

## Chronologie des Jahres 1925

Januar: Pauli formuliert das Ausschlussprinzip und eine zwei-wertige (Spin-) Quantenzahl für Elektronen im Rahmen der "alten Quantentheorie"; (Anw. z. B. auf anomalen Zeeman Effekt).

● W. Thomas und W. Kuhn finden eine Summenregel für die Intensitäten von Spektrallinien, die für die Entdeckung der Matrizenmechanik durch Heisenberg eine wichtige Rolle gespielt hat.

● Juli: Entdeckung der Matrizenmechanik durch W. Heisenberg: "Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen", Zeitschrift für Physik 33 (1925), 879 - 893.

Diese geniale Arbeit wollen wir nun verkürzt nachvollziehen.

Wir gehen, wie Sommerfeld, von einem integrab-

len Hamiltonschen System mit  $f$  Freiheitsgraden aus, für das wir Winkel-,  $\underline{\varphi}$ , und Wirkungsvariablen,  $\underline{W}$ , benützen. Sei  $x$  irgendeine "Observable" des Systems, d. h. eine reelle, stetige Funktion auf dem Phasenraum  $\mathbb{R}^{2f}$ . Das für die

folgenden Gedankengänge wichtige Beispiel ist

$x =$  eine Komponente des totalen elektrischen Dipolmomentes des Systems (für den Fall von  $N$  elektrisch geladenen Punktteilchen,  $f = 3N$ ).

$x = x(\underline{\varphi}, \underline{W})$  ist eine periodische Funktion von

$\underline{\varphi} \in \mathbb{T}^f$  und kann daher in eine Fourier-Reihe entwickelt werden:

$$x = \sum_{\underline{n} \in \mathbb{Z}^f} \hat{x}_{\underline{n}}(\underline{W}) e^{i\underline{n} \cdot \underline{\varphi}} \quad (1.43)$$

Die Zeitentwicklung der Observablen  $x$  findet man aus den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{\varphi}_j = \frac{\partial H(\underline{W})}{\partial W_j} \equiv \omega_j(\underline{W}), \quad (1.44)$$

$$\dot{W}_j = \frac{\partial H(\underline{W})}{\partial \varphi_j} = 0, \tag{1.45}$$

für alle  $j = 1, \dots, f$ , mit der Lösung

$$\underline{W} = \underline{W}_0 = \text{const.}, \quad \underline{\varphi} = \underline{\varphi}_0 + \underline{\omega} \cdot t \tag{1.46}$$

Daraus erhält man, dass

$$x(t) = \sum_{\underline{n} \in \mathbb{Z}^f} \hat{x}_{\underline{n}}(\underline{W}_0) e^{i(\underline{n} \cdot \underline{\varphi}_0 + \omega^{(\underline{n})} \cdot t)}, \tag{1.47}$$

wo  $\omega^{(\underline{n})} = \underline{n} \cdot \underline{\omega}, \quad \underline{\omega} = (\underline{\nabla} H)(\underline{W} = \underline{W}_0) \tag{1.48}$

Offenbar ist  $x(t)$  eine quasi-periodische Funktion der Zeit  $t$  mit Frequenzen  $\omega^{(\underline{n})}$  wie in (1.48).

Wenn nun  $x$  die Bedeutung einer Komponente des totalen elektrischen Dipolmomentes hat, so folgt aus den Maxwell'schen Gleichungen – wie von H. Hertz experimentell und theoretisch gezeigt – dass Licht der Kreisfrequenzen  $\omega^{(\underline{n})}, \underline{n} \in \mathbb{Z}^f$ , ausgesandt wird. Diese Kreisfrequenzen definieren

eine Darstellung der abelschen Gruppe  $\mathbb{Z}^{\neq}$ :

$$\omega_{\underline{n}} + \omega_{\underline{m}} = \omega_{\underline{n+m}}, \quad \underline{n}, \underline{m} \in \mathbb{Z}^{\neq}. \quad (1.49)$$

Die Voraussage (1.49) widerspricht den experimentellen Befunden, so wie sie im Rydberg-Ritz-schen Kombinationsprinzip zusammengefasst sind:

Die (Kreis) Frequenzen des von einem solchen System ausgesandten Lichts stellen ein Gruppoid,  $G$ , und nicht eine abelsche Gruppe dar.  $G$  besteht aus gewissen Paaren,  $(\underline{\mu}, \underline{\nu})$ , von Quantenzahlen,  $\underline{\mu}$  und  $\underline{\nu}$ , des Systems, mit  $(\underline{\mu}, \underline{\nu}), (\underline{\nu}, \underline{\lambda})$

in  $G \Rightarrow (\underline{\mu}, \underline{\lambda}) = (\underline{\mu}, \underline{\nu}) \circ (\underline{\nu}, \underline{\lambda}) \in G$ . Nach Rydberg und Ritz gilt dann, dass

$$\omega_{\underline{\mu}\underline{\lambda}} = \omega_{\underline{\mu}\underline{\nu}} + \omega_{\underline{\nu}\underline{\lambda}}, \quad (1.50)$$

$(\underline{\mu}, \underline{\nu}), (\underline{\nu}, \underline{\lambda}) \in G$ . Die Frequenz-Bedingung von Bohr, Einstein und Sommerfeld sagt nun,

dass

$$\omega_{\underline{\mu}, \underline{\nu}} = \omega_{\underline{\mu}} - \omega_{\underline{\nu}}, \quad (1.51)$$

wo  $\underline{\mu}, \underline{\nu}$  die Quantenzahlen "erlaubter Bahnen" des Systems sind. Nach Bohr und Sommerfeld gilt dann, dass

$$\left. \begin{aligned} \hbar \omega_{\underline{\mu}} &= H(\underline{W}_{\underline{\mu}}), \quad \text{wo} \\ \underline{W}_{\underline{\mu}} &= \hbar \underline{\mu}, \quad \underline{\mu} \in \mathbb{Z}^f \end{aligned} \right\} \quad (1.52)$$

Der Ansatz (1.52) ergab zumindest für harmonische Oszillatoren und für das H-Atom die richtigen Term schemata.

