

Theoretische Physik

FS 13

G.M. Graf

ETH Zürich

Inhaltsverzeichnis

Elektrodynamik	5
1 Elektrostatik	5
1.1 Das Coulomb-Gesetz	5
1.2 Singuläre Ladungsverteilungen	7
1.3 Elektrostatische Energie	8
1.4 Das Potentialproblem	9
1.5 Felder in 2 Dimensionen	12
1.6 Multipolentwicklung	14
2 Die Maxwell-Gleichungen	16
2.1 Elektromagnetismus	16
2.2 Singuläre Stromverteilungen	19
2.3 Elektrodynamik	20
2.4 Elektromagnetische Potentiale	23
3 Das freie Feld	25
3.1 Ebene Wellen	25
3.2 Dynamik des freien Feldes	27
4 Die Erzeugung elektromagnetischer Wellen	30
4.1 Lösung der inhomogenen Wellengleichung	30

4.2	Ausstrahlung	31
5	Das Relativitätsprinzip	36
5.1	Das klassische Relativitätsprinzip	36
5.2	Das Einsteinsche Relativitätsprinzip	37
5.3	Lorentz–Transformationen	38
5.4	Diskussion der Lorentz–Gruppe	40
6	Relativistische Elektrodynamik und Mechanik	44
6.1	Elektrodynamik	44
6.2	Relativistische Mechanik	47
	Quantenmechanik	51
7	Die frühe Quantentheorie	51
7.1	Das Plancksche Strahlungsgesetz (1900)	51
7.2	Licht als Teilchen (Einstein 1905)	55
7.3	Die Bohrsche Quantenhypothese (1913)	56
7.4	Die Quantisierung der Wirkung (Sommerfeld 1915)	58
7.5	Emission und Absorption (Einstein 1917)	61
7.6	Licht als Teilchen (Compton 1922)	63
7.7	Teilchen als Welle (de Broglie 1923)	63
8	Wellen- und Matrizenmechanik	65
8.1	Wellenmechanik und Schrödinger-Gleichung	65
8.2	Matrizenmechanik und Heisenberg-Gleichung	68
9	Die allgemeine Form der Quantenmechanik	72
9.1	Darstellung im Hilbertraum	72
9.2	Das freie Teilchen	80
9.3	Der harmonische Oszillator	81
9.4	Symmetrien und Erhaltungssätze	85

10 Das Zweikörperproblem	87
10.1 Schwerpunkts- und Relativbewegung	87
10.2 Das Wasserstoff-Atom	89
11 Näherungsmethoden	92
11.1 Störung des Eigenwertproblems	92
12 Drehimpuls und Spin	96
12.1 Symmetrien im Hilbertraum	96
12.2 Drehungen	99
12.3 Irreduzible Darstellungen	101
12.4 Einschub: Zusammengesetzte Quantensysteme	103
12.5 Addition von Drehimpulsen	104
12.6 Die quantenmechanische Drehgruppe $SU(2)$	105
12.7 Der Spin des Elektrons	108
12.8 Einschub: Gemischte Zustände	111
13 Zurück zu den Grundlagen	114
13.1 Das EPR-Paradoxon	114
13.2 Verborgene Variablen	115
13.3 Die Bellsche Ungleichung	119
13.4 Quanten Teleportation	120
Formelsammlung zur Vektoranalysis	122
A Anhang: Distributionen	123
B Anhang: Tensorkalkül	126
C Anhang: Selbstadjungierte Operatoren	134
D Anhang: Kugelfunktionen	151
E Anhang: Die Methode der stationären Phase	155

F Anhang: Symmetrien in der Quantenmechanik	157
Literaturhinweise	159
Index	161

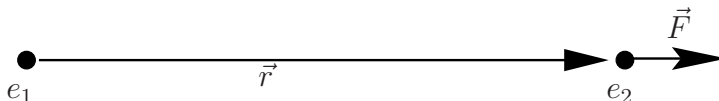
Dank gebührt Prof. W. Hunziker (†), auf dessen Skript das vorliegende basiert, z.T. durch Verwendung des Quelltextes; ferner Herrn I. Lenzo und Frau A. Schultze, sowie weiteren Mitarbeitern für die Textverarbeitung mehrerer Kapitel und Anhänge.

Erste Ausgabe: SS 98 (ED), WS 04/05 (QM).

1 Elektrostatik

1.1 Das Coulomb-Gesetz

Elektrische Ladung wurde zuerst “erzeugt” durch “elektrisieren” (z.B. Reiben von Bernstein). Franklin (1747) erkannte darin ein Trennen positiver und negativer Ladungen: die Gesamtladung eines abgeschlossenen Systems ist konstant. Dies ist der grundlegend neue Erhaltungssatz der Elektrodynamik. Priestley (1766) und Coulomb (1785) erkannten die Analogie elektrischer Kräfte zur Gravitation:



$$\vec{F} = e_1 e_2 \frac{\vec{r}}{4\pi r^3} \tag{1.1}$$

ist die Kraft auf die Punktladung \$e_2\$ in der relativen Lage \$\vec{r}\$ bezüglich der Punktladung \$e_1\$. Die Wahl der Konstanten, hier \$1/4\pi\$, ist willkürlich bis auf die Tatsache, dass sie positiv ist, da gleiche Ladungen sich ab. Die dimensionslose Wahl ist aber zweckmässig, denn so liefert Gl. (1.1) zugleich ein Mass für die Ladung. Deren Dimension ist

$$[e] = M^{1/2} L^{3/2} T^{-1} .$$

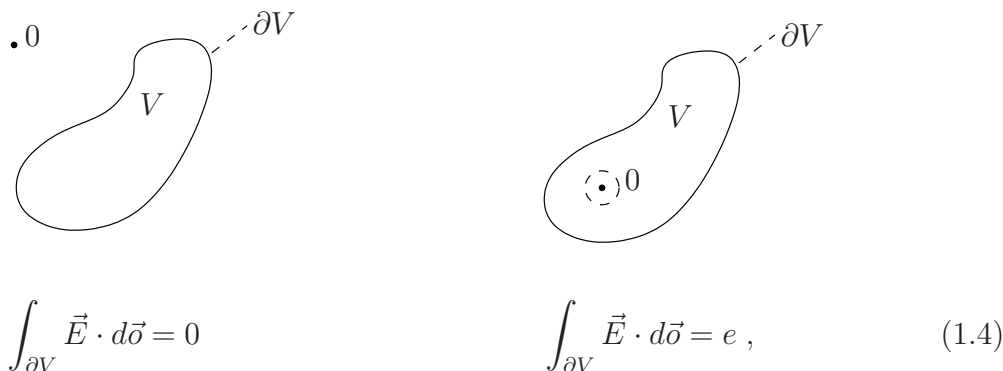
(Stattdessen könnte man eine Grundeinheit für \$e\$ unabhängig vom Coulomb-Gesetz festlegen und in (1.1) eine experimentell zu bestimmende “Gravitationskonstante” einführen.) Die mathematische Ausgestaltung der Elektrostatik geht auf Poisson (1812) zurück. Als **elektrisches Feld** \$\vec{E}(\vec{x})\$ bezeichnet man die Kraft auf die Probeladung 1 and der Stelle \$\vec{x}\$. Das Feld einer Punktladung \$e\$ bei 0 ist somit

$$\vec{E}(\vec{x}) = e \frac{\vec{x}}{4\pi r^3} = -\vec{\nabla} \frac{e}{4\pi r} , \quad (r = |\vec{x}|) , \tag{1.2}$$

da \$\vec{\nabla} r = \vec{x}/r\$. Wegen

$$\Delta \frac{1}{r} = -\text{div} \frac{\vec{x}}{r^3} = \frac{3\vec{x} \cdot \vec{x}}{r^5} - \frac{3}{r^3} = 0 , \quad (\vec{x} \neq 0) , \tag{1.3}$$

ist \$\text{div} \vec{E} = 0\$ für \$\vec{x} \neq 0\$ und



denn im zweiten Fall kann man statt ∂V ebenso gut eine Kugelfläche um $\vec{x} = 0$ wählen (Satz von Gauss); dort ist $\vec{x} \cdot d\vec{\sigma} = r do$.

Für das Feld mehrerer Punktladungen gilt das **Superpositionsprinzip**: die Felder superponieren sich vektoriell. Das von einer kontinuierlichen Ladungsdichte $\rho(\vec{x})$ erzeugte Feld ist daher

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi, \quad \varphi(\vec{x}) = \frac{1}{4\pi} \int d^3y \frac{\rho(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|}, \quad (1.5)$$

wobei ρ etwa eine glatte Funktion ist, die für grosse $|\vec{x}|$ verschwindet. Nach (1.4) ist

$$\int_{\partial V} \vec{E} \cdot d\vec{\sigma} = \underbrace{\int_V d^3x \rho(\vec{x})}_{\text{Gesamtladung in } V} \quad (1.6)$$

für beliebige Raumgebiete V (Satz vom Fluss). Aus (1.5), (1.6) und dem Satz von Gauss ergeben sich die **Feldgleichungen** der Elektrostatik:

$$\text{rot } \vec{E} = 0, \quad (1.7)$$

$$\text{div } \vec{E} = \rho, \quad (1.8)$$

die sich in der Poisson-Gleichung (1812)

$$\Delta\varphi = -\rho \quad (1.9)$$

für das **elektrische Potential** φ zusammenfassen lassen.

Statt über (1.4) kann man (1.8), (1.9) auch wie folgt herleiten: für eine glatte Funktion v mit kompaktem Träger ist

$$\int d^3x \frac{1}{|\vec{x}|} \Delta v(\vec{x}) = -4\pi v(0), \quad (1.10)$$

d.h. (s. Anhang A)

$$\Delta \frac{1}{|\vec{x}|} = -4\pi\delta(\vec{x}). \quad (1.11)$$

Mit Hilfe der **Greenschen Formel**

$$\int_{\partial V} (u\vec{\nabla}v - v\vec{\nabla}u) \cdot d\vec{\sigma} = \int_V (u\Delta v - v\Delta u) d^3x \quad (1.12)$$

und wegen (1.3) ist nämlich

$$\begin{aligned} \int_{|\vec{x}| \geq \varepsilon} d^3x \frac{1}{|\vec{x}|} \Delta v(\vec{x}) &= \int_{|\vec{x}| = \varepsilon} \left(\frac{1}{r} \vec{\nabla}v + v \frac{\vec{x}}{r^3} \right) \cdot d\vec{\sigma} \\ &= \frac{1}{\varepsilon} \underbrace{\int_{|\vec{x}| = \varepsilon} \vec{\nabla}v \cdot d\vec{\sigma}}_{\rightarrow -4\pi v(0)} - \frac{1}{\varepsilon^2} \int_{|\vec{x}| = \varepsilon} v do \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} -4\pi v(0), \\ &\quad - \int_{|\vec{x}| \leq \varepsilon} d^3x \Delta v = O(\varepsilon^3) \end{aligned}$$

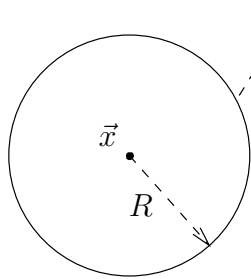
da $\vec{x} \cdot d\vec{\sigma} = -rdo$. Aus

$$\varphi(\vec{x}) = \frac{1}{4\pi} \int d^3y \frac{\rho(\vec{x} - \vec{y})}{|\vec{y}|}$$

und (1.10) folgt

$$\Delta\varphi(\vec{x}) = \frac{1}{4\pi} \int d^3y \frac{\Delta_x \rho(\vec{x} - \vec{y})}{|\vec{y}|} = \frac{1}{4\pi} \int d^3y \frac{\Delta_y \rho(\vec{x} - \vec{y})}{|\vec{y}|} = -\rho(\vec{x}).$$

Umgekehrt ist (1.5) die einzige Lösung von (1.7, 1.8) oder (1.9), welche für $|\vec{x}| \rightarrow \infty$ verschwindet. Dies beruht darauf, dass die Lösungen $\vec{E}(\vec{x})$, bzw. $\varphi(\vec{x})$ der homogenen Gleichungen ($\rho = 0$) harmonische Funktionen sind, d.h. überall der Gleichung $\Delta u = 0$ genügen. Für solche Funktionen gilt der Mittelwertsatz



$$u(\vec{x}) = \frac{1}{4\pi R^2} \int_{K_R} u \, do, \quad (1.13)$$

(\vec{x} , R beliebig).

Die Funktion $u(\vec{x}) \equiv 0$ ist die einzige Lösung von $\Delta u = 0$ mit $u(\vec{x}) \rightarrow 0$ für $|\vec{x}| \rightarrow \infty$, denn (1.13) verschwindet für $R \rightarrow \infty$. Zum Beweis von (1.13) benützt man (1.12) mit $v(\vec{y}) = |\vec{x} - \vec{y}|^{-1}$, V : Kugelschale zwischen K_ε und K_R und lässt $\varepsilon \rightarrow 0$.

1.2 Singuläre Ladungsverteilungen

Singuläre Ladungsverteilungen sind Idealisierungen, die zutreffend sind zur Beschreibung der Felder in grosser Entfernung.

- Punktladung: $\rho(\vec{x})$ ist die Distribution

$$\rho(\vec{x}) = e\delta(\vec{x} - \vec{y}),$$

oder

$$\rho(f) = ef(\vec{y})$$

und (1.5) liefert (1.2) (für $\vec{y} = 0$).

- Dipol: Ladungen e in \vec{a} und $-e$ in 0 im Limes $\vec{a} \rightarrow 0$, $e\vec{a} \rightarrow \vec{p}$. Ladungsdichte:

$$\begin{aligned} \rho(f) &= \lim e(f(\vec{a}) - f(0)) = \lim e(\vec{a} \cdot \vec{\nabla} f(0) + O(a^2)) \\ &= \vec{p} \cdot \vec{\nabla} f(0), \\ \rho &= -\vec{p} \cdot \vec{\nabla} \delta. \end{aligned} \quad (1.14)$$

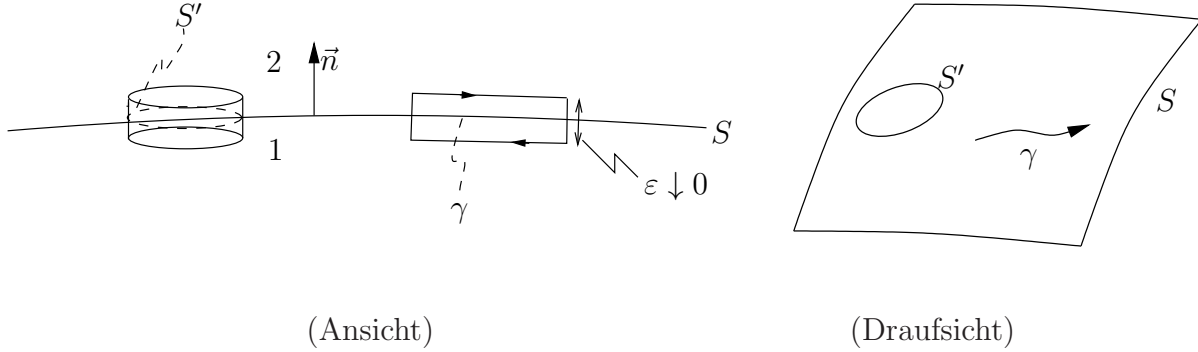
Potential:

$$\varphi = -\vec{p} \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{4\pi r} = \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{4\pi r^3}. \quad (1.15)$$

- Oberflächenladung: Fläche $S \ni \vec{y}$, Oberflächenelement $do(\vec{y})$, Flächenladungsdichte $\sigma(\vec{y})$. Ladungsdichte:

$$\rho(\vec{x}) = \int_S do \sigma(\vec{y}) \delta(\vec{x} - \vec{y}) ,$$

$$\rho(f) = \int_S do \sigma(\vec{y}) f(\vec{y}) .$$



Für die einseitigen Randwerte \vec{E}_i , $i = 1, 2$ gilt nach (1.6)

$$\left(\int_{S'} \vec{E}_i \cdot \vec{n} do \right) \Big|_1^2 = \int_{S'} do \sigma(\vec{y})$$

für jede Fläche $S' \subset S$. Also

$$\vec{E}_i \cdot \vec{n} \Big|_1^2 = \sigma . \quad (1.16)$$

Wegen $\text{rot } \vec{E} = 0$ ist $\left(\int_\gamma \vec{E}_i \cdot d\vec{s} \right) \Big|_1^2 = 0$ für jede Kurve $\gamma \subset S$, also $\vec{E}_i \cdot \vec{t} \Big|_1^2 = 0$ für \vec{t} tangential zu S . Mit $\vec{t} = \vec{e} \wedge \vec{n}$, \vec{e} beliebig, ist

$$\vec{n} \wedge \vec{E}_i \Big|_1^2 = 0 .$$

In einem **Leiter** sind Ladungsträger frei beweglich. Im Gleichgewicht wirkt auf ihnen keine Kraft und so ist dort $\vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi = 0$. Auf der Aussenseite eines Leiters gilt somit

$$(\vec{\nabla}\varphi) \cdot \vec{n} = \sigma , \quad (\vec{\nabla}\varphi) \cdot \vec{t} = 0 , \quad (1.17)$$

wobei die Normale \vec{n} in den Leiter hinein zeigt und σ die Oberflächenladungsdichte auf dessen Rand ist.

1.3 Elektrostatische Energie

Wir führen sukzessive N Punktladungen ins Feld ein, das durch die vorhergehenden gegeben ist. So ergibt sich die elektrostatische Energie

$$\begin{aligned} W_N &= W_{N-1} + \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^{N-1} \frac{e_i e_N}{|\vec{x}_i - \vec{x}_N|} \\ &= \frac{1}{4\pi} \sum_{i < j} \frac{e_i e_j}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|} = \frac{1}{8\pi} \sum_{i \neq j} \frac{e_i e_j}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|} , \end{aligned} \quad (1.18)$$

(ausgehend von $W_1 = 0$). Für eine kontinuierliche Ladungsverteilung ist entsprechend

$$\begin{aligned}
W &= \frac{1}{8\pi} \int d^3x d^3y \frac{\rho(\vec{x})\rho(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|} \\
&= \frac{1}{2} \int d^3x \rho(\vec{x})\varphi(\vec{x}) = -\frac{1}{2} \int d^3x (\Delta\varphi) \cdot \varphi \\
&= \frac{1}{2} \int d^3x (\vec{\nabla}\varphi)^2 = \frac{1}{2} \int d^3x \vec{E}^2 \geq 0.
\end{aligned} \tag{1.19}$$

Die elektrostatische Energie kann also dem Feld zugeschrieben werden, und zwar vermittels der **Energiedichte**

$$u(\vec{x}) = \frac{1}{2} \vec{E}(\vec{x})^2. \tag{1.20}$$

Beachte, dass (1.19) für das Feld einer (s.(1.2)) oder mehrerer Punktladungen divergiert und somit nicht identisch mit (1.18) ist. Vielmehr ist (1.18) gleich (benütze (1.11) und partielle Integration)

$$\begin{aligned}
\frac{1}{8\pi} \sum_{i \neq j} e_i e_j \int d^3x \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} &= \frac{1}{2} (4\pi)^{-2} \sum_{i \neq j} \int d^3x \vec{\nabla} \frac{e_i}{|\vec{x} - \vec{x}_i|} \cdot \vec{\nabla} \frac{e_j}{|\vec{x} - \vec{x}_j|} = \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int d^3x \vec{E}_i \cdot \vec{E}_j = \frac{1}{2} \int d^3x (\vec{E}^2 - \sum_i \vec{E}_i^2),
\end{aligned}$$

wobei \vec{E}_i das Feld der i -ten Ladung und $\vec{E} = \sum_i \vec{E}_i$ das gesamte Feld ist. Für Punktladungen ist also (1.18) die (renormierte) Feldenergie (1.19) nach Subtraktion der unendlichen **Selbstenergie** $\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \int d^3x \vec{E}_i^2$.

1.4 Das Potentialproblem

Wir haben (1.9) gelöst mit der Randbedingung im Unendlichen: $\varphi(\vec{x}) \rightarrow 0$, ($|\vec{x}| \rightarrow \infty$). Stattdessen, sei nun $D \subset \mathbb{R}^3$ eine offene Menge mit Rand ∂D . Gesucht ist $\varphi(\vec{x})$, ($\vec{x} \in D$), mit

$$\Delta\varphi = -\rho \quad \text{in } D, \tag{1.21}$$

$$\varphi \upharpoonright \partial D = \psi \quad \text{auf } \partial D, \tag{1.22}$$

$$\varphi(x) \xrightarrow{|\vec{x}| \rightarrow \infty} 0,$$

(letztere Bedingung nur, falls D unbeschränkt ist), wobei ρ , bzw. ψ , glatte Funktionen auf D , bzw. ∂D sind, die für $|\vec{x}| \rightarrow \infty$ verschwinden.

Die Lösung φ dieser Aufgabe minimiert das Funktional

$$\mathcal{F}[\varphi] = \int_D d^3x \left(\frac{1}{2} (\vec{\nabla}\varphi)^2 - \rho \cdot \varphi \right) \tag{1.23}$$

unter der Randbedingung (1.22), und umgekehrt, denn für jedes $\delta\varphi(\vec{x})$ mit $\delta\varphi \upharpoonright \partial D = 0$ ist

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}[\varphi + \delta\varphi] - \mathcal{F}[\varphi] &= \int_D \left(\frac{1}{2} (\vec{\nabla}\delta\varphi)^2 + \vec{\nabla}\varphi \cdot \vec{\nabla}\delta\varphi - \rho\delta\varphi \right) d^3x \\
&= \frac{1}{2} \int_D \underbrace{(\vec{\nabla}\delta\varphi)^2}_{\geq 0} d^3x - \int_D (\Delta\varphi + \rho)\delta\varphi d^3x + \int_{\partial D} \underbrace{\delta\varphi}_{=0} \cdot \vec{\nabla}\varphi d\vec{o}.
\end{aligned} \tag{1.24}$$

Insbesondere ist die Lösung von (1.21, 1.22) **eindeutig**, denn aus $\mathcal{F}[\varphi + \delta\varphi] = \mathcal{F}[\varphi]$ folgt dann $\vec{\nabla}\delta\varphi \equiv 0$, also $\delta\varphi \equiv 0$. Die **Existenz** der Lösung (bei ‘‘vernünftigen’’ Rand ∂D) zeigen wir gleich, wenn auch nur als Beweisskizze, und zwar im Wesentlichen dadurch, dass (1.23, 1.22) einen Minimierer besitzt.

Wir benötigen das Skalarprodukt

$$\langle u, v \rangle_H = \int_D d^3x (u(x)v(x) + \vec{\nabla}u(x) \cdot \vec{\nabla}v(x))$$

und der entsprechende reelle Hilbert-Raum (Sobolev-Raum) $H = H(D) = \{u \mid \|u\|_H^2 := \langle u, u \rangle_H < \infty\}$. Wichtig sind:

- i) Bei vernünftigem, beschränktem Rand ∂D gilt $\int_{\partial D} du u(x)^2 \leq C\|u\|_H^2$ für eine Konstante C .
- ii) (Satz von Rellich) Jede Folge $u_n \in H$ mit $\|u_n\|_H$ beschränkt enthält eine konvergente Teilfolge in der Norm des Skalarprodukts $\langle u, v \rangle = \int_D d^3x u(x) \cdot v(x)$ (der entsprechende Hilbert-Raum ist $L^2 = L^2(D)$).

Wir behandeln zuerst den Fall verschwindender Randwerte, $\psi = 0$. Dann ist das Variationsproblem für $\mathcal{F}[u] \equiv W[u, u] - L[u]$ auf dem linearen Raum

$$V = \{u \in H \mid u = 0 \text{ auf } \partial D\}$$

formuliert. Behauptung:

$$W[u, u] \geq c\langle u, u \rangle_H, \quad (u \in V) \tag{1.25}$$

für ein $c > 0$. Insbesondere ist $W[u, v]$ ein Skalarprodukt auf V .

Wegen (i) ist bei quadratintegrierbaren Ladungsdichte $|L[u]| \leq C\|u\|_H \leq C'W[u, u]^{1/2}$; mit dem Satz von Riesz folgt $L[u] = 2W[\varphi, u]$ für ein $\varphi \in V$. Quadratische Ergänzung zeigt, dass $u = \varphi$ das Funktional $\mathcal{F}[u] = W[u, u] - 2W[\varphi, u]$ minimiert.

Es bleibt (1.25) zu zeigen. Gäbe es keine Konstante c wie behauptet, so gäbe es eine Folge $u_n \in V$ mit (a) $\langle u_n, u_n \rangle_H = 1$, und (b) $W[u_n, u_n] \rightarrow 0$. Nach (ii) können wir (a) annehmen $u_n \rightarrow u_*$ in L^2 ; ferner gilt $\vec{\nabla}u_n \rightarrow 0$. Insbesondere ist u_n eine Cauchy-Folge, und zwar auch eine in H , sodass die Konvergenz $u_n \rightarrow u_*$ in H gilt. Es folgt $\vec{\nabla}u_* = 0$, was wegen der Randbedingung nur $u_* = 0$ zulässt. Dies aber steht im Widerspruch zu $\|u_*\|_H = 1$.

Im Fall $\psi \neq 0$ betrachte das Randwertproblem für $\tilde{\varphi} := \varphi - \psi$, wobei mit ψ auch eine (glatte) Fortsetzung von ψ auf D gemeint ist. \square

Ist speziell das Komplement $\mathbb{R}^3 \setminus D$ ein Leiter, so ist nach (1.17) $\psi = \text{const}$ auf dem Rand jeder Zusammenhangskomponente von $\mathbb{R}^3 \setminus D$. Man sagt, der Leiter sei **geerdert**, falls $\psi = 0$.

Als **Greensche Funktion** definiert man das Potential einer Punktladung 1 bei $\vec{y} \in D$ umgeben vom geerdeten Leiter ∂D :

$$\begin{aligned} G : \bar{D} \times D &\rightarrow \mathbb{R}, \\ \Delta_x G(\vec{x}, \vec{y}) &= -\delta(\vec{x} - \vec{y}), \quad (\vec{x}, \vec{y} \in D), \\ G(\vec{x}, \vec{y}) &= 0 \quad \text{für } \vec{x} \in \partial D \cup \{\infty\}, \vec{y} \in D. \end{aligned}$$

Es gilt das **Reziprozitätsgesetz**:

$$G(\vec{x}, \vec{y}) = G(\vec{y}, \vec{x}), \quad (\vec{x}, \vec{y} \in D) \tag{1.26}$$

und die **Lösung** von (1.21, 1.22) ist

$$\varphi(\vec{x}) = \int_D \rho(\vec{y}) G(\vec{y}, \vec{x}) d^3 y - \int_{\partial D} \psi(\vec{y}) \cdot \vec{\nabla}_y G(\vec{y}, \vec{x}) \cdot d\vec{\sigma}. \quad (1.27)$$

Aus (1.12) folgt nämlich für $u(\vec{x}) = G(\vec{x}, \vec{y})$, $v(\vec{x}) = G(\vec{x}, \vec{z})$ mit $\vec{y} \neq \vec{z}$

$$0 = -G(\vec{z}, \vec{y}) + G(\vec{y}, \vec{z});$$

für $u(\vec{x}) = \varphi(\vec{x})$, $v(\vec{x}) = G(\vec{x}, \vec{y})$ hingegen

$$\int_{\partial D} \psi(\vec{x}) \vec{\nabla}_x G(\vec{x}, \vec{y}) \cdot d\vec{\sigma}_x = -\varphi(\vec{y}) + \int_D G(\vec{x}, \vec{y}) \rho(\vec{x}) d^3 x.$$

Beispiele:

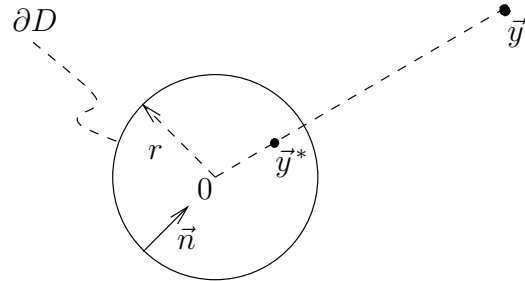
1) $D = \mathbb{R}^3$: $4\pi G(\vec{x}, \vec{y}) = |\vec{x} - \vec{y}|^{-1}$.

2) $D = \{\vec{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \mid x_1 > 0\}$ (Halbraum): Für $\vec{y} \in D$ sei $\vec{y}^* = (-y_1, y_2, y_3)$ das Spiegelbild von \vec{y} an der Ebene $x_1 = 0$. Die Greensche Funktion erhält man durch hinzufügen einer entgegengesetzten **Spiegelladung** -1 bei $\vec{y}^* \notin D$:

$$4\pi G(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{|\vec{x} - \vec{y}|} - \frac{1}{|\vec{x} - \vec{y}^*|}.$$

3) $D = \{|\vec{x}| > r\}$ (Aussenraum der Kugel)

Spiegelladung $-r/|\vec{y}|$ bei $\vec{y}^* = r^2 \vec{y} / \vec{y}^2$:



$$4\pi G(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{|\vec{x} - \vec{y}|} - \frac{r}{|\vec{y}|} \frac{1}{|\vec{x} - \vec{y}^*|}. \quad (1.28)$$

Es gilt tatsächlich $G(\vec{x}, \vec{y}) = 0$ für $\vec{x}^2 = r^2$, denn

$$\begin{aligned} (\vec{x} - \vec{y}^*)^2 &= \vec{x}^2 + \vec{y}^{*2} - 2\vec{x} \cdot \vec{y}^* = \vec{x}^2 + \frac{r^4}{\vec{y}^2} - 2\frac{r^2}{\vec{y}^2} \vec{x} \cdot \vec{y} \\ &\stackrel{(\vec{x}^2=r^2)}{=} \frac{r^2}{\vec{y}^2} (\vec{y}^2 + r^2 - 2\vec{x} \cdot \vec{y}) = \frac{r^2}{\vec{y}^2} (\vec{x} - \vec{y})^2. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Auf der Kugel wird nach (1.16) die Ladungsdichte

$$\sigma(\vec{x}) = \vec{\nabla}_x G(\vec{x}, \vec{y}) \cdot \vec{n}(\vec{x})$$

(\vec{n} : Aussennormale von D) induziert. Die gesamte **induzierte Ladung** ist gleich der Spiegelladung:

$$Q(\vec{y}) = \int_{\partial D} \vec{\nabla}_x G(\vec{x}, \vec{y}) \cdot d\vec{\sigma} = -\frac{r}{|\vec{y}|},$$

denn nach (1.27) ist $Q(\vec{y})$ die Lösung des Potentialproblems zu $\rho = 0$ und $\psi = -1$, was offensichtlich $-r/|\vec{y}|$ ist (alternativ dazu kann man auf $Q(\vec{y})$ den Satz von Gauss für $\mathbb{R}^3 \setminus D$ anwenden). Die **Kraft** der induzierten Ladung auf die Ladung 1 bei \vec{y} ,

$$\begin{aligned} \vec{F}(\vec{y}) &= -\frac{1}{4\pi} \int_{\partial D} \left(\vec{\nabla}_y \frac{1}{|\vec{y} - \vec{x}|} \right) \vec{\nabla}_x G(\vec{x}, \vec{y}) \cdot d\vec{\sigma} \\ &= \frac{1}{4\pi} \vec{\nabla}_z \left(-\int_{\partial D} \frac{1}{|\vec{z} - \vec{x}|} \vec{\nabla}_x G(\vec{x}, \vec{y}) \cdot d\vec{\sigma} \right) \Big|_{\vec{z}=\vec{y}}, \end{aligned} \quad (1.30)$$

ist ebenfalls gleich der Kraft, die von der Spiegelladung bei \vec{y}^* ausgehen würde:

$$\vec{F}(\vec{y}) = \frac{r}{4\pi|\vec{y}|} \vec{\nabla}_z \frac{1}{|\vec{z} - \vec{y}^*|} \Big|_{\vec{z}=\vec{y}}.$$

Beachte dazu, dass der Ausdruck in Klammern in (1.30), wieder nach (1.27), das Potential bei \vec{y} ist, das zu $\rho = 0$ und $\psi(\vec{x}) = |\vec{z} - \vec{x}|^{-1}$ gehört, nach (1.28) und damit gleich

$$\frac{r}{|\vec{z}|} \frac{1}{|\vec{y} - \vec{z}^*|} = \frac{r}{|\vec{y}|} \frac{1}{|\vec{z} - \vec{y}^*|},$$

denn die linke Seite ist harmonisch in $\vec{y} \in D$ und gleich dem Randwert wegen (1.28) und $G(\vec{y}, \vec{z}) = 0$, ($\vec{y} \in \partial D$); die rechte folgt aus (1.26).

Anwendung: gegeben Punktladung Q bei $\vec{y} \in D$ und Ladung Q' auf leitendem (aber nicht geerdetem) ∂D ; gesucht $\varphi(\vec{x})$:

$$\begin{aligned} 4\pi\varphi(\vec{x}) &= \left(\frac{Q}{|\vec{x} - \vec{y}|} + \frac{Q^*}{|\vec{x} - \vec{y}^*|} \right) + \frac{Q' - Q^*}{|\vec{x}|}, \\ Q^* &= -Q \frac{r}{|\vec{y}|}. \end{aligned}$$

1.5 Felder in 2 Dimensionen

Eine zweidimensionale Situation entsteht, wenn die Ladungsverteilung in einer Richtung (oEdA die 3-Richtung) translationsinvariant ist, $\rho = \rho(x_1, x_2)$. Dementsprechend suchen wir Felder der Form $\vec{E} = \vec{E}(x_1, x_2)$. Die Feldgleichungen (1.7, 1.8) liefern $E_3 = \text{const}$ und lauten für $\underline{E} = (E_1, E_2)$

$$\begin{aligned} \text{rot } \underline{E} &:= \frac{\partial E_2}{\partial x_1} - \frac{\partial E_1}{\partial x_2} = 0, \\ \text{div } \underline{E} &:= \frac{\partial E_1}{\partial x_1} + \frac{\partial E_2}{\partial x_2} = \rho. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Als Hilfsmittel steht die Funktionentheorie zur Verfügung: Sei $G \subset \mathbb{R}^2$ ein Gebiet, wo $\rho = 0$. Jede **analytische Funktion**

$$E(z) = E_1(x_1, x_2) - iE_2(x_1, x_2)$$

von $z = x_1 + ix_2$ löst (1.31) in G , denn dies sind gerade die Cauchy-Riemann Bedingungen $\partial E/\partial x_1 = (1/i)\partial E/\partial x_2$.

Auf einem einfach zusammenhängenden Gebiet lässt sich $E(z)$ stets als Ableitung

$$E(z) = -\frac{d\Phi}{dz}$$

einer ebenfalls analytischen Funktion $\Phi(z)$ schreiben. Zerlegen wir $\Phi = \varphi_1 - i\varphi_2$, so ist

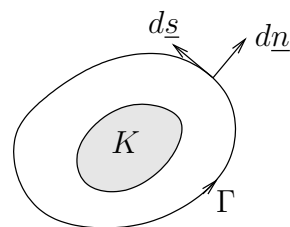
$$E_1 = -\frac{\partial\varphi_1}{\partial x_1} = \frac{\partial\varphi_2}{\partial x_2}, \quad E_2 = -\frac{\partial\varphi_2}{\partial x_1} = -\frac{\partial\varphi_1}{\partial x_2},$$

also

$$\underline{E} = -\underline{\nabla}\varphi_1, \quad \underline{E}^\perp := (-E_2, E_1) = \underline{\nabla}\varphi_2.$$

Somit ist φ_1 das Potential φ ; die Niveaulinien von φ_2 sind die Feldlinien, da sie senkrecht zu $\underline{\nabla}\varphi_2$, bzw. \underline{E}^\perp verlaufen.

Ist G nicht einfach zusammenhängend, so existiert nur das Potential φ_1 ; hingegen ist φ_2 (und damit Φ) nur als mehrwertige Funktion definiert: Für eine nicht zusammenziehbare Schleife Γ in G ist wegen $E(z) dz = (E_1 dx_1 + E_2 dx_2) + i(E_1 dx_2 - E_2 dx_1)$



$$\oint_{\Gamma} E(z) dz = \underbrace{\oint_{\Gamma} \underline{E} \cdot d\underline{s}}_{=0} + i \oint_{\Gamma} \underline{E} \cdot d\underline{n} = i \int_K \rho(x_1, x_2) dx_1 dx_2.$$

Beispiel: Das komplexe Potential eines homogen geladenen Drahts (Linienladungsdichte λ) ist

$$\Phi(z) = -\frac{\lambda}{2\pi} \log z.$$

Randwertprobleme mit $\rho = 0$ in G und Randbedingung $\varphi_1 \upharpoonright \partial G = \psi$ können mit Hilfe von **konformen Abbildungen** $f: G \rightarrow \tilde{G}$, $z \mapsto \tilde{z}$ gelöst werden: Ist $\tilde{\Phi}(\tilde{z})$ eine analytische Funktion auf \tilde{G} , so löst

$$\Phi(z) = \tilde{\Phi}(\tilde{z}) = \tilde{\Phi}(f(z))$$

das Problem, sofern die Randbedingung für $\text{Re } \Phi$ stimmt. Ist insbesondere der Rand geerdet ($\psi = 0$), so folgt durch Betrachtung von $\tilde{\Phi}(\tilde{z}) = \tilde{z}$: $\Phi(z)$ ist eine konforme Abbildung, die ∂G auf die imaginäre Achse abbildet. **Beispiel:** Sektor $G = \{z \mid 0 < \arg z < \alpha\}$ mit Öffnungswinkel $0 < \alpha \leq 2\pi$; das Gebiet ist komplementär zu einem Keil vom Winkel $\beta = 2\pi - \alpha$. Rand geerdet. Dann ist

$$\Phi(z) = \text{const} \cdot iz^{\frac{\pi}{\alpha}}$$

eine Lösung (eindeutig erst bei passenden Randbedingungen im Unendlichen). Das elektrische Feld

$$|E(z)| \propto |z|^{\frac{\pi-\alpha}{\alpha}} = |z|^{-\frac{\pi-\beta}{2\pi-\beta}}$$

verschwindet oder divergiert an der Spitze $z = 0$ je nachdem, ob $0 < \alpha < \pi$ oder $0 \leq \beta < \pi$.

1.6 Multipolentwicklung

Gegeben eine Ladungsdichte $\rho(\vec{x}')$ mit $\text{supp } \rho \subset \{|\vec{x}'| < R\}$. Wir wollen das Potential

$$\varphi(\vec{x}) = \frac{1}{4\pi} \int \frac{\rho(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} d^3x' \quad (1.32)$$

für $r = |\vec{x}| \gg R$ auswerten. Die Taylorentwicklung in \vec{x}'

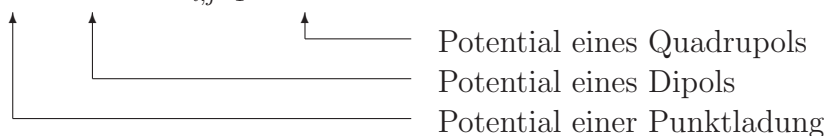
$$\begin{aligned} \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l!} (\vec{x}' \cdot \vec{\nabla})^l \frac{1}{r} \\ &= \frac{1}{r} + \frac{\vec{x} \cdot \vec{x}'}{r^3} + \frac{3(\vec{x} \cdot \vec{x}')^2 - \vec{x}^2 \vec{x}'^2}{2r^5} + \frac{1}{r} O\left(\left(\frac{R}{r}\right)^3\right) \end{aligned} \quad (1.33)$$

erhält man aus

$$\frac{1}{|\vec{x} - \lambda \vec{x}'|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \left(\frac{d}{d\lambda}\right)^l \frac{1}{|\vec{x} - \lambda \vec{x}'|} \Bigg|_{\lambda=0} \lambda^l,$$

wo $d/d\lambda$ wie $-\vec{x}' \cdot \vec{\nabla}$ wirkt. Da (1.33) in $|\vec{x}'| \leq R$ gleichmässig konvergent ist, folgt

$$4\pi\varphi(\vec{x}) = \frac{e}{r} + \frac{\vec{p} \cdot \vec{x}}{r^3} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 T_{ij} \frac{x_i x_j - \frac{1}{3} \vec{x}^2 \delta_{ij}}{r^5} + \dots, \quad (1.34)$$



wobei

$$e = \int d^3x' \rho(\vec{x}') \quad \text{Gesamtladung}$$

$$\vec{p} = \int d^3x' \vec{x}' \rho(\vec{x}') \quad \text{Dipolmoment}$$

$$T_{ij} = T_{ji} = 3 \int d^3x' x'_i x'_j \rho(\vec{x}')$$

Die 6 Funktionen $P_{ij}(\vec{x}) := (x_i x_j - (1/3)\vec{x}^2 \delta_{ij})/(2r^5)$, ($i \leq j$) sind linear abhängig, da $\sum_{i=0}^3 P_{ii} = 0$. Das Quadrupolfeld bestimmt somit die Koeffizienten T_{ij} nicht eindeutig. Stattdessen kann man es nach den linear unabhängigen Funktionen $x_i x_j / (2r^5)$ entwickeln. Dazu bemerken wir, dass der letzte Term in (1.33) symmetrisch in \vec{x} , \vec{x}' ist,

$$\frac{1}{2r^5} \sum_{i,j=1}^3 x'_i x'_j (3x_i x_j - \vec{x}^2 \delta_{ij}) = \frac{1}{2r^5} \sum_{i,j=1}^3 (3x'_i x'_j - \vec{x}'^2 \delta_{ij}) x_i x_j,$$

folglich das Quadrupolfeld auch gleich

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 Q_{ij} \frac{x_i x_j}{r^5} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 Q_{ij} \frac{x_i x_j - \frac{1}{3} \vec{x}^2 \delta_{ij}}{r^5}$$

ist, wobei der **Quadrupoltensor**

$$\begin{aligned} Q_{ij} &= Q_{ji} = \int d^3x' (3x'_i x'_j - \vec{x}'^2 \delta_{ij}) \rho(\vec{x}') \\ &= T_{ij} - \frac{1}{3} (\text{tr } T) \delta_{ij} \end{aligned} \quad (1.35)$$

spurlos ist: $\text{tr } Q = 0$. Im Unterschied zu den 6 T_{ij} 's, sind die 5 unabhängigen Q_{ij} 's durch das Feld (und nicht bloss durch ρ) eindeutig bestimmt.

Beispiel: Eine sphärisch symmetrische Ladungsverteilung $\rho(\vec{x}')$ hat $4\pi\varphi(x) = e/r$ und somit kein Quadrupolfeld, obschon i.A. $T_{ii} = \int d^3x' \vec{x}'^2 \rho(\vec{x}') \neq 0$. Jedoch: $Q = 0$.

Die Beschreibung des Potentials l -ter Ordnung ($l \geq 2$) in (1.34) mit Hilfe der (zu den T_{ij} 's analogen) Koeffizienten

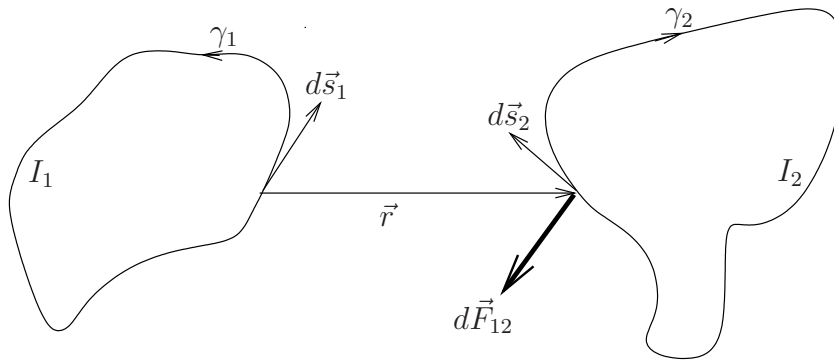
$$\int d^3x x_1^{m_1} x_2^{m_2} x_3^{m_3} \rho(\vec{x}) \quad (1.36)$$

($m_i \in \mathbb{N}$, $m_1 + m_2 + m_3 = l$) ist ebenfalls redundant: nur gewisse (den Q_{ij} analogen) Linearkombinationen davon werden benötigt. Eine systematische Erfassung dieser höheren Multipolfelder ist mit Hilfe der **Kugelfunktionen** (s. Anhang D) möglich. Wir gehen hier nicht darauf ein.

2 Die Maxwell–Gleichungen

2.1 Elektromagnetismus

Permanente Magnete (Magnetit) waren schon im Altertum bekannt. Ein Stabmagnet weist entgegengesetzte Pole auf (de Maricourt, 1269), ebenso die Erde (Gilbert 1600), die später als magnetische Ladungen aufgefasst wurden, eine heute überholte Vorstellung. Für die Wechselwirkung solcher Magnetpole postulierten Michell (1750) und Coulomb (1785) ein zum Coulomb–Gesetz (1.1) analoges Verhalten. Nichtdestoweniger galten magnetische und elektrische Erscheinungen als unabhängig. Dies änderte sich erst als Orsted (1819) die Ablenkung von Magnetnadeln in der Nähe stromführender Leiter fand: bewegte Ladungen sind magnetisch wirksam. Ampère vermutete daraufhin, dass auch (elektrisch neutrale) stromführende Leiter miteinander wechselwirken. Seine quantitative Beschreibung (1820) für zwei Linienleiter lautet:



$$\vec{F}_{12} = \int_{\gamma_2} \int_{\gamma_1} d\vec{F}_{12} = \frac{I_1 I_2}{c^2} \int_{\gamma_2} \int_{\gamma_1} \frac{d\vec{s}_2 \wedge (d\vec{s}_1 \wedge \vec{r})}{4\pi r^3} \quad (2.1)$$

ist die Kraft auf den Leiter γ_2 , die vom Leiter γ_1 ausgeht. Dabei ist I_i der **zeitlich konstante** elektrische Strom (Ladung pro Zeiteinheit), der im Leiter γ_i fließt. Da die Einheit der Ladung, und somit des Stroms, durch (1.1) bereits festgelegt ist, wird in (2.1) eine Kopplungskonstante $1/c^2$ benötigt: c hat die Dimension einer Geschwindigkeit. Aus

$$\vec{F}_{12} = -\frac{I_1 I_2}{c^2} \int_{\gamma_2} \int_{\gamma_1} \frac{\vec{r}}{4\pi r^3} (d\vec{s}_1 \cdot d\vec{s}_2)$$

(benütze dazu $d\vec{s}_2 \wedge (d\vec{s}_1 \wedge \vec{r}) = (\vec{r} \cdot d\vec{s}_2) d\vec{s}_1 - (d\vec{s}_1 \cdot d\vec{s}_2) \vec{r}$ und $-r^{-3} \vec{r} \cdot d\vec{s}_2 = d_2 r^{-1}$, sowie $\int_{\gamma_2} d_2 r^{-1} = 0$) folgt “actio = reactio” für $\vec{F}_{12} = -\vec{F}_{21}$ (nicht aber für $d\vec{F}_{12}$).

Man kann sich die Wechselwirkung (2.1) durch ein **Magnetfeld** $\vec{B}(\vec{x})$, das von einer Stromschleife erzeugt wird, vermittelt denken (Biot-Savart):

$$\vec{B}(\vec{x}) = \frac{I}{4\pi c} \int_{\gamma} \frac{d\vec{s} \wedge (\vec{x} - \vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|^3}. \quad (2.2)$$

Ein Stromelement $I d\vec{s}$ erfährt dann im äusseren \vec{B} -Feld die Kraft

$$d\vec{F} = \frac{I}{c} d\vec{s} \wedge \vec{B}. \quad (2.3)$$

Da für jeden festen Vektor \vec{e}

$$\vec{e} \wedge \frac{\vec{x}}{r^3} = \left(\vec{\nabla} \frac{1}{r} \right) \wedge \vec{e} = \text{rot} \frac{\vec{e}}{r},$$

ist (2.2) äquivalent zu

$$\vec{B} = \text{rot} \vec{A}, \quad \vec{A}(\vec{x}) = \frac{I}{4\pi c} \int_{\gamma} \frac{d\vec{s}}{|\vec{x} - \vec{y}|} \quad (2.4)$$

(\vec{A} heisst **Vektorpotential**).

Eine kontinuierliche Stromverteilung wird durch eine Stromdichte $\vec{i}(\vec{x}, t)$ beschrieben, d.h. der Strom durch eine orientierte Fläche S ist

$$I = \int_S \vec{i} \cdot d\vec{\sigma}. \quad (2.5)$$

Ganz allgemein gilt **Ladungserhaltung**:

$$\begin{aligned} \int_{\partial V} \vec{i} \cdot d\vec{\sigma} &= -\frac{d}{dt} \int_V \rho d^3x, \\ \text{div} \vec{i} &= -\frac{\partial \rho}{\partial t} \end{aligned} \quad (2.6)$$

(**Kontinuitätsgleichung**). Wir beschränken uns nun aber wieder auf den **stationären Fall** (ρ, \vec{i} unabhängig von t):

$$\text{div} \vec{i} = 0. \quad (2.7)$$

Einem Linienleiter γ , der als Kurve $\vec{x}(s)$ gegeben ist, entspricht die Stromdichte

$$\vec{i}(\vec{x}) = I \int_{\gamma} \delta(\vec{x} - \vec{x}(s)) d\vec{s} :$$

das Integral (2.5) liefert I für gleich orientierte S und γ , denn $d\vec{\sigma} \cdot d\vec{s} = d^3y$ für $\vec{y} = \vec{x} - \vec{x}(s)$. So folgt $\int_{\gamma} f(\vec{x}(s)) I d\vec{s} = \int f(\vec{y}) \vec{i}(\vec{y}) d^3y$ und im kontinuierlichen Fall lautet (2.4) dank Superposition

$$\vec{B} = \text{rot} \vec{A}, \quad \vec{A}(\vec{x}) = \frac{1}{4\pi c} \int d^3y \frac{\vec{i}(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|}, \quad (2.8)$$

wobei

$$\text{div} \vec{A} = 0$$

wegen (2.7). \vec{B} genügt damit den **Feldgleichungen**

$$\text{div} \vec{B} = 0, \quad (2.9)$$

$$\text{rot} \vec{B} = \frac{\vec{i}}{c}, \quad (2.10)$$

denn mit (1.10) ist

$$\text{rot rot} \vec{A} = \underbrace{\vec{\nabla} \text{div} \vec{A}}_{=0} - \Delta \vec{A} = \frac{\vec{i}}{c}.$$

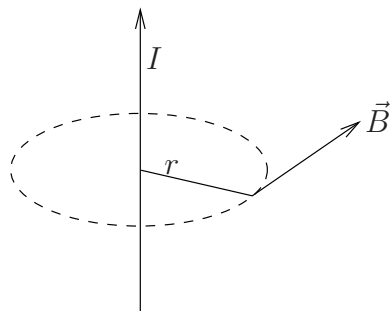
Beachte, dass (2.7) aus (2.10) folgt. Wiederum gilt Eindeutigkeit der Lösung im folgenden Sinn: für $\vec{v}(\vec{x})$, das für grosse $|\vec{x}|$ verschwindet, ist (2.8) die einzige Lösung von (2.9, 2.10) mit $\vec{B}(\vec{x}) \rightarrow 0$, ($|\vec{x}| \rightarrow \infty$). Lösungen für $\vec{v} = 0$ sind nämlich harmonisch (vgl. (1.13)).

Die Integralform von (2.9, 2.10) ist

$$\int_{\partial V} \vec{B} \cdot d\vec{\sigma} = 0, \quad \int_{\partial S} \vec{B} \cdot d\vec{s} = \frac{1}{c} \int_S \vec{v} \cdot d\vec{\sigma} \quad (2.11)$$

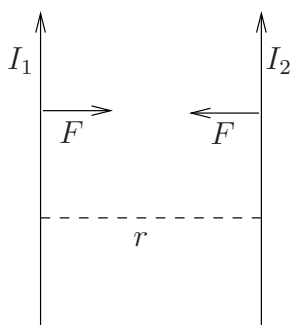
für beliebige Raumgebiete V , bzw. Flächen S .

Beispiel: Gerader Leiter. Nach (2.2) ist das Feld azimuthal gerichtet; seinen Betrag entnimmt man aus (2.11):



$$2\pi r B(r) = \frac{I}{c}$$

Kraft (2.3) pro Längeneinheit zwischen zwei parallelen Leitern:



$$F = \frac{I_1 I_2}{2\pi c^2 r}$$

Daraus haben Kohlrausch und Weber (1856) die Konstante c experimentell bestimmt: $c \approx 3 \cdot 10^8 \text{m/s}$. Kirchhoff (1857) konstatierte die überraschende Übereinstimmung mit der Lichtgeschwindigkeit (Fizeau 1849, Foucault 1850).

Die **Kraftdichte** \vec{f} auf eine kontinuierliche Stromverteilung \vec{v} im äusseren \vec{B} -Feld ist nach (2.3)

$$\vec{f} = \frac{\vec{v}}{c} \wedge \vec{B}. \quad (2.12)$$

Dies gilt auch für nicht stationäres \vec{v} . Beispiel: die Stromverteilung

$$\vec{v}(\vec{x}, t) = e\vec{v}\delta(\vec{x} - \vec{x}(t)) \quad (2.13)$$

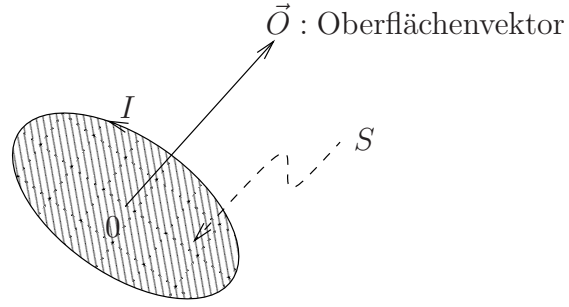
($\vec{v} = \dot{\vec{x}}(t)$) einer bewegten Ladung mit Bahn $\vec{x}(t)$ erfüllt, zusammen mit der Ladungsverteilung $\rho(\vec{x}, t) = e\delta(\vec{x} - \vec{x}(t))$, die Kontinuitätsgleichung (2.6). Auf sie übt das \vec{B} -Feld demzufolge die **Lorentz-Kraft**

$$\vec{F} = e\frac{\vec{v}}{c} \wedge \vec{B} \quad (2.14)$$

aus.

2.2 Singuläre Stromverteilungen

- Magnetisches Dipol: Stromschleife im Limes $I \rightarrow \infty$, $\vec{O} \rightarrow 0$, $I\vec{O} \rightarrow c\vec{m}$ (\vec{m} : **magnetisches Dipolmoment**).



Das \vec{A} -Feld ist

$$\vec{A}(\vec{x}) = \frac{I}{4\pi c} \int_{\partial S} \frac{d\vec{s}}{|\vec{x} - \vec{y}|} = \frac{I}{4\pi c} \int_S d\vec{o} \wedge \underbrace{\vec{\nabla}_y \frac{1}{|\vec{x} - \vec{y}|}}_{\frac{\vec{x}}{r^3} + O\left(\frac{|\vec{y}|}{r^3}\right)} \rightarrow \frac{\vec{m} \wedge \vec{x}}{4\pi r^3} = \text{rot} \frac{\vec{m}}{4\pi r},$$

das \vec{B} -Feld also

$$\begin{aligned} \vec{B} &= \text{rot} \text{rot} \frac{\vec{m}}{4\pi r} = \vec{\nabla} \text{div} \frac{\vec{m}}{4\pi r} - \vec{m} \Delta \frac{1}{4\pi r} \\ &= \vec{\nabla} \left(\vec{m} \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{4\pi r} \right) + \vec{m} \delta(\vec{x}), \end{aligned} \quad (2.15)$$

die Stromverteilung \vec{i} schliesslich

$$\vec{i} = c \text{rot} \vec{B} = -c\vec{m} \wedge \vec{\nabla} \delta.$$

Beachte, dass der erste Term in (2.15) identisch ist mit dem \vec{E} -Feld eines elektrischen Dipols $\vec{p} = \vec{m}$ (vgl. (1.14)). So versteht man, dass die ursprüngliche Vorstellung (Michell, Coulomb), magnetische Dipole bestünden aus magnetischen Ladungen, das \vec{B} -Feld (fast) korrekt zu beschreiben vermag: der Unterschied, $\vec{m} \delta(\vec{x})$, manifestiert sich nur im Innern des Magneten. Ampère nahm deshalb an, dass magnetische Dipole nur in Form von Kreisströmen existieren (Ampèresche Molekularströme): der Magnetismus wurde auf die Bewegung von Ladungen zurückgeführt. Das magnetische Moment eines quantenmechanischen Spins passt in dieses Bild bis auf die Tatsache, dass es für Elektronen doppelt so gross ist als klassisch erwartet.

Für eine kontinuierliche Magnetisierung $\vec{M}(\vec{y})$ ist

$$\vec{A}(\vec{x}) = \text{rot} \int d^3y \frac{\vec{M}(\vec{y})}{4\pi|\vec{x} - \vec{y}|} = \frac{1}{4\pi} \int d^3y \frac{\text{rot} \vec{M}(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|},$$

was nach (2.8) einer äquivalenten Stromdichte $\vec{i} = c \text{rot} \vec{M}$ entspricht.

- Oberflächenstrom: Fläche S , Flächenstromdichte $\vec{J}(\vec{y})$. Stromdichte:

$$\vec{i}(\vec{x}) = \int_S d\vec{o} \vec{J}(\vec{y}) \delta(\vec{x} - \vec{y}).$$

Für die einseitigen Randwerte \vec{B}_i , $i = 1, 2$ zur Fläche S (s. Fig. auf S. 8) gilt nach (2.11)

$$\left(\int_{S'} \vec{B} \cdot \vec{n} d\vec{o} \right) \Big|_1^2 = 0$$

für jede Fläche $S' \subset S$, also

$$\vec{B}_i \cdot \vec{n} \Big|_1^2 = 0. \quad (2.16)$$

Andererseits gilt

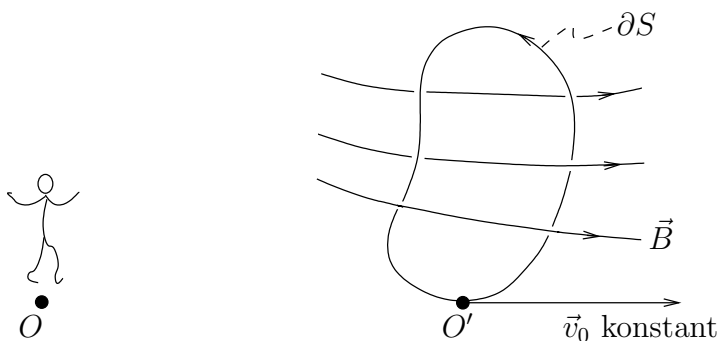
$$\left(\int_{\gamma} \vec{B}_i \cdot d\vec{s} \right) \Big|_1^2 = \frac{1}{c} \int_{\gamma} \vec{J} \cdot (\vec{n} \wedge d\vec{s}),$$

da die Normale zu der durch $\gamma^{(2)} - \gamma^{(1)}$ berandeten Fläche $\vec{n} \wedge \vec{s}$ ist (\vec{s} : Tangentialvektor zu γ). Also $\vec{B}_i \cdot \vec{t} \Big|_1^2 = c^{-1} (\vec{J} \wedge \vec{n}) \cdot \vec{t}$ für \vec{t} tangential zu S , bzw.

$$\vec{n} \wedge \vec{B}_i \Big|_1^2 = \frac{1}{c} \vec{J}.$$

2.3 Elektrodynamik

Die **Zeit** tritt erstmals im Induktionsgesetz auf. Faraday bemerkte, dass in der Spule während der Bewegung ein Strom fließt: induziert wird eine ‐elektromotorische Kraft‐.



Laborsystem O , Ruhesystem O' der Spule: Setzen wir das **klassische Relativitätsprinzip** voraus (wir werden es später verwerfen!), so gilt

$$\begin{aligned} \vec{x}' &= \vec{x} - \vec{v}_0 t, \\ \vec{v}' &= \vec{v} - \vec{v}_0, \\ \vec{F}' &= \vec{F} = e \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \wedge \vec{B} \right) \end{aligned}$$

für den Ort und die Geschwindigkeit eines Teilchens, bzw. für die Lorentz-Kraft darauf. Postuliert man noch $e' = e$, so folgt

$$\vec{E}' = \vec{E} + \frac{\vec{v}_0}{c} \wedge \vec{B}, \quad \vec{B}' = \vec{B}. \quad (2.17)$$

Wir wollen annehmen

$$\vec{E} = \vec{E}(\vec{x}), \quad \vec{B} = \vec{B}(\vec{x}), \quad (2.18)$$

d.h. \vec{E}, \vec{B} seien zeitlich unabhängige Felder, für welche die bisherigen Feldgleichungen (1.7, 1.8; 2.9, 2.10) gelten. Das Transformationsverhalten (2.17) betrifft Felder, d.h. etwa

$$\vec{B}'(\vec{x}', t) = \vec{B}(\vec{x}) = \vec{B}(\vec{x}' + \vec{v}_0 t),$$

wodurch

$$\frac{\partial \vec{B}'}{\partial t} = (\vec{v}_0 \cdot \vec{\nabla}) \vec{B}.$$

Damit ist die elektromotorische Kraft längs ∂S

$$\begin{aligned} \int_{\partial S} \vec{E}' \cdot d\vec{s}' &= \int_{\partial S} \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}_0}{c} \wedge \vec{B} \right) \cdot d\vec{s} = \int_S \underbrace{\text{rot} \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}_0}{c} \wedge \vec{B} \right)}_{=0} \cdot d\vec{\sigma} \\ &= \frac{1}{c} \int_S \left(\underbrace{(\text{div } \vec{B})}_{=0} \vec{v}_0 - (\vec{v}_0 \cdot \vec{\nabla}) \vec{B} \right) \cdot d\vec{\sigma} = -\frac{1}{c} \int_S \frac{\partial \vec{B}'}{\partial t} \cdot d\vec{\sigma}' = -\frac{1}{c} \frac{d}{dt} \int_S \vec{B}' \cdot d\vec{\sigma}'. \end{aligned}$$

Faraday (1831) fand dieses sogenannte **Induktionsgesetz** auf empirischem Wege (bis auf den Faktor $1/c$), und zwar gilt es auch, falls es kein Laborsystem mit (2.18) gibt. In einer Notation ohne Striche ist es äquivalent zur Feldgleichung

$$\text{rot } \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0,$$

die erstmals \vec{E} und \vec{B} miteinander verknüpft.

Die Vollendung der Elektrodynamik ist das Werk Maxwells: sein "Treatise on Electricity and Magnetism" erschien 1873. Sie besteht in einer Ergänzung des Ampèreschen Gesetzes (2.10):

$$\text{rot } \vec{B} = \frac{1}{c} \left(\vec{i} + \underbrace{\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}} \right). \quad (2.19)$$

Maxwellscher Verschiebungsstrom

Dadurch wird die Ladungserhaltung gerettet! Ohne Verschiebungsstrom folgt ja $\text{div } \vec{i} = 0$, was nur für Gleichstrom richtig ist. Nach (2.19) ist nun

$$\text{div } \vec{i} = -\frac{\partial}{\partial t} \text{div } \vec{E} = -\frac{\partial \rho}{\partial t}$$

wegen (1.8): wir erhalten die Kontinuitätsgleichung (2.6).

Wir fassen nun die endgültigen Feldgleichungen zusammen:

$$\begin{aligned} \text{div } \vec{B} &= 0 && \text{Homogene} \\ \text{rot } \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} &= 0 && \text{Maxwell-Gleichungen} \end{aligned} \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} \text{div } \vec{E} &= \rho && \text{Inhomogene} \\ \text{rot } \vec{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} &= \frac{\vec{i}}{c} && \text{Maxwell-Gleichungen} \end{aligned} \quad (2.21)$$

Als Folge davon gilt (2.6): Die Kontinuitätsgleichung ist eine notwendige Bedingung für die Lösbarkeit der Maxwell-Gleichung nach \vec{E} , \vec{B} (Integrabilitätsbedingung).

Dazu kommen die elektromagnetischen Kräfte, bzw. Kraftdichten

$$\begin{aligned}\vec{F} &= e(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \wedge \vec{B}), \\ \vec{f} &= \rho \vec{E} + \frac{\vec{i}}{c} \wedge \vec{B}\end{aligned}\tag{2.22}$$

auf Punktladungen, bzw. Ladungs- und Stromverteilungen.

Die für die ganze Physik revolutionären Konsequenzen dieser Theorie wollen wir hier andeutungsweise vorwegnehmen:

- Es tritt ein neues physikalisches System auf: das **freie elektromagnetische Feld** (Licht). Seine Bewegungsgleichungen sind die Maxwell-Gleichungen mit $\rho = 0$, $\vec{i} = 0$:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \text{rot } \vec{B}; \quad \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\text{rot } \vec{E}\tag{2.23}$$

mit den Nebenbedingungen

$$\text{div } \vec{E} = \text{div } \vec{B} = 0,\tag{2.24}$$

die mit (2.23) verträglich sind. Mit der Identität $\text{rot rot } \vec{E} = \vec{\nabla} \text{div } \vec{E} - \Delta \vec{E}$ folgt daraus die Wellengleichung

$$\begin{aligned}\square \vec{E} &= \square \vec{B} = 0, \\ \square &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta\end{aligned}\tag{2.25}$$

(d'Alembert-Operator). c entpuppt sich als die Ausbreitungsgeschwindigkeit des Lichts. Die Optik ist fortan ein Zweig der Elektrodynamik.

- Es gibt keine instantane Fernwirkung mehr zwischen zwei geladenen Teilchen im Abstand r . Die Wirkung ist gegenüber der Ursache um die Laufzeit des Lichts r/c verzögert. Die Möglichkeit eines kausalen Zusammenhangs zwischen zwei Ereignissen hängt von **Zeit und Ort** ab: dies führt auf die Raum-Zeit - Struktur der speziellen Relativitätstheorie und zu einer neuen Mechanik.

- Da Energie, Impuls und Drehimpuls durch das Feld nicht instantan übertragen werden, können die Erhaltungssätze nur gelten, wenn das Feld selber solche Größen trägt. Wir illustrieren dies am Beispiel der Energie: Aus der Identität

$$\text{div}(\vec{E} \wedge \vec{B}) = \vec{B} \cdot \text{rot } \vec{E} - \vec{E} \cdot \text{rot } \vec{B}$$

und den Maxwell-Gleichungen folgt

$$\text{div } c(\vec{E} \wedge \vec{B}) = -\vec{B} \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} - \vec{E} \cdot \left(\vec{i} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right),$$

also:

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{2} (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) + \text{div } c(\vec{E} \wedge \vec{B}) + \vec{i} \cdot \vec{E} = 0,$$

oder integriert über $V \subset \mathbb{R}^3$:

$$\frac{d}{dt} \int_V \frac{1}{2} (\vec{E}^2 + \vec{B}^2) d^3x = - \int_{\partial V} c(\vec{E} \wedge \vec{B}) d\vec{\sigma} - \int_V \vec{i} \cdot \vec{E} d^3x.\tag{2.26}$$

Der letzte Term ist die im Gebiet V pro Zeiteinheit auf die Ladungsträger übertragene Energie, denn für eine Punktladung (2.13) in V (dank Superposition genügt es, diesen Fall zu betrachten) beträgt er $e\vec{v} \cdot \vec{E}$, was der Leistung der Lorentz-Kraft (2.22)

$$\vec{v} \cdot \left(e\vec{E} + \frac{e}{c} \vec{v} \wedge \vec{B} \right) = e\vec{v} \cdot \vec{E}$$

entspricht. Wir definieren deshalb:

$$\begin{aligned} u &:= \frac{1}{2}(\vec{E}^2 + \vec{B}^2) && \text{Energiedichte des Feldes,} \\ \vec{S} &:= c(\vec{E} \wedge \vec{B}) && \text{Energiestromdichte des Feldes (Poynting-Vektor).} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Gl. (2.26) besagt dann, dass sich die Feldenergie im Gebiet V nur ändern kann, indem entweder Energie durch die Oberfläche ∂V strömt oder auf Ladungen in V übertragen wird. Die Gesamtenergie von Feld und Materie bleibt damit erhalten.

2.4 Elektromagnetische Potentiale

Äquivalent zu den homogenen Maxwell-Gleichungen ist die Darstellung des Feldes durch die **elektromagnetische Potentiale** $\varphi(\vec{x}, t)$, $\vec{A}(\vec{x}, t)$:

$$\vec{B} = \text{rot } \vec{A}, \quad \vec{E} = -\vec{\nabla}\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}. \quad (2.28)$$

Die inhomogenen Maxwell-Gleichungen lauten dann

$$\begin{aligned} \square\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{c} \frac{\partial\varphi}{\partial t} + \text{div } \vec{A} \right) &= \rho, \\ \square\vec{A} + \vec{\nabla} \left(\frac{1}{c} \frac{\partial\varphi}{\partial t} + \text{div } \vec{A} \right) &= \frac{\vec{i}}{c}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Die Potentiale sind dabei nur bestimmt bis auf **Eichtransformationen**

$$\varphi \longrightarrow \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial\chi}{\partial t}, \quad \vec{A} \longrightarrow \vec{A} + \vec{\nabla}\chi \quad (2.30)$$

mit einem beliebigen skalaren Feld $\chi(\vec{x}, t)$. Etwas eindeutiger werden sie durch die Forderung einer Eichbedingung, z.B. eine der folgenden:

Lorenz-Eichung

$$\frac{1}{c} \frac{\partial\varphi}{\partial t} + \text{div } \vec{A} = 0. \quad (2.31)$$

Coulomb-Eichung

$$\text{div } \vec{A} = 0. \quad (2.32)$$

Ausgehend von φ', \vec{A}' , lässt sie sich erreichen durch Lösen von

$$\square\chi = \frac{1}{c} \frac{\partial\varphi'}{\partial t} + \text{div } \vec{A}', \quad \Delta\chi = -\text{div } \vec{A}',$$

d.h. es verbleiben Eichtransformationen mit

$$\square\chi = 0, \quad \Delta\chi = 0.$$

Die inhomogenen Maxwell–Gleichungen (2.29) nehmen dann eine einfachere Form an:

$$\left. \begin{aligned} \square\varphi &= \rho, \\ \square\vec{A} &= \frac{\vec{i}}{c}. \end{aligned} \right| \quad (2.33) \quad \left. \begin{aligned} \Delta\varphi &= -\rho, \\ \square\vec{A} + \vec{\nabla}\left(\frac{1}{c}\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right) &= \frac{\vec{i}}{c}. \end{aligned} \right| \quad (2.34)$$

Bei Coulomb–Eichung kann man, wie im statischen Fall (1.5), die Lösung der ersten Gleichung (2.34) als

$$\varphi(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi} \int d^3y \frac{\rho(\vec{y}, t)}{|\vec{x} - \vec{y}|}$$

wählen. Bei stationärer Ladungsdichte ist $\partial\varphi/\partial t = 0$, so dass die Lorenz–Eichung auch noch erfüllt ist. Dies gilt insbesondere im Spezialfall $\rho \equiv 0$, wo $\varphi \equiv 0$.

3 Das freie Feld

3.1 Ebene Wellen

In der Coulomb–Eichung (2.32) lauten die Maxwell–Gleichungen (2.34) für das freie Feld ($\rho = 0, \vec{i}' = 0$)

$$\varphi = 0, \quad \square \vec{A} = 0.$$

Ebene Wellen sind Lösungen der Form

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \vec{f}(\vec{e} \cdot \vec{x} - ct), \quad (|\vec{e}| = 1)$$

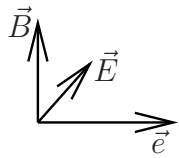
mit einer Vektorfunktion $\vec{f}(s)$ einer Variablen. Die Eichbedingung (2.29)

$$0 = \text{div } \vec{A} = \vec{e} \cdot \vec{f}', \quad (' = \frac{d}{ds})$$

besagt: $\vec{f}' \perp \vec{e}$. Die elektromagnetischen Felder (2.28)

$$\begin{aligned} \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{f}}{\partial t} = \vec{f}'(\vec{e} \cdot \vec{x} - ct), \\ \vec{B} &= \text{rot } \vec{f} = \vec{e} \wedge \vec{f}'(\vec{e} \cdot \vec{x} - ct) = \vec{e} \wedge \vec{E} \end{aligned} \quad (3.1)$$

sind transversal zur Fortpflanzungsrichtung \vec{e} . So gibt jede zu \vec{e} transversale Funktion \vec{f}' Anlass zu einer ebenen Welle, in der stets:



$$\begin{aligned} |\vec{E}| &= |\vec{B}|, \\ (\vec{e}, \vec{E}, \vec{B}) &: \text{orthogonales Rechtssystem.} \end{aligned}$$

Der Poynting–Vektor

$$\vec{S} = c \vec{E} \wedge \vec{B} = c(\vec{E}^2)\vec{e} = c(\vec{B}^2)\vec{e} \quad (3.2)$$

zeigt in die Fortpflanzungsrichtung. Man überprüft auch ohne Verwendung der Potentiale, dass (3.1) die Gleichungen (2.23, 2.24) des freien elektromagnetischen Feldes erfüllt. Für **monochromatische Felder** ist speziell $\vec{f}'(s) = \vec{E}_0 e^{i\omega s/c}$, d.h.

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{x}, t) &= \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)}, \\ \vec{B}(\vec{x}, t) &= \vec{e} \wedge \vec{E}(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (3.3)$$

mit Frequenz $\omega > 0$ und Wellenvektor $\vec{k} = (\omega/c)\vec{e}$. Die komplexe Amplitude

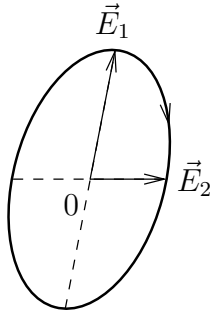
$$\vec{E}_0 = \vec{E}_1 + i\vec{E}_2, \quad (\vec{E}_{1,2} \text{ reell})$$

ist beliebig im 2–dimensionalen komplexen Raum

$$\vec{e}^\perp = \{\vec{E}_0 \in \mathbb{C}^3 \mid \vec{E}_0 \cdot \vec{e} = 0\}$$

der zu \vec{e} transversalen Vektoren. Das Rechnen mit komplexen Feldern ist legitim: da die linearen Feldgleichungen reelle Koeffizienten haben, sind Real– und Imaginärteil einer

Lösung wieder Lösungen. Wir fassen den Realteil als das physikalische Feld auf. Die **Polarisation** der Welle wird beschrieben durch die Bahn des Vektors $\text{Re } \vec{E}(\vec{x}, t)$ in einem festen Raumpunkt, z.B. $\vec{x} = 0$:



$$\text{Re } \vec{E}(0, t) = \vec{E}_1 \cos \omega t + \vec{E}_2 \sin \omega t . \quad (3.4)$$

(Ellipse)

Spezialfälle:

- $\vec{E}_1 \parallel \vec{E}_2$: lineare Polarisation
- $\vec{E}_1 \perp \vec{E}_2, |\vec{E}_1| = |\vec{E}_2|$: zirkulare Polarisation, und zwar
 $\vec{E}_2 = \pm \vec{e} \wedge \vec{E}_1$: rechts, bzw. links zirkulare Polarisation
 (bzgl. der Fortpflