0$, da es sich um ein Minimum handelt. Damit finden wir, dass

$$\omega = \sqrt{\frac{U''(x_0)}{m}}. \quad (7.245)$$

Somit lassen sich die folgenden Resultate für den harmonischen Oszillator also auf viele physikalische Systeme anwenden.

7.7 Harmonischer Oszillator in der Quantenmechanik

Ausgangspunkt ist die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2. \quad (7.246)$$

Aus den klassischen Größen erhalten wir über die Korrespondenzregeln die Operatoren. Damit können wir die Eigenwertgleichung

$$H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle \quad (7.247)$$

aufstellen, wobei H nun ein Operator, der Hamilton-Operator, ist. Wir haben im Ortsraum die folgenden Korrespondenzregeln,

$$x \rightarrow X, \quad p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}. \quad (7.248)$$

Damit haben wir für den harmonischen Oszillator also die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \varphi(x) = E\varphi(x). \quad (7.249)$$

7.7.1 Die algebraische Lösung der Differentialgleichung

Zu lösen ist die Gleichung (7.249). Wir definieren zunächst die dimensionslosen Größen

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad \text{und} \quad \hat{p} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} p, \quad (7.250)$$

mit

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i. \quad (7.251)$$

Wir definieren

$$\hat{H} \equiv \frac{1}{\hbar\omega} H = \frac{1}{2}(\hat{x}^2 + \hat{p}^2), \quad \text{und} \quad \epsilon \equiv \frac{E}{\hbar\omega}. \quad (7.252)$$

Wir haben also die dimensionslose Eigenwertgleichung

$$\hat{H}|\varphi_\nu\rangle = \epsilon_\nu|\varphi_\nu\rangle. \quad (7.253)$$

Wir führen folgende Operatoren ein:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p}) \quad \text{und} \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{p}). \quad (7.254)$$

D.h., wir haben

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \quad \text{und} \quad \hat{p} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a). \quad (7.255)$$

Es gilt

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2}[\hat{x} + i\hat{p}, \hat{x} - i\hat{p}] = \frac{i}{2}[\hat{p}, \hat{x}] - \frac{i}{2}[\hat{x}, \hat{p}] = 1 \quad (7.256)$$

$$N \equiv a^\dagger a = \frac{1}{2}(\hat{x}^2 + \hat{p}^2 - 1) \quad (7.257)$$

$$\hat{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2} = N + \frac{1}{2}. \quad (7.258)$$

Man nennt N den Besetzungszahloperator. Aus Glg. (7.258) können wir ablesen, dass die Eigenzustände von \hat{H} auch die Eigenzustände von N sind und umgekehrt. Das Lösen von Glg. (7.253) ist äquivalent zur Lösung der Eigenwert-Gleichung

$$N|\varphi_\nu\rangle = \nu|\varphi_\nu\rangle. \quad (7.259)$$

Denn dies entspricht

$$H|\varphi_\nu\rangle = \hbar\omega(\nu + \frac{1}{2})|\varphi_\nu\rangle. \quad (7.260)$$

Falls die ν bekannt sind, finden wir, dass

$$\epsilon_\nu = \frac{E_\nu}{\hbar\omega} = \nu + \frac{1}{2}. \quad (7.261)$$

Das zu lösende Problem ist nun die Bestimmung von ν und $|\varphi_\nu\rangle$. Wir schauen uns hierfür zunächst die Eigenschaften von N , a und a^\dagger an:

(i) Vertauschungsrelationen:

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger \underbrace{[a, a]}_{=0} + \underbrace{[a^\dagger, a]}_{=-1} a = -a \quad (7.262)$$

$$[N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger \underbrace{[a, a^\dagger]}_{=1} + \underbrace{[a^\dagger, a^\dagger]}_{=0} a = a^\dagger. \quad (7.263)$$

(ii) Für die Eigenwerte ν von N gilt: $\nu \geq 0$. Denn

$$0 \leq \|\underbrace{a|\varphi_\nu\rangle}_{|a\varphi_\nu\rangle}\|^2 = \langle a\varphi_\nu | a\varphi_\nu \rangle = \langle \varphi_\nu | a^\dagger a |\varphi_\nu \rangle = \langle \varphi_\nu | N |\varphi_\nu \rangle = \nu \underbrace{\langle \varphi_\nu | \varphi_\nu \rangle}_{\geq 0}. \quad (7.264)$$

Das heißt, der niedrigste Eigenwert von N ist \geq Null. Falls $\nu = 0$, dann ist

$$a|\varphi_0\rangle = 0. \quad (7.265)$$

(iii) Sei $|\varphi_\nu\rangle$ ein Eigenzustand zu N mit Eigenwert ν , dann ist

$$a|\varphi_\nu\rangle \quad \text{auch ein Eigenvektor von } N \text{ mit Eigenwert } \nu - 1 \quad (7.266)$$

$$a^\dagger|\varphi_\nu\rangle \quad \text{auch ein Eigenvektor von } N \text{ mit Eigenwert } \nu + 1. \quad (7.267)$$

Denn für a^\dagger ist

$$Na^\dagger|\varphi_\nu\rangle = (a^\dagger N + a^\dagger)|\varphi_\nu\rangle = (a^\dagger\nu + a^\dagger)|\varphi_\nu\rangle = (\nu + 1)a^\dagger|\varphi_\nu\rangle. \quad (7.268)$$

Und analog für a . Wir verlangen, dass $|\varphi_\nu\rangle$ auf 1 normiert sei. Damit ist

$$\langle a^\dagger\varphi_\nu|a^\dagger\varphi_\nu\rangle = \langle\varphi_\nu|aa^\dagger|\varphi_\nu\rangle = \langle\varphi_\nu|a^\dagger a + 1|\varphi_\nu\rangle = (\nu + 1)\langle\varphi_\nu|\varphi_\nu\rangle = (\nu + 1). \quad (7.269)$$

Und wir haben also

$$a^\dagger|\varphi_\nu\rangle = \sqrt{\nu + 1}|\varphi_{\nu+1}\rangle. \quad (7.270)$$

Analog finden wir

$$a|\varphi_\nu\rangle = \sqrt{\nu}|\varphi_{\nu-1}\rangle. \quad (7.271)$$

(Bemerkung: Zeige, dass $Na|\varphi_\nu\rangle = (\nu - 1)a|\varphi_\nu\rangle \equiv (\nu - 1)|\varphi_{\nu-1}\rangle$.) D.h., falls die Eigenfunktion $|\varphi_\nu\rangle$ bekannt ist, erhält man durch sukzessives Anwenden von a und a^\dagger alle anderen Eigenfunktionen. Wir wollen nun $|\varphi_0\rangle$ bestimmen. Es gilt (da $|\varphi_0\rangle$ der Grundzustand ist)

$$a|\varphi_0\rangle = 0. \quad (7.272)$$

Wir haben für a in der Ortsdarstellung

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + i\frac{\hbar}{i}\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\frac{d}{dx}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{x} + \frac{d}{d\hat{x}}\right) \quad (7.273)$$

und somit

$$0 = \langle x|a|\varphi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{x} + \frac{d}{d\hat{x}}\right)\langle x|\varphi_0\rangle. \quad (7.274)$$

Die normierte Lösung ist gegeben durch

$$\langle x|\varphi_0\rangle = N_0 e^{-\frac{\hat{x}^2}{2}}, \quad (7.275)$$

mit

$$N_0 = \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{4}}. \quad (7.276)$$

Wegen⁶

$$a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle \quad \text{bzw.} \quad |\varphi_{n+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}a^\dagger|\varphi_n\rangle \quad (7.277)$$

sind mit $|\varphi_0\rangle$ auch alle anderen Lösungen bekannt. Denn

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}a^\dagger|\varphi_{n-1}\rangle = \dots = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle, \quad (7.278)$$

⁶Wir verwenden ab jetzt n statt wie bisher ν .

mit den Energie-Eigenwerten

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega . \quad (7.279)$$

Somit haben wir also die angeregten Zustände

$$\langle x|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!2^n}}\left(\hat{x} - \frac{d}{d\hat{x}}\right)^n\langle x|\varphi_0\rangle . \quad (7.280)$$

Wir lösen dies durch Rekursion. Explizit setzen wir

$$\langle x|\varphi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n-1)!2^{n-1}}}H_{n-1}(\hat{x})N_0e^{-\frac{\hat{x}^2}{2}} . \quad (7.281)$$

Hier sind die H_n die Hermiteschen Polynome mit

$$H_n(\hat{x}) = (-1)^n e^{\hat{x}^2} \frac{d^n}{d\hat{x}^n} e^{-\hat{x}^2} \quad (7.282)$$

und somit

$$H_0(\hat{x}) = 1 . \quad (7.283)$$

Damit ist die Rekursion erfüllt für $n = 0$. Und wir haben

$$\langle x|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2n}}\left(\hat{x} - \frac{d}{d\hat{x}}\right) \underbrace{\langle x|\varphi_{n-1}\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{(n-1)!2^{n-1}}}H_{n-1}(\hat{x})N_0e^{-\frac{\hat{x}^2}{2}}} . \quad (7.284)$$

Wir verwenden

$$H'_{n-1}(\hat{x}) = 2(n-1)H_{n-2}(\hat{x}) \quad (7.285)$$

$$H_n(\hat{x}) = 2\hat{x}H_{n-1} - 2(n-1)H_{n-2} = 2\hat{x}H_{n-1} - H'_{n-1} \quad (7.286)$$

und erhalten damit

$$\langle x|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \underbrace{\left(\hat{x}H_{n-1} - H'_{n-1} - \left(-2\frac{\hat{x}}{2}\right)H_{n-1}\right)}_{H_n(\hat{x})} N_0 e^{-\frac{\hat{x}^2}{2}} , \quad (7.287)$$

was zu beweisen war.

Wir betrachten nochmals die Eigenwerte: Die $|\varphi_n\rangle$ sind Eigenfunktionen zu N mit den Eigenwerten $n \in \mathbb{N}_0$. Denn gäbe es ein $\tilde{\nu}$ mit $n < \tilde{\nu} < n + 1$ und $N|\varphi_{\tilde{\nu}}\rangle = \tilde{\nu}|\varphi_{\tilde{\nu}}\rangle$ so hätten wir

$$N(a^n|\varphi_{\tilde{\nu}}\rangle) = ([N, a^n] + a^n N)|\varphi_{\tilde{\nu}}\rangle = -na^n|\varphi_{\tilde{\nu}}\rangle + \tilde{\nu}a^n|\varphi_{\tilde{\nu}}\rangle = (\tilde{\nu} - n)|\varphi_{\tilde{\nu}}\rangle . \quad (7.288)$$

Hier haben wir verwendet, dass

$$[N, a^n] = -na^n . \quad (7.289)$$

Damit haben wir aber auch

$$N(a^{n+1}|\varphi_{\tilde{\nu}}\rangle) = \underbrace{(\tilde{\nu} - n - 1)}_{<0} (a^{n+1}|\varphi_{\tilde{\nu}}\rangle) . \quad (7.290)$$

Dies jedoch steht im Widerspruch zu der Aussage unter (ii), dass die Eigenwerte von N positiv sind. Wir kennen jetzt also die Eigenfunktionen $|\varphi_n\rangle$ zu N und H und ihre zugehörigen Eigenwerte n bzw. $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.

Interpretation von a und a^\dagger : Wir wollen uns nun die Bedeutung von a und a^\dagger anschauen. Wir haben folgende Bezeichnungen,

$$\left. \begin{array}{l} a^\dagger \text{ heißt Erzeugungsoperator} \\ a \text{ heißt Vernichtungsoperator} \end{array} \right\} \text{ Leiteroperatoren .} \quad (7.291)$$

Denn

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (7.292)$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (7.293)$$

erhöhen bzw. erniedrigen den Energiewert um $\hbar\omega$.

Explizite Form von N, H, a, a^\dagger, x, p : Wir betrachten die expliziten Formen dieser Operatoren in der Besetzungszahldarstellung $|n\rangle \equiv |\varphi_n\rangle$. Wir haben für den

* Teilchenzahloperator N

$$N|n\rangle = n|n\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle m|N|n\rangle = n\delta_{mn} \quad (7.294)$$

Und damit also die Matrixdarstellung von N

$$(N) = \begin{bmatrix} 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (7.295)$$

* Hamiltonoperator H . Mit

$$H = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right) \quad (7.296)$$

haben wir die Matrixdarstellung von H

$$(H) = \hbar\omega \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (7.297)$$

* Erzeugungsoperator a^\dagger . Mit

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle m|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}, \quad (7.298)$$

und damit⁷ haben wir die Matrizdarstellung von a^\dagger

$$(a^\dagger) = \begin{bmatrix} 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (7.299)$$

* Vernichtungsoperator a . Mit

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle m|a|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{mn-1}, \quad (7.300)$$

und damit haben wir die Matrizdarstellung von a

$$(a) = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (7.301)$$

* Teilchenzahloperator $N = a^\dagger a$. Mit

$$N|n\rangle = n|n\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle m|a^\dagger a|n\rangle = \sqrt{n}\langle m|a^\dagger|n-1\rangle = \sqrt{n}\sqrt{n}\langle m|n\rangle = n\delta_{mn}, \quad (7.302)$$

und damit haben wir die Matrizdarstellung von N

$$(a^\dagger)(a) = \begin{bmatrix} 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \\ = \begin{bmatrix} 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (7.303)$$

* Ortsoperator \hat{x} . Mit

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \quad (7.304)$$

⁷Beachte, der erste Index m bezeichnet die Zeile und der zweite $n+1$ die Zeile, so dass also wegen der Deltafunktion für einen Eintrag ungleich 0 in der Matrix $m = n+1$ gelten muss. D.h. die Zeilenzahl ist immer um eins höher also die Spaltenzahl bei den Einträgen ungleich 0.

haben wir die Matrizdarstellung von \hat{x}

$$(\hat{x}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & \dots & \dots & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (7.305)$$

* Impulsoperator \hat{p} . Mit

$$\hat{p} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \quad (7.306)$$

haben wir die Matrizdarstellung von \hat{p}

$$(\hat{p}) = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{1} & \dots & \dots & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (7.307)$$

7.7.2 Diskussion der Resultate

(i) Erwartungswerte

Für einen Operator A ist der Mittelwert (= *Erwartungswert*)⁸ im Zustand $|n\rangle$ definiert durch

$$\langle A \rangle = \langle n|A|n \rangle. \quad (7.308)$$

Aus Glgn. (7.305) und (7.307) lesen wir ab, dass die Erwartungswerte des Orts- und Impulsoperators

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \hat{x} \quad \text{und} \quad P = \sqrt{m\hbar\omega} \hat{p} \quad (7.309)$$

gegeben sind durch

$$\langle n|X|n \rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle n|P|n \rangle = 0. \quad (7.310)$$

Die Standardabweichung⁹ $(\Delta x)^2$ einer Zufallsvariablen im Zustand $|n\rangle$ ist definiert durch

$$(\Delta x)^2 = \langle n|x^2|n \rangle - (\langle n|x|n \rangle)^2. \quad (7.311)$$

Damit erhalten wir für die Standardabweichungen des Orts- und Impulsoperators

$$(\Delta X)^2 = \langle n|X^2|n \rangle - \underbrace{(\langle n|X|n \rangle)^2}_{=0} = \langle n|X^2|n \rangle \quad (7.312)$$

$$(\Delta P)^2 = \langle n|P^2|n \rangle - \underbrace{(\langle n|P|n \rangle)^2}_{=0} = \langle n|P^2|n \rangle. \quad (7.313)$$

⁸Der Mittel-/Erwartungswert ist ein Begriff aus der Wahrscheinlichkeitsrechnung und gibt an, welchen Wert eine Zufallsvariable im Mittel annimmt.

⁹Die Standardabweichung ist ein Maß für die Streuung einer Zufallsvariablen um ihren Mittelwert.

Wir haben

$$X^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(a^\dagger + a)(a^\dagger + a) = \frac{\hbar}{2m\omega}(a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a + a^2) \quad (7.314)$$

$$P^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2}(a^\dagger - a)(a^\dagger - a) = -\frac{m\hbar\omega}{2}(a^{\dagger 2} - aa^\dagger - a^\dagger a + a^2). \quad (7.315)$$

Mit

$$\langle n|aa^\dagger + a^\dagger a|n\rangle = \langle n|2a^\dagger a + 1|n\rangle = 2n + 1 \quad (7.316)$$

und

$$a^{\dagger 2}|n\rangle \sim |n + 2\rangle \quad (7.317)$$

$$a^2|n\rangle \sim |n - 2\rangle \quad (7.318)$$

(es gibt also keinen Beitrag zu den Diagonalelementen) erhalten wir

$$(\Delta X)^2 = (n + \frac{1}{2})\frac{\hbar}{m\omega} \quad (7.319)$$

$$(\Delta P)^2 = (n + \frac{1}{2})m\hbar\omega. \quad (7.320)$$

Es ist ferner

$$(\Delta X)(\Delta P) = (n + \frac{1}{2})\hbar \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (7.321)$$

Dies entspricht genau dem Wert, den man als zeitlichen Mittelwert von x^2 bzw. p^2 bei einer klassischen Bewegung erhalten würde. Denn: Ist x_M die Amplitude der klassischen Bewegung mit der Energie $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$, so ist mit

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 x_M^2 \quad (7.322)$$

dann

$$\Delta X = \frac{1}{\sqrt{2}}x_M. \quad (7.323)$$

Denn

$$(\Delta X)^2 = (n + \frac{1}{2})\frac{\hbar}{m\omega} = \frac{E}{\omega m\omega}, \quad \text{also } \frac{E}{m\omega^2} = \frac{1}{2}x_M^2 = (\Delta X)^2. \quad (7.324)$$

Mit dem klassischen Impuls

$$p_M = m\omega x_M \quad (7.325)$$

erhält man

$$\Delta P = \frac{1}{\sqrt{2}}p_M. \quad (7.326)$$

Denn

$$(\Delta P)^2 = (n + \frac{1}{2})m\hbar\omega = Em = \frac{1}{2}m^2\omega^2 x_M^2 = \frac{1}{2}p_M^2. \quad (7.327)$$

Der Ort variiert mit der Zeit $\sim \cos(\omega t - \varphi)$ und der Impuls $\sim \sin(\omega t - \varphi)$. Damit haben wir die klassischen Mittelwerte

$$\overline{x_{\text{kl}}^2} = x_M^2 \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos^2(\omega t - \varphi) d\varphi = \frac{x_M^2}{2} \quad (7.328)$$

$$\overline{p_{\text{kl}}^2} = p_M^2 \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin^2(\omega t - \varphi) d\varphi = \frac{p_M^2}{2} \quad (7.329)$$

$$\overline{x_{\text{kl}}} = x_M \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos(\omega t - \varphi) d\varphi = 0 \quad (7.330)$$

$$\overline{p_{\text{kl}}} = -p_M \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sin(\omega t - \varphi) d\varphi = 0. \quad (7.331)$$

Das führt auf die klassische Standardabweichungen für x und p

$$\delta x_{\text{kl}} = \sqrt{\overline{x_{\text{kl}}^2} - (\overline{x_{\text{kl}}})^2} = \frac{x_M}{\sqrt{2}} \quad (7.332)$$

$$\delta p_{\text{kl}} = \sqrt{\overline{p_{\text{kl}}^2} - (\overline{p_{\text{kl}}})^2} = \frac{p_M}{\sqrt{2}}. \quad (7.333)$$

Man findet jeweils das Gleiche wie für ΔX und ΔP .

(ii) Qualitative Betrachtung zum Grundzustand

Klassisch haben wir im Grundzustand für alle Zeiten t die Werte $x = 0$, $p = 0$ und $E_{\text{min}} = 0$. In der Quantenmechanik gilt dies für die Mittelwerte, also $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$. Die Wellenfunktion ist über einen weiteren Bereich ausgedehnt, der charakterisiert ist durch $\Delta x \sim \xi$. Damit haben wir für den Mittelwert der potentiellen Energie

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2. \quad (7.334)$$

Für den Mittelwert von p^2 haben wir aufgrund der Unschärferelation

$$\langle p^2 \rangle \approx \frac{\hbar^2}{\xi^2}. \quad (7.335)$$

Für den Mittelwert der kinetischen Energie haben wir damit

$$\langle T \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2m\xi^2} \quad (7.336)$$

und somit für den Mittelwert der Gesamtenergie

$$\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle \approx \frac{\hbar^2}{2m\xi^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \xi^2. \quad (7.337)$$

Dies wird minimal für $\langle H \rangle' = 0$, also

$$\frac{-\hbar^2}{m\xi^3} + m\omega^2\xi = 0. \quad (7.338)$$

Das ist der Fall für

$$\xi^4 = \frac{\hbar^2}{m^2\omega^2} \quad \Leftrightarrow \quad \xi^2 = \frac{\hbar}{m\omega}. \quad (7.339)$$

Damit haben wir also

$$\langle V \rangle = \langle T \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (7.340)$$

und somit die korrekte Größenordnung

$$\langle H \rangle \approx \hbar \omega . \quad (7.341)$$

7.7.3 Der dreidimensionale harmonische Oszillator in kartesischen Koordinaten

Wir haben für den dreidimensionalen Oszillator die folgende zeitunabhängige Schrödingergleichung in der Ortsdarstellung

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \vec{R}^2 \right] \varphi(\vec{R}) = E \varphi(\vec{R}) . \quad (7.342)$$

Auf der linken Seite steht der Hamiltonoperator, den wir zerlegen können in

$$H = H_x + H_y + H_z , \quad (7.343)$$

mit

$$H_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (7.344)$$

und entsprechend die H_y und H_z . Es gilt

$$[H_x, H_y] = 0 , \quad [H_x, H_z] = 0 , \quad [H_y, H_z] = 0 . \quad (7.345)$$

Dies ist also äquivalent zu einem Problem mit 3 ungekoppelten harmonischen Oszillatoren. Wir machen den Ansatz der Separation der Variablen, also

$$\varphi(\vec{R}) = \varphi_x(x) \cdot \varphi_y(y) \cdot \varphi_z(z) . \quad (7.346)$$

Damit erhalten wir für die linke Seite der Schrödingergleichung

$$(H_x + H_y + H_z) \varphi(\vec{R}) = (H_x \varphi_x(x)) \varphi_y(y) \varphi_z(z) + (H_y \varphi_y(y)) \varphi_x(x) \varphi_z(z) + (H_z \varphi_z(z)) \varphi_x(x) \varphi_y(y) , \quad (7.347)$$

wobei H_x nur auf $\varphi_x(x)$ wirkt usw. Auf der rechten Seite haben wir

$$E \varphi_x(x) \varphi_y(y) \varphi_z(z) . \quad (7.348)$$

Somit erhalten wir für die zeitunabhängige Schrödingergleichung nach Division durch $\varphi_x(x) \varphi_y(y) \varphi_z(z)$

$$\underbrace{\frac{(H_x \varphi_x(x))}{\varphi_x(x)}}_{\text{const.} \equiv E_x} + \underbrace{\frac{(H_y \varphi_y(y))}{\varphi_y(y)}}_{\equiv E_y} + \underbrace{\frac{(H_z \varphi_z(z))}{\varphi_z(z)}}_{\equiv E_z} = \underbrace{E}_{\equiv E_x + E_y + E_z} . \quad (7.349)$$

Damit erhalten wir 3 entkoppelte Gleichungen:

$$H_x \varphi_x(x) = E_x \varphi_x(x) , \quad H_y \varphi_y(y) = E_y \varphi_y(y) , \quad H_z \varphi_z(z) = E_z \varphi_z(z) . \quad (7.350)$$

Die Lösungen sind gegeben durch

$$H_x \varphi_{n_x}(x) = \hbar\omega(n_x + \frac{1}{2})\varphi_{n_x}(x), \dots \quad (7.351)$$

Dabei ist φ_{n_x} die Lösung der 1-dimensionalen Schrödingergleichung mit der Energie $\hbar\omega(n_x + \frac{1}{2})$. Die Gesamtenergie ist damit

$$E = E_x + E_y + E_z = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}). \quad (7.352)$$

Oder

$$E = \hbar\omega(n + \frac{3}{2}), \quad \text{mit } n \equiv n_x + n_y + n_z. \quad (7.353)$$

Dieser Energiezustand ist entartet. Die Angabe von n allein reicht nicht aus, um den Zustand festzulegen. Denn z.B. $n = 3$ kann entstehen aus $n_x = 2, n_y = 1, n_z = 0$ oder $n_x = 1, n_y = 1, n_z = 1$ oder ... Die Angabe von n_x, n_y und n_z hingegen legt den Zustand eindeutig fest.

Der Grad der Entartung

Die Frage ist, wieviele ganze Zahlenkombinationen n_x, n_y, n_z es gibt, so daß $n_x + n_y + n_z = n$. Wir wählen für n_x einen der Werte $0, 1, \dots, n$, also $0 \leq n_x \leq n$. Damit haben wir

$$n_y + n_z = n - n_x \quad (7.354)$$

und somit

$$\begin{aligned} (n_y, n_z) &= (0, (n - n_x)) \quad \text{oder } (1, (n - n_x) - 1), \dots, \\ &(n - n_x, (n - n_x) - (n - n_x)). \end{aligned} \quad (7.355)$$

Es gibt also $(n - n_x + 1)$ Möglichkeiten für festes n_x . Also gibt es insgesamt

$$\sum_{n_x=0}^n (n - n_x + 1) = \frac{(n+1)(n+2)}{2} \quad \text{Möglichkeiten.} \quad (7.356)$$

Dies ist der Grad der Entartung.

7.8 Zwei-Zustandssysteme

Wir wollen in diesem Abschnitt sogenannte Zwei-Zustandssysteme betrachten. Dies sind relativ einfache Systeme, auf die wir den quantenmechanischen Formalismus anwenden wollen. Für Zwei-Zustandssysteme gibt es eine Vielzahl von Beispielen und Anwendungen. Hierzu gehören z.B. der Spin in einem Magnetfeld, die Lamorpräzession, zwei dicht benachbarte Niveaus in der Atomphysik, Neutrinooszillationen. Zunächst betrachten wir das Stern-Gerlach Experiment.

7.8.1 Das Stern-Gerlach Experiment

Mit Hilfe dieses Experiments gelang es den Physikern Otto Stern und Walter Gerlach 1922 zum ersten Mal, die Richtungsquantelung von Drehimpulsen nachzuweisen. Bei diesem Experiment wird ein Strahl von Silberatomen durch ein Magnetfeld geschickt, das in der Richtung senkrecht zum Strahl stark inhomogen ist. Die Silberatome werden, nachdem sie das Magnetfeld durchlaufen haben, auf einer Glasplatte nachgewiesen. Das Experiment zeigt, dass auf der Platte zwei voneinander getrennte Flecke auftreten. Durch das Magnetfeld wird also der Strahl in zwei getrennte Teilstrahlen aufgeteilt.

Für den Versuch werden Silberatome verwendet, die ein magnetisches Moment $\vec{\mathcal{M}}$ besitzen. Das magnetische Moment eines Atoms setzt sich aus sämtlichen Bahndrehimpulsen (die Elektronen bewegen sich um den Kern des Atoms) sowie dem Spin aller seiner Elektronen zusammen. Der Spin hat in der klassischen Physik kein Analogon. Er ist der Eigendrehimpuls (der intrinsische Drehimpuls) von Teilchen und bei fundamentalen Teilchen so wie die Masse eine unveränderliche innere Teilcheneigenschaft. Er ist gequantelt und beträgt je nach Teilchenart ein halb- oder ganzzahliges Vielfaches des Planckschen Wirkungsquantums \hbar . Fermionen haben eine halbzahlige Spinquantenzahl, Bosonen eine ganzzahlige. Das Besondere bei Silberatomen ist, dass nur das äußerste Elektron (das $5s$ Elektron) zum magnetischen Moment beiträgt. Alle anderen Elektronen bilden abgeschlossene Schalen, deren Drehimpuls null ist. Das $5s$ Elektron hat die Bahndrehimpulsquantenzahl $l = 0$, d.h. es besitzt keinen Bahndrehimpuls. Damit wird als der Drehimpuls von Silberatomen allein durch den Spin des $5s$ Elektrons bestimmt. Ein Silberatom verhält sich wie ein einzelnes Spin-1/2-Teilchen. Da es aber im Gegensatz zum Elektron elektrisch neutral ist, kann es weder durch die Lorentzkraft im Magnetfeld noch durch elektrische Störfelder abgelenkt werden.

Die resultierende Kraft, die auf die Silberatome wirkt, lässt sich aus der potentiellen Energie U ableiten. Diese ist gegeben durch

$$U = -\vec{\mathcal{M}}\vec{B}. \quad (7.357)$$

Dabei ist \vec{B} das Magnetfeld und $\vec{\mathcal{M}}$ das magnetische Moment des Silberatoms. Dieses ist (siehe obige Bemerkungen)

$$\vec{\mathcal{M}} = \gamma\vec{\mathcal{S}}, \quad (7.358)$$

wobei $\vec{\mathcal{S}}$ der Spin des Valenzelektrons und γ das sogenannte gyromagnetische Verhältnis ist. Die Kraft \vec{K} auf die Silberatome ist somit

$$\vec{K} = -\vec{\nabla}U = \vec{\nabla}(\vec{\mathcal{M}}\vec{B}). \quad (7.359)$$

Das Drehmoment $\vec{\Gamma}$ im magnetischen Feld berechnet sich aus dem magnetischen Moment $\vec{\mathcal{M}}$ und dem Magnetfeld gemäß

$$\vec{\Gamma} = \vec{\mathcal{M}} \times \vec{B}. \quad (7.360)$$

Der Drehimpulssatz besagt, dass die zeitliche Änderung des Drehimpulses durch das Drehmoment gegeben ist, also hier

$$\frac{d\vec{\mathcal{S}}}{dt} = \vec{\Gamma}. \quad (7.361)$$

Damit haben wir hier

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \gamma \vec{S} \times \vec{B}. \quad (7.362)$$

Es steht also $d\vec{S}/dt$ senkrecht auf \vec{S} . Wenn wir mit θ den (festen) Winkel zwischen \vec{S} und \vec{B} bezeichnen, so dreht sich also das Drehmoment \vec{S} auf einem Kegel mit Öffnungswinkel θ um die Richtung, die durch das magnetische Feld \vec{B} gegeben ist. Es gibt eine Präzession von \vec{S} bzw. \vec{M} um \vec{B} , welches wir in z -Richtung legen, also

$$\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_0 \end{pmatrix}. \quad (7.363)$$

Wir parametrisieren die Bewegung des Spins durch

$$\vec{S}(t) = l_0 \begin{pmatrix} \sin \theta \cos(\omega_0 t + \varphi) \\ \sin \theta \sin(\omega_0 t + \varphi) \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (7.364)$$

wobei ω_0 die Präzessionsfrequenz, die sogenannte Lamorfrequenz, bezeichnet, mit

$$\omega_0 = -\gamma B_0, \quad (7.365)$$

und φ eine Phase, die durch die Anfangsbedingung gegeben ist. Zur Berechnung der Kraft können wir näherungsweise $\mathcal{M}_x = \mathcal{M}_y = 0$ setzen und $\mathcal{M}_z = \text{const.}$ annehmen.¹⁰ Damit haben wir die Kraft

$$\vec{K}' = \vec{\nabla}(\mathcal{M}_z B_z) = \mathcal{M}_z \vec{\nabla} B_z = \mathcal{M}_z \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\partial B_z}{\partial z} \end{pmatrix}. \quad (7.366)$$

Ferner ist $\partial B_z / \partial x = 0$ und $\partial B_z / \partial y = 0$. Die Kraft ist also proportional zur z -Richtung und proportional zu \mathcal{M}_z . Die Ablenkung ON der Silberatome ist damit proportional zu \mathcal{M}_z und also auch zu \mathcal{S}_z . Die Messung von ON ist somit äquivalent zur Messung von \mathcal{M}_z bzw. \mathcal{S}_z . Da die Momente der Silberatome bei Eintritt in das Magnetfeld isotrop verteilt sind, erwartet man dass der Strahl ein einziges Muster bildet, das symmetrisch bezüglich O ist. Man findet allerdings zwei separate Flecke. Wenn man die Komponente \mathcal{S}_z des Spins eines paramagnetischen Atoms misst, so gibt es also nur zwei mögliche Werte. Der Spin ist also eine quantisierte Größe, deren diskretes Spektrum nur aus zwei Eigenwerten besteht.

Wir wollen im Folgenden die quantenmechanische Behandlung des Spins betrachten.

7.8.2 Quantenmechanik für Spin 1/2

Wir postulieren, dass wir den Bahndrehimpuls \vec{L} ersetzen durch den Spin

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix}. \quad (7.367)$$

¹⁰Der Grund ist, dass die Drefrequenz von \vec{M} so groß ist, dass nur die zeitlich gemittelten Werte von \mathcal{M}_x und \mathcal{M}_y eine Rolle spielen, die aber beide 0 sind.

Der Spinkomponente S_z wird nun die Observable S_z zugeordnet. Wir wissen bereits, dass der Spin nur zwei mögliche diskrete Zustände annehmen kann. Wird also mit Hilfe der Spin-Observablen S_z der Spin in z -Richtung gemessen, so ergeben sich als Ergebnis der Messung zwei diskrete Eigenwerte, die nicht entartet sind. Diese Eigenwerte sind durch $\pm\hbar/2$ gegeben. Die zugehörigen Eigenvektoren bezeichnen wir mit $|+\rangle$ und $|-\rangle$. Sie bilden ein System von orthonormierten Basisvektoren im Hilbertraum H_s der Spinzustände, der also zweidimensional ist. Die Eigenwertgleichung lautet

$$S_z|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle. \quad (7.368)$$

Die Matrixdarstellung des Spinoperators S_z ist

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_z, \quad (7.369)$$

wobei σ_z die dritte Paulimatrix ist. Wir geben hier ohne Beweis an, dass die Spinkomponenten-Observablen S_x, S_y, S_z nicht miteinander vertauschen. Konkret lautet die Vertauschungsrelation

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk}S_k, \quad \text{mit } i, j, k = 1, 2, 3, \quad (7.370)$$

wobei ϵ_{ijk} den total antisymmetrischen Tensor mit $\epsilon_{123} = 1$ bezeichnet. Damit sind die x - und y -Komponenten der Spinobservablen durch die beiden Paulimatrizen σ_x und σ_y gegeben, konkret also

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_x \quad (7.371)$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_y. \quad (7.372)$$

Für die Eigenzustände gilt

$$\langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1 \quad \text{und} \quad \langle +|-\rangle = 0. \quad (7.373)$$

Die Vollständigkeitsrelation lautet

$$|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -| = 1. \quad (7.374)$$

Ein allgemeiner auf 1 normierter Zustand $|\psi\rangle$ im Spinraum H_s wird also dargestellt durch

$$|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle, \quad \text{mit } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (7.375)$$