Heisenberg's Ansatz vom Juli 1925 kulminierte in der Forderung, dass "Observablen"  $x$  quantenmechanisch nur von Paaren  $(\underline{\mu}, \underline{\nu}) \in \mathcal{G}$  von Quantenzahlen erlaubter Übergänge abhängen dürfen, korrekter von Paaren  $(\underline{\mu}, \underline{\nu})$  von

Quantenzahlen "erlaubter Bahnen". Die Fourierkoeffizienten  $\hat{x}_{\underline{n}}(\underline{W} = h\underline{\mu})$  für Sommerfelds erlaubte Bahnen, resp. Tori, sind durch "Schemen"

$$(x_{\underline{\mu}\underline{\nu}}) \quad (1.53)$$

zu ersetzen. Das Bohrsche Korrespondenzprinzip (siehe (1.36) und folgende Formel) legt dann nahe, dass

$$x_{\underline{\mu}\underline{\mu}+\underline{n}} \approx \hat{x}_{\underline{n}}(\underline{W} = h\underline{\mu}), \quad (1.54)$$

falls  $0 < |\underline{n}| \ll |\underline{\mu}|$  ist. Da  $x$  reell ist, gilt, dass

$$\hat{x}_{-\underline{n}}(\underline{W}) = \hat{x}_{\underline{n}}(\underline{W})^*$$

wo  $*$  komplexe Konjugation bedeutet; was mit (1.54) die allgemeine "Realitätsbedingung"

$$x_{\underline{\mu}\underline{\nu}}^* = x_{\underline{\nu}\underline{\mu}} \quad (1.55)$$

nahelegt.

Wenn  $x^{(1)}$  und  $x^{(2)}$  zwei Observablen des

klassischen Systems sind, dann gilt natürlich, dass

$$(x^{(1)} \cdot x^{(2)})^{\wedge}_{\underline{m}}(\underline{W}) = \sum_{\underline{m} \in \mathbb{Z}^f} \hat{x}^{\wedge}_{\underline{n}-\underline{m}}^{(1)}(\underline{W}) \cdot \hat{x}^{\wedge}_{\underline{m}}^{(2)}(\underline{W}).$$

Heisenberg schlägt nun vor, dieses Konvolutionsprodukt auf der Gruppe  $\mathbb{Z}^f$  durch das Produkt

$$(x^{(1)} \cdot x^{(2)})_{\underline{\mu} \underline{\nu}} = \sum_{\underline{\lambda}} x_{\underline{\mu} \underline{\lambda}}^{(1)} \cdot x_{\underline{\lambda} \underline{\nu}}^{(2)} \quad (1.56)$$

zu ersetzen, wo  $\underline{\mu}$ ,  $\underline{\lambda}$  und  $\underline{\nu}$  Quantenzahlen "erlaubter Bahnen" sind. Gl. (1.56) ist nichts

anderes als das Matrixprodukt, und (1.56)

definiert eine Darstellung des Gruppoids der Paare von Quantenzahlen erlaubter Bahnen.

Kombiniert man das Rydberg-Ritzsche Kombinationsprinzip (1.50) mit der Bohr-Sommerfeldschen Frequenzbedingung (1.51) und der Hertzischen Theorie der Dipolstrahlung, so gelangt

man zur Ansicht dass, wenn  $x$  eine Komponente des elektrischen Dipolmomentes ist, dann

$$\begin{aligned} x_{\underline{\mu}\underline{\nu}}(t) &= x_{\underline{\mu}\underline{\nu}} e^{i\omega_{\underline{\mu}\underline{\nu}} \cdot t} \\ &= e^{i\omega_{\underline{\mu}} t} x_{\underline{\mu}\underline{\nu}} e^{-i\omega_{\underline{\nu}} t} \end{aligned} \quad (1.57)$$

Reinterpretiert man die klassische Hamiltonfunktion quantenmechanisch als "Diagonalschema, od. Diagonalmatrix,  $(H_{\underline{\mu}\underline{\nu}})$ , mit, nach (1.52),

$$H_{\underline{\mu}\underline{\nu}} = \hbar\omega_{\underline{\mu}} \delta_{\underline{\mu}\underline{\nu}}, \quad (1.58)$$

dann kann man (1.57) als die Gleichung

$$x_{\underline{\mu}\underline{\nu}}(t) = \left( e^{i(Ht)/\hbar} * x * e^{-i(Ht)/\hbar} \right)_{\underline{\mu}\underline{\nu}} \quad (1.59)$$

schreiben, und Heisenberg fordert nun (1.59) für beliebige Observablen  $x$ .

Nun möchte aber Heisenberg das Bohr-Sommerfeldsche Bild "erlaubter Bahnen", das in der klassischen Physik wurzelt, aus der



Quantentheorie verbannen und sucht deshalb nach einem Ersatz für Sommerfelds Quantenbedingungen (1.42), (1.52). Diesen findet er in der Thomas-Kuhn'schen Summenregel:

In einem Atom ist eine Komponente,  $X$ , des elektrischen Dipolmomentes dasselbe wie  $-Ne \times \{ \text{entsprechende Komponente des Schwerpunkts der Elektronenkonfiguration} \}$ , wo  $e$  die Elementarladung ist, und  $N = \# \text{ Elektronen}$ . Setzen wir  $X = -\frac{x}{Ne}$ ,

dann ist  $P = M \dot{X}$  die zu  $X$  kanonisch konjugierte Komponente des Schwerpunktim-pulses, wo  $M$  die Gesamtmasse der Elektronen ist. Die Thomas-Kuhn'sche Summenregel besagt nun, dass

$$\begin{aligned}
 [X, P]_{\mu\nu} &:= (X * P)_{\mu\nu} - (P * X)_{\mu\nu} \\
 &= ik \qquad (1.60)
 \end{aligned}$$

Thomas - Kuhn für den harmonischen Oszillator.

Hamilton Funktion:  $H(P, X) = \frac{P^2}{2} + \frac{\omega^2}{2} X^2$

(i) Lösung der Bewegungsgl.,  $\ddot{X}(t) = -\omega^2 X(t)$ , ist

$$X(t) = \frac{3}{2} \cos(\omega t + \varphi)$$

$$\Rightarrow \hat{X}_k = \frac{1}{2} \int_{k, \pm 1}^{\infty} \dots \quad (1)$$

Energie der Bahn:  $P = \dot{X} = -\omega \frac{3}{2} \sin(\omega t + \varphi)$

$$\begin{aligned} \Rightarrow E = H(P, X) &= \frac{(\omega \frac{3}{2})^2}{2} \sin^2(\omega t + \varphi) \\ &+ \frac{(\omega \frac{3}{2})^2}{2} \cos^2(\omega t + \varphi) \\ &= \frac{(\omega \frac{3}{2})^2}{2} \quad (2) \end{aligned}$$

(ii) "Erlaubte" Bahnen; nach Planck-Bohr-Sommerfeld

$$\oint P dX = n h$$

~~the~~  $P = -\omega \frac{3}{2} \sin(\omega t + \varphi), \quad dX = -\frac{3}{2} \sin(\omega t + \varphi) d(\omega t)$

$$\Rightarrow \oint P dX = \omega \left\{ \frac{2\pi}{\omega} \right\}^2 \int_0^{2\pi} \sin^2(\omega t) d(\omega t)$$

$$= \frac{\omega \left\{ \frac{2\pi}{\omega} \right\}^2}{2} \times 2\pi = n h$$

$$\Rightarrow \left\{ \frac{2\pi}{\omega} \right\}^2 = \frac{2 n h}{\omega} \tag{3}$$

$$\Rightarrow \text{Energie } E_n = n h \omega$$

Rydberg - Ritz:

$$\omega_{n \pm 1, n} = \pm \omega ; \quad \omega_{nm} = 0, \text{ sonst}$$

$$\text{mit } X_{n \pm 1, n} = \hat{X}_{\pm 1} = \frac{\left\{ \frac{2\pi}{\omega} \right\}}{2} \tag{4}$$

$$X_{m, n} = 0, \text{ sonst.}$$

(iii) Thomas - Kuhn Summenregel, nach Heisenberg:

$$[X, P]_{nn} = (X^* \dot{X})_{nn} - (\dot{X}^* X)_{nn}$$

$$= \sum_m \left\{ X_{nm} \left( X_{mn} i\omega_{mn} \right) - \left( X_{nm} i\omega_{nm} \right) X_{mn} \right\}$$

$$\begin{aligned}
&= X_{nn+1} X_{n+1n} i\omega + X_{nn-1} X_{n-1n} (-i\omega) \\
&- X_{nn+1} (-i\omega) X_{n+1n} - X_{nn-1} i\omega X_{n-1n} \\
&= 2i\omega \left\{ |X_{nn+1}|^2 - |X_{nn-1}|^2 \right\} \quad (5)
\end{aligned}$$

mit Realitäts bedg.  $X_{nm} = \overline{X_{mn}}$

Nun ist

$$|X_{nn+1}|^2 \stackrel{(1)}{\approx} \frac{1}{4} \sum_n^2, \text{ und}$$

$$|X_{nn-1}|^2 \stackrel{(1)}{\approx} \frac{1}{4} \sum_{n-1}^2.$$

Also:

$$\begin{aligned}
[X, P]_{nn} &\approx 2i\omega \frac{1}{4} \left\{ \frac{2n\hbar}{\omega} - \frac{2(n-1)\hbar}{\omega} \right\} \\
&= i\hbar \quad (6)
\end{aligned}$$

→ Heisenbergsche Vertauschungsrelationen!

Spektrum des harmonischen Oszillators

(nach Heisenberg):

$$H(P, X)_{nn} = \left( \underbrace{\left[ \frac{P + i\omega X}{\sqrt{2}} \right]}_{\equiv a^*} * \underbrace{\left[ \frac{P - i\omega X}{\sqrt{2}} \right]}_{\equiv a} \right)_{nn} + \frac{\hbar\omega}{2}$$

Grundzustand:

$$H(P, X)_{00} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

d. h.

$$H(P, X) \Omega_0 = a^* a \Omega_0 + \frac{\hbar\omega}{2} \Omega_0$$

$$\stackrel{!}{=} \frac{\hbar\omega}{2} \Omega_0$$

$$\Rightarrow a \Omega_0 = 0$$

$$\Omega_1 := a^* \Omega_0$$

$$H(P, X) \Omega_1 = a^* a a^* \Omega_0 + \frac{\hbar\omega}{2} \Omega_1$$

$$= a^* \underbrace{[a, a^*]}_{00} \Omega_0 + \frac{\hbar\omega}{2} \Omega_1$$

$$= \hbar\omega$$

$$= \frac{3\hbar\omega}{2} \Omega_1 \quad , \quad \text{etc. (}\rightarrow \text{Übungen!)}$$

Diese Summenregel soll nun heuristisch begründet werden. Mit (1.55), (1.56) und (1.57) findet man, wenn man  $P$  wieder durch  $M\dot{X}$  ersetzt, dass

$$\begin{aligned} [X, P]_{\underline{\mu}\underline{\mu}} &= (X * M\dot{X})_{\underline{\mu}\underline{\mu}} - (M\dot{X} * X)_{\underline{\mu}\underline{\mu}} \\ &= 2iM \sum_{\underline{\nu}} |X_{\underline{\mu}\underline{\nu}}|^2 \omega_{\underline{\nu}\underline{\mu}} \quad (1.61) \end{aligned}$$

Im Bereich  $0 < |\underline{\mu} - \underline{\nu}| \ll |\underline{\mu}|$  kann man Bohr's Korrespondenzprinzip benutzen:

$$X_{\underline{\mu}\underline{\nu}} \approx \hat{X}_{\underline{\mu} - \underline{\nu}}(\underline{W} = h\underline{\mu}), \quad \omega_{\underline{\nu}\underline{\mu}} \approx (\underline{\nu} - \underline{\mu}) \cdot \underline{\omega},$$

mit 
$$\underline{\omega} \approx (\nabla H)(\underline{W} = h\underline{\mu}). \quad (1.62)$$

Würden diese Gleichungen exakt gelten, so fände man mit (1.61) sofort

$$[X, P]_{\underline{\mu}\underline{\mu}} = 0, \quad \leftarrow \text{Konvolutionsprodukt ist kommutativ!}$$

wie nicht anders zu erwarten ist. Denn wenn

(1.62) exakt wäre, so folgte

$$[X, P]_{\underline{\mu}\underline{\mu}} = (X \cdot M\dot{X})_{\underline{n}=\underline{0}}^{\wedge} - (M\dot{X} \cdot X)_{\underline{n}=\underline{0}}^{\wedge} = 0.$$

Die Thomas - Kubische Summenregel erfasst also

gerade die Abweichung des \* Produkts der Quantenmechanik vom kommutativen Produkt von Funktionen auf dem Phasenraum des klassischen Systems.

Wir berechnen nun die R.S. von (1.61) heuri-  
stisch für das Wasserstoffatom; (noch einfacher  
ist der von Heisenberg betrachtete harmonische  
Oszillator - siehe Übungen). Dazu benützen  
wir das Bohrsche Modell des Wasserstoffatoms,  
das das richtige Termschema liefert, und die  
Frequenzbedingung (1.51), <sup>Rydberg</sup> um die Korrektur-  
terme in der zweiten Gl. von (1.62), d.h. die  
Abweichung von der klassischen Strahlung-  
theorie zu bestimmen. Wir berücksichtigen  
nur Kreisbahnen und die Hauptquanten-  
zahl  $n$ . Für eine Kreisbahn gilt, dass

$$\hat{X}_k (L = \hbar n) = \frac{1}{2} \delta_{k, \pm 1} \xi_n \quad (1.63)$$

wo  $\xi_n \propto$  Radius der Kreisbahn.

Aus dem Bohrschen Modell und dem Korrespondenzprinzip folgt nun für  $|n| \gg 1$ , dass

$$|X_{nn\pm 1}|^2 \approx |\hat{X}_{\pm 1}(L = \hbar n)|^2 = \frac{1}{4} |\xi_n|^2 \quad (1.64)$$

mit

$$|\xi_n|^2 \approx \frac{2}{3} \frac{a_n^2}{Z}, \quad a_n = n^2 a_1, \quad a_1 = \frac{\hbar^2}{e^2 M};$$

( $a_1$  ist der Bohr Radius des H-Atoms, und  $Z$  ist die Atomzahl, d.h.  $Ze$  ist die Kernladung). Weiter ist, siehe (1.32), (1.34), (1.36),

$$\begin{aligned} \omega_{n+k, n} &= \frac{Z^2}{\hbar} \text{Ryd} \left( \frac{1}{(n+k)^2} - \frac{1}{n^2} \right) \\ &= \frac{Z^2}{\hbar} \text{Ryd} \frac{1}{n^2} \left( \frac{1}{1 + 2\frac{k}{n} + \left(\frac{k}{n}\right)^2} - 1 \right) \\ &= -2 \frac{Z^2}{\hbar} \text{Ryd} \frac{k}{n^3} + 3 \frac{Z^2}{\hbar} \text{Ryd} \frac{k^2}{n^4} + \dots, \end{aligned} \quad (1.65)$$

mit

$$\text{Ryd} = \frac{M e^4}{2 \hbar^2}.$$

Wegen (1.63) besteht die Summe auf der R.S. von (1.61) aus nur gerade zwei Termen, zu  $k = \pm 1$ .

Setzt man dann (1.64) und (1.65), für  $k = \pm 1$ , auf der R.S. von (1.61) ein, so findet man:



$$\begin{aligned}
[X, P]_{nn} &= 2iM \sum_k |X_{n, n+k}|^2 \omega_{n+k, n} \\
&\approx 2iM \frac{Z^2}{\hbar} \cdot 2 \frac{M e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{2 \cdot 3} \frac{\hbar^4}{Z^2 e^4 M^2} n^4 \frac{3}{n^4} \\
&= i\hbar ;
\end{aligned}$$

wie wir in den Übungen auch für den harmonischen Oszillator bestätigen werden.

September: Born und Jordan erkennen in Heisenbergs Schemen Matrizen und entwickeln die mathematischen Grundlagen der "Matrizenmechanik".

Reellen Funktionen auf dem Phasenraum eines mechanischen Systems werden systematisch Hermitesche Matrizen zugeordnet. Für Hamilton Funktionen

der Form  $H(p, x) = \frac{p^2}{2M} + V(x)$  argumentieren

Born und Jordan mit Heisenberg, dass die quantenmechanischen gleich wie die klassischen Bewegungsgleichungen lauten sollen:

$$\begin{aligned}
\dot{X} &= \frac{i}{\hbar} [H, X] \stackrel{!}{=} \frac{\partial H}{\partial P} \\
&\uparrow \\
&(1.58), (1.59)
\end{aligned}$$

und

$$\dot{P} = \frac{i}{\hbar} [H, P] \stackrel{!}{=} - \frac{\partial V}{\partial X}$$

Daraus folgt dann, dass

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} [H, [X, P]] &= [\dot{X}, P] + [X, \dot{P}] \\ &= \left[ \frac{P}{M}, P \right] - \left[ X, \frac{\partial V}{\partial X}(X) \right] = 0, \end{aligned}$$

wo  $[A, B] := A * B - B * A$  (Kommutator von A und B,

Andererseits gilt, dass

$$\frac{i}{\hbar} [H, [X, P]]_{\underline{\mu} \underline{\nu}} = i (\omega_{\underline{\mu}} - \omega_{\underline{\nu}}) [X, P]_{\underline{\mu} \underline{\nu}}.$$

Unter der Annahme, dass  $\omega_{\underline{\mu}} \neq \omega_{\underline{\nu}}$ , für  $\underline{\mu} \neq \underline{\nu}$ ,

folgt dann, dass

$$[X, P]_{\underline{\mu} \underline{\nu}} = 0, \quad \text{für } \underline{\mu} \neq \underline{\nu}.$$

Zusammen mit der Thomas - Kubischen Summenregel folgt nun, dass

$$[X, P] = i \hbar \mathbb{1}, \quad (1.66)$$

d. h. die Heisenbergschen Vertauschungsrelationen.

5.

Natürlich sind die Born-Jordanschen Argumente etwas zirkulär; aber (1.66) hat sich bewährt!

Oktober: Goudsmit und Uhlenbeck deuten Paulis neue zweiwertige Quantenzahl als Spin (Eigendrehimpuls) des Elektrons und drücken das magnetische Moment des Elektrons durch seinen Spin aus.

Anfangs November: Unabhängig von Born und Jordan entwickelt Dirac aus dem Heisenbergschen Ansatz die definitive Form der nichtrelativistischen Quantenmechanik.

Phasenraumgeometrie  $\longrightarrow$  "Quantengeometrie" (B-J,  
reelle Funktion auf  $\longrightarrow$  hermitesche Quadrat-  
Phasenraum  $\longrightarrow$  matrix

$$\{F, G\} \longrightarrow \frac{i}{\hbar} [F, G] \quad (\text{Dirac})$$
$$\dot{F} = \{H, F\} \longrightarrow \dot{F} = \frac{i}{\hbar} [H, F]$$

Transformationstheorie:  $F \sim T F T^{-1} =: \tilde{F}$ ;  
damit  $\tilde{F}$  wieder hermitesch  $\Rightarrow T$  unitär!

Mitte November: Born, Heisenberg und Jordan\*

geben unabhängig von Dirac eine umfassende Darstellung der neuen Theorie. Hermitesche Matrizen wirken auf Hilbertraum; Auftreten kontinuierlicher Spektren, Störungstheorie, Theorie des quantenmechanischen Drehimpulses auf der Grundlage der Vertauschungsrelationen

$$[L_x, L_y] = \frac{\hbar}{i} L_z + \text{zyklisch.}$$

Quantisierung der schwingenden Saite.

Aufgaben: Anwendungen (z.B. H-Atom - Pauli 1926; ...); mathematische Grundlagen; Interpretation der QM.

---

\*  
sog. "Dreimännerarbeit"

# Die Wellenmechanik

(Schrödingers "annus mirabilis" 1926)

Ausgangspunkt für die Entwicklung der Wellenmechanik ist die Analogie

Strahlenoptik	~	Hamiltonsche Mechanik
↓		↓
Wellenoptik	~	"Wellenmechanik" ?

Strahlenoptik und Hamiltonsche Mechanik können in der Form von Variationsprinzipien formuliert werden:

$$\delta \int n(x(s)) ds = 0 \quad (\text{Fermat}) \quad (1.67)$$

$$\delta \int \sqrt{E - V(x(s))} ds = 0 \quad (\text{Euler-Maupertuis}) \quad (1.68)$$

Gl. (1.67) charakterisiert den geometrischen Ort von Lichtstrahlen in einem Medium mit Brechungsindex  $n(x)$ , (1.68) den Ort mechanischer Bahnen eines Teilchens im Potential  $V(x)$  mit Gesamtenergie  $E$ .

Es folgt ein kurzer Abriss der Optik.

## (1) Strahlenoptik.

In (1.67), (1.68) bedeutet  $s$  die Bogenlänge eines Strahls resp. einer Bahn. Es empfiehlt sich jedoch, den Strahl oder die Bahn durch einen beliebigen Kurvenparameter  $t$  zu parametrisieren, mit  $ds = |\dot{x}(t)| dt$ . Ausserdem soll hier zuerst eine Hamiltonsche Behandlung der Strahlenoptik auseinandergesetzt werden: Als Hamilton Funktion

benützen wir

$$H(p, x) = \frac{1}{2} (p^2 - k^2(x)), \quad (1.69)$$

und die Bahnen sollen auf der Energiefläche

$$H(p, x) = 0 \quad (1.70)$$

verlaufen. Dabei ist  $k(x) := n(x) \frac{\omega}{c}$ . Aus

(1.69) folgen die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{x} = p, \quad \dot{p} = -k \nabla k \quad (1.71)$$

mit dem Integral

$$H(p, x) = H(\dot{x}, x) = 0,$$

siehe (1.70). Nun benützen wir wieder die Bogenlänge,  $s$ , als Strahlparameter:

$$\dot{s} = |\dot{x}| \stackrel{(1.71)}{=} |p| \stackrel{(1.70)}{=} k(x) \quad (1.72)$$

Daraus folgt für eine Funktion  $F$  der Bogenlänge:

$$\dot{F} = \dot{s} \frac{dF}{ds} = k \frac{dF}{ds} \quad (1.73)$$

Aus (1.71) erhält man, dass  $\ddot{x} = k \nabla k$ , und

mit (1.73) daher:

$$k \frac{d}{ds} \left( k \frac{dx}{ds} \right) = k \nabla k, \quad \text{oder}$$

$$\frac{d}{ds} \left( k(x) \frac{dx}{ds} \right) = \nabla k(x), \quad (1.74)$$

d.h. die Strahlengleichung. Sie ist die Euler-

Lagrange Gleichung zum Fermatschen Funktional

$$\int_{s(x_1)}^{s(x_2)} k(x(s)) ds, \quad \left( k = n \frac{\omega}{c} \right). \quad (1.75)$$

Dies zeigt man wie folgt: Wir parametrisieren einen

Lichtstrahl durch einen Kurvenparameter  $t \in [0, 1]$ ,

mit  $x(0) = x_1$  und  $x(1) = x_2$  fest. Es gilt, dass

$$ds = |\dot{x}(t)| dt, \quad |\dot{x}(t)| = \sqrt{\dot{x}(t) \cdot \dot{x}(t)}.$$

Fermat verlangt, dass

$$\delta (1.75) = \delta \int_0^1 k(x(t)) |\dot{x}(t)| dt \stackrel{!}{=} 0. \quad (1.76)$$

Daraus folgt (Euler-Lagrange Gl.), dass

$$\frac{d}{dt} \left( k \frac{\dot{x}}{|\dot{x}|} \right) - \nabla k \cdot |\dot{x}| = 0,$$

oder

$$|\dot{x}| \frac{d}{ds} \left( k \frac{1}{|\dot{x}|} |\dot{x}| \frac{dx}{ds} \right) = \nabla k \cdot |\dot{x}|,$$

d.h.

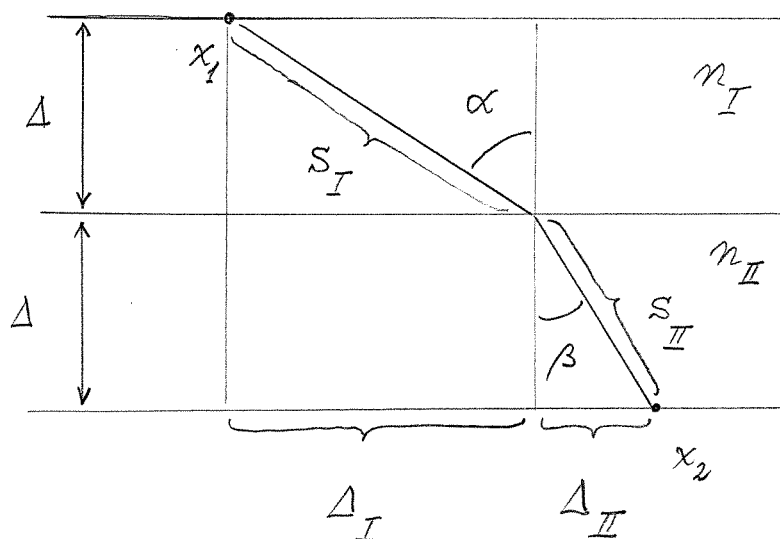
$$\frac{d}{ds} \left( k \frac{dx}{ds} \right) = \nabla k,$$

und das ist die Strahlungsgleichung (1.74).

Bemerkung. Das Fermatsche Prinzip,  $\delta(1.75) = 0$ ,

ist die infinitesimale Formulierung des Snelliusschen

Brechungsgesetzes.



Im Fermatschen Prinzip sind die Endpunkte des Lichtstrahls,  $x_1$  und  $x_2$ , fest. Wenn  $\Delta$  fest ist, so folgt also, dass



$$\Delta_1 + \Delta_2 = \Delta \tan \alpha + \Delta \tan \beta = \text{const.},$$

d.h.

$$\tan \alpha + \tan \beta =: a = \text{const.} \quad (1.77)$$

Fermats Prinzip verlangt,  $n_I s_I + n_{II} s_{II}$  zu minimisieren unter der Nebenbedingung (1.77); d.h.

$$\frac{d}{d\alpha} (n_I s_I + n_{II} s_{II}) \Big|_{(1.77)} = 0 \quad (1.78)$$

Die Figur zeigt, dass

$$s_I = \frac{\Delta}{\cos \alpha}, \quad s_{II} = \frac{\Delta}{\cos \beta}$$

Daher folgt aus (1.78):

$$\Delta \left( n_I \cdot \frac{\sin \alpha}{\cos^2 \alpha} + n_{II} \frac{\sin \beta}{\cos^2 \beta} \cdot \frac{d\beta}{d\alpha} \right) = 0, \quad (1.79)$$

wo  $\frac{d\beta}{d\alpha}$  aus der Nebenbedingung (1.77) folgt:

$$\frac{d}{d\alpha} (1.77) = 0 \Rightarrow \frac{1}{\cos^2 \alpha} + \frac{1}{\cos^2 \beta} \cdot \frac{d\beta}{d\alpha} = 0$$

In (1.79) eingesetzt, folgt:

$$\Delta \left( n_I \frac{\sin \alpha}{\cos^2 \alpha} - n_{II} \frac{\sin \beta}{\cos^2 \alpha} \right) = 0, \quad \text{d.h.}$$

$$n_I \sin \alpha = n_{II} \sin \beta,$$

und das ist das Snelliussche Gesetz. /

Nun untersuchen wir die verkürzte Hamilton-Jacobi Gleichung zur Hamilton Funktion (1.69) und  $E = 0$  (Nebenbedingung (1.70)!):

$$H(\nabla S, x) = 0 \Rightarrow |\nabla S| = k \quad (1.80)$$

Das ist die Eikonalgleichung. Da

$$\nabla S = p = \dot{x},$$

sind die Lichtstrahlen offenbar die Orthogonaltrajektorien zu den Niveauflächen der Funktion  $S$ , die aus der Eikonalgleichung zu bestimmen ist.

Nun reproduzieren wir den Übergang von der Strahlen- zur

## (2) Wellenoptik

Es sei

$$\psi(x, t) = u_\omega(x) e^{-i\omega t}, \quad (1.81)$$

250  $\text{Re } \psi$  eine Komponente des elektrischen oder

magnetischen Feldes einer monochromatischen Welle sei. Die Funktion  $\psi$  erfüllt die Wellengleichung

$$\left( \frac{n^2(x)}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \psi = 0. \quad (1.82)$$

Setzt man den Ansatz (1.81) in (1.82) ein, so folgt die Helmholtzgleichung:

$$(\Delta + k^2(x)) u_\omega(x) = 0. \quad (1.83)$$

Zur Lösung von (1.83) machen wir den Ansatz

$$u(x) = A(x) e^{iS(x)}, \quad A, S \text{ reell.} \quad (1.84)$$

Einsetzen in (1.83) und Zerlegen in Real- und Imaginärteil ergibt dann:

$$(\nabla S)^2 = k^2 + \frac{\Delta A}{A}, \quad \frac{\nabla A}{A} \cdot \nabla S = -\frac{1}{2} \Delta S \quad (1.85)$$

Die Strahlenoptik erscheint im Grenzfall, wo

$$\left| \frac{\Delta A}{A} \right| \ll k^2, \quad (1.86)$$

also

$$(\nabla S)^2 \approx k^2,$$

was der Eikonalgleichung entspricht.

(3) Übergang von der Hamiltonschen Mechanik zur Wellenmechanik.

So wie die Strahlenoptik in der Eikonalgleichung (1.80) und der Gleichung  $\dot{x} = p = \nabla S$  zusammengefasst ist, so lässt sich die Hamiltonsche Mechanik eines Punktteilchens in einem zeitunabhängigen Potentialfeld  $V(x)$  durch die verkürzte Hamilton-Jacobi Gleichung

$$H(\nabla S, x) = \frac{1}{2m} (\nabla S)^2(x) + V(x) = E \quad (1.87)$$

ausdrücken, mit

$$m\dot{x} = p = \nabla S. \quad (1.88)$$

Der Zusammenhang zwischen dem Prinzip von Euler-Maupertuis (1.68) und (1.87), (1.88) entspricht demjenigen zwischen dem Fermatschen Prinzip und der Eikonalgleichung (1.80).

So wie die Eikonalgleichung eine Approximation

zur Wellenoptik ist, siehe (1.82)-(1.86), so soll die Hamilton-Jacobi Gleichung (1.87) nach Schrödinger als "Eikonalapproximation" zu einer Wellengleichung für die de Broglieschen Materiewellen aufgefasst werden!

Nach de Broglie ist der Wellenvektor,  $k$ , der Materiewelle eines Teilchens mit Impuls  $p$  durch

$$k = \frac{p}{\hbar} \quad (1.89)$$

gegeben, und deren Kreisfrequenz  $\omega$  durch

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad (E = H(p, x)). \quad (1.90)$$

Für  $H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$  folgt, mit (1.87), (1.88)

und (1.89), dass

$$|k| = \frac{|p|}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(E - V(x))}}{\hbar} \stackrel{(1.87)}{=} \frac{|VS|}{\hbar} \quad (1.91)$$

Diese Gleichung entspricht der Eikonalgleichung

(1.80), wenn man  $S_{\text{Optik}} \sim \frac{S_{\text{Mechanik}}}{\hbar}$  setzt.

Der Helmholtzgleichung (1.83) muss dann offenbar die Gleichung

$$(\Delta + k^2(x)) u_\omega(x) = 0 \quad (1.92)$$

Für eine Wellenfunktion  $\psi(x,t) = u_\omega(x) e^{-i\omega t}$ ,

die die Materiewelle eines Teilchens im äusseren

Potential  $V(x)$  beschreibt, entsprechen; und dabei

ist

$$k^2(x) \stackrel{(1.91)}{=} \frac{|\nabla S|^2}{\hbar^2} \stackrel{(1.87)}{=} \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \quad (1.93)$$

Die Gleichungen (1.92) und (1.93) sind äquivalent zur zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x)\right) u_\omega(x) = E u_\omega(x), \quad (1.94)$$

mit  $E = \hbar\omega$ . Setzt man den Ansatz

$$u_\omega(x) = A(x) e^{iS(x)/\hbar} \quad (1.95)$$

in die Gleichung (1.94) ein, dann folgt im

Grenzfall, wo  $|\Delta A/A| \ll k^2 = \frac{2m(E - V)}{\hbar^2}$ ,

wieder die Hamilton-Jacobi Gleichung (1.87)! 70

Wenn  $u_\omega$  (1.94) erfüllt, mit  $\omega = \frac{E}{\hbar}$ , dann erfüllt  $\psi(x, t) = u_\omega(x) e^{-i\omega t}$  die Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi, \quad (1.96)$$

und das ist die zeitabhängige Schrödingergleichung. Da diese linear und homogen ist, kann die allgemeine Lösung von (1.96) als Superposition der speziellen Lösungen  $\psi = u_\omega e^{-i\omega t}$ , wo  $u_\omega$  (1.94) erfüllt, dargestellt werden.

Wir studieren kurz den Spezialfall von (1.96), wo  $V \equiv 0$ , nämlich die Schrödingergleichung für ein kräftefreies Teilchen in  $n$  Dimensionen.

Wir fassen (1.96) als ein Aufangswertproblem auf, mit  $\psi(x, 0) = \psi_0(x)$  vorgegeben. Wir lösen dieses Anfangswertproblem zunächst für

$\psi_0(x) = \delta(x-x_0)$ , ( $n$ -dim. Diracsche  $\delta$ -Funktion).

Offenbar gilt, dass

$$\delta(x-x_0) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int e^{ik \cdot (x-x_0)} d^n k. \quad (1.97)$$

Für die Lösung,  $\psi(x,t)$ , von (1.96) mit  $V \equiv 0$  zur Anfangsbedingung  $\psi(x,0) = \delta(x-x_0)$  machen

wir nun den Ansatz

$$\psi(x,t) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int e^{i[k \cdot (x-x_0) - \omega(k) \cdot t]} d^n k. \quad (1.98)$$

Eingesetzt in (1.96) finden wir, dass

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (1.99)$$

sein soll. Nun berechnen wir (1.98) mit Hilfe von quadratischer Ergänzung und Gaußscher

Integration:  $y := x - x_0$ ,

$$\hbar \cdot y - \frac{\hbar k^2}{2m} t = - \underbrace{\left( \hbar k - \frac{m}{t} y \right)^2}_{=: \varrho} \frac{t}{2m\hbar} + \frac{m}{2t\hbar} y^2$$

Dann



$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} e^{\frac{im}{2t\hbar}(x-x_0)^2} \int_{\mathbb{C}} e^{-\frac{it}{2m\hbar}q^2} d^n q.$$

Setzt man  $q = (1-i\varepsilon)l$ ,  $\varepsilon > 0$ , so konvergiert das Gaußsche Integral, und wir finden (für  $\varepsilon \rightarrow 0$ ,

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{(2\pi i \frac{\hbar}{m})^{n/2}} \left(\frac{m}{t}\right)^{n/2} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2t} (x-x_0)^2} \\ &=: K^{(n)}(x-x_0, t). \end{aligned} \quad (1.100)$$

Die allgemeine Lösung des Anfangswertproblems (1.96), ergibt sich aus (1.100) durch Superposition:

$$\psi_0(x) = \int \delta(x-x_0) \psi_0(x_0) d^n x_0$$

$$\Rightarrow \psi(x, t) = \int_{\mathbb{R}^n} K^{(n)}(x-x_0, t) \psi_0(x_0) d^n x_0. \quad (1.101)$$

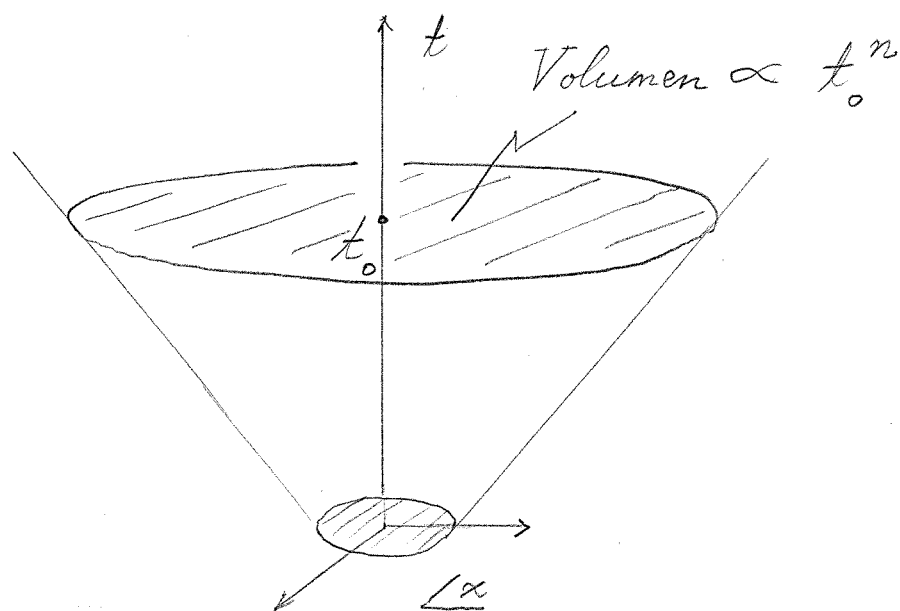
Falls  $|\psi_0(x)|$  integrierbar in  $x$  ist, so folgt aus (1.101) und (1.100) die Abschätzung

$$|\psi(x, t)| \leq \text{const. } t^{-n/2},$$

und

$$w(x, t) = |\psi(x, t)|^2 \leq \text{const. } t^{-n} \quad (1.102)$$

Diese Abschätzungen zeigen, dass das Wellenpaket  $\psi(x, t)$  so zerfließt, wie man es im  $n$ -dimensionalen Raum erwarten würde, wenn man  $\psi(x, t)$  als Verteilung des Orts,  $x$ , des Teilchens interpretiert.



## Wellenmechanik von Systemen (Schrödinger 1926)

Schrödinger formuliert nun die Wellenmechanik systematisch für Lagrangesche Systeme mit Lagrange Funktion

$$L(x, \dot{x}) = T(x, \dot{x}) - U(x), \quad (1.103)$$

wo  $x = (x^1, \dots, x^f)$  beliebige (lokale) Koordinaten eines Konfigurationsraums  $K$  sind, der durch

eine "beliebige", glatte,  $f$ -dimensionale Mannigfaltigkeit beschrieben wird; (Standardbeispiel:  $K = \mathbb{R}^f$ ,

Der Phasenraum,  $\Gamma$ , des Systems entspricht dann dem Kotangentenbündel,  $T^*K$ , von  $K$ . Schrödinger nimmt an,  $V(x)$  sei eine glatte (der Einfachheit halber nach unten beschränkte) Funktion, und  $T(x, \dot{x})$  sei eine positiv-definite quadratische Form

in  $\dot{x} = (\dot{x}^1, \dots, \dot{x}^f)$ :

$$T(x, \dot{x}) = \frac{1}{2} g_{kl}(x) \dot{x}^k \dot{x}^l, \tag{1.104}$$

wo  $(g_{kl}(x))$  eine Riemannsche Metrik auf  $K$  definiert. Bei einem Koordinatenwechsel

$$\tilde{x}^k = \tilde{x}^k(x^1, \dots, x^f), \quad k = 1, \dots, f,$$

findet man, dass

$$\dot{\tilde{x}}^k = \frac{\partial \tilde{x}^k}{\partial x^l} \dot{x}^l, \quad \tilde{g}_{mn}(\tilde{x}) = g_{kl}(x) \frac{\partial x^k}{\partial \tilde{x}^m} \frac{\partial x^l}{\partial \tilde{x}^n}.$$

Die kanonischen Impulse sind durch

---

\* Wir verwenden die Einsteinsche Summationskonvention.

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^k} = g_{kl} \dot{x}^l \Rightarrow \dot{x}^l = g^{lm} p_m \quad (1.105)$$

gegeben, wo  $(g^{lm})$  die Inverse von  $(g_{jk})$  ist.

Die Hamilton Funktion ist nach (1.103), (1.104)

$$H(p, x) = \frac{1}{2} g^{kl}(x) p_k p_l + U(x) \equiv \frac{1}{2} (p, p) + U(x). \quad (1.106)$$

Die Impulse transformieren unter einem Koordinatenwechsel gemäss

$$\tilde{p}_k = p_m \frac{\partial x^m}{\partial \tilde{x}^k},$$

wo  $(\tilde{p}_1, \dots, \tilde{p}_f)$  kanonisch konjugiert zu  $(\tilde{x}^1, \dots, \tilde{x}^f)$

sind. Man sieht dann, dass  $\frac{1}{2} (p, p) = \frac{1}{2} (\tilde{p}, \tilde{p})$

koordinatenunabhängig ist. Die Impulse trans-

formieren offenbar wie die Komponenten des Gradienten einer Funktion. Wenn  $S$  eine Funktion auf  $K$  ist, so ist dann

$$(\nabla S, \nabla S) := \frac{1}{2} g^{kl}(x) \frac{\partial S}{\partial x^k}(x) \frac{\partial S}{\partial x^l}(x)$$

koordinatenunabhängig.

Die verkürzte Hamilton-Jacobi Gleichung für die

Wirkungsfunktion  $S$  lautet

$$H(\nabla S, x) = \frac{1}{2} (\nabla S, \nabla S) + U(x) = E, \quad (1.107)$$

mit  $p = \nabla S$ , oder  $x^l = g^{lm}(x) \frac{\partial S}{\partial x^m}(x)$ .

Der Laplace - Beltrami Operator,  $\Delta$ : Da  $T$  positiv-

definit sein soll, muss  $(g_{kl}(x))$  eine strikte positive Matrix sein,  $\forall x \in K$ . Daraus folgt, dass

$$g(x) = \det(g_{kl}(x)) > 0, \quad \forall x \in K.$$

Aus den Transformationsformeln für  $(g_{kl})$  folgt, dass

$$\tilde{g}(\tilde{x}) = g(x) \det \left( \frac{\partial x^k}{\partial \tilde{x}^m} \right)^2$$

Diese Gleichung zeigt, dass

$$d\text{vol}(x) := \sqrt{g(x)} \, d^m x \quad (1.108)$$

ein koordinatenunabhängiges Volumenmass auf  $K$  definiert. Seien  $u$  und  $v$  zwei glatte

Funktionen auf  $K$  von kompaktem Träger. Wir

definieren den Laplace (-Beltrami) Operator,  $\Delta$ ,

koordinatenunabhängig durch die Gleichung

$$\int_K \text{dvol } u (\Delta v) := - \int_K \text{dvol } (\nabla u, \nabla v) \quad (1.109)$$

In Koordinaten

$$\begin{aligned} \int_K \sqrt{g} d^d x u (\Delta v) &:= - \int_K \sqrt{g} d^d x g^{kl} \frac{\partial u}{\partial x^k} \frac{\partial v}{\partial x^l} \\ &= \int_K \sqrt{g} d^d x u \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^k} \left( \sqrt{g} g^{kl} \frac{\partial v}{\partial x^l} \right), \end{aligned}$$

und wir haben partiell integriert. Da  $u$  beliebig ist, folgt

$$\Delta v = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^k} \left( \sqrt{g} g^{kl} \frac{\partial v}{\partial x^l} \right) \quad (1.110)$$

Übung. Man benütze (1.109) oder (1.110), um die

Identitäten

$$\Delta(uv) = u(\Delta v) + 2(\nabla u, \nabla v) + (\Delta u)v$$

und

$$e^{-u} (\Delta e^u) = \Delta u + (\nabla u, \nabla u)$$

(1.111)

zu beweisen.

Schrödinger quantisiert das hier betrachtete Hamiltonsche System, indem er die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \Delta + U(x)\right) u(x) = E u(x) \quad (1.112)$$

ansetzt. Mit

$$u(x) = A(x) e^{iS(x)/\hbar} \quad (1.113)$$

findet man dann mit (1.111) die Gleichungen

$$\frac{1}{2} (\nabla S, \nabla S) + U(x) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\Delta A}{A} = E,$$

$$\left(\text{und } \frac{\nabla A}{A} \cdot \nabla S = -\frac{1}{2} \Delta S, \rightarrow (1.85)\right).$$

Wenn  $\hbar \rightarrow 0$ , geht die erste Gleichung in die

Hamilton-Jacobi Gleichung über. Eine Lösung

von (1.112) beschreibt eine monochromatische Welle

$$\psi(x, t) = u(x) e^{-i\omega t},$$

mit Kreisfrequenz  $\omega = E/\hbar$ . Damit findet man

die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2} \Delta + U\right) \psi \quad (1.114)$$

Essentiell ist die Beobachtung, dass die

Schrödinger'schen Wellenfunktionen auf dem  $f$ -dimen-

sionalen Konfigurationsraum des Systems definiert  
sind, und nicht auf dem physikalischen Raum  $E^3$ . Die Koordinaten  $x^j$  brauchen keine Ortskoordinaten zu sein, sondern könnten z. B. Amplituden von Normalschwingungen des elektromagnetischen Feldes in einem Hohlraum sein.

## Beispiele

### 1. N-Teilchensystem.

$$L = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N m_k (\dot{\vec{x}}_k)^2 - U(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N),$$

mit  $K = \mathbb{R}^{3N}$ . Dies führt auf die Schrödinger-  
gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( - \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_j} \Delta_j + U \right) \psi,$$

wo

$$\Delta_j = \sum_{l=1}^3 \frac{\partial^2}{(\partial x_j^l)^2}.$$

Allgemeiner: Teilchen im äusseren elektromagnetischen Feld mit Vektorpotential  $\vec{A}(\vec{x}, t)$  (z. B. in der Coulomb Eichung  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ ); führt auf



die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; t) = \left( \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_j} \left( -i\vec{\nabla}_j - \frac{e_j}{\hbar c} \vec{A}(\vec{x}_j, t) \right)^2 + \sum_{j=1}^N e_j \phi(\vec{x}_j, t) + U(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \right) \psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; t). \quad (1.115)$$

(Wird in den Übungen studiert!)

Diese Beispiele führen auf die Substitutionsregel

$$p_j \longmapsto \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x^j} \quad (1.116)$$

## 2. Punktteilchen auf Einheitskugel

Polarkoordinaten im physikalischen Raum

$$\vec{x} = r (\sin\vartheta \cos\varphi, \sin\vartheta \sin\varphi, \cos\vartheta)$$

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\vartheta^2 + r^2 \sin^2\vartheta d\varphi^2$$

$$\Rightarrow (g_{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \sin^2\vartheta \end{pmatrix}, \quad \sqrt{g} = r^2 \sin\vartheta.$$

$$(g^{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^{-2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{r^2 \sin^2\vartheta} \end{pmatrix}$$

Mit (1.110)

$$\Delta = \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial r} \cdot \right) + \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \cdot \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{\partial}{\partial \varphi} \cdot \right) \right]$$

$$= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Lambda, \quad \text{wobei}$$

$$\Lambda = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \cdot \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

(Laplace-Beltrami Operator auf Einheitskugel).

$$L = T = \frac{\oplus}{2} |\dot{\vec{n}}|^2 = \frac{\oplus}{2} (\dot{\vartheta}^2 + \sin^2 \vartheta \dot{\varphi}^2)$$

Dies führt auf die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2 \oplus} \Lambda \psi \quad (1.117)$$

Anwendung: 2-atomige Moleküle (e.g. spezifische Wärme).

Härteres Beispiel: Allg. starrer Körper; (evtl. Übungen).

Alle diese Beispiele wurden schon von Schrödinger im Jahre 1926 durchexerziert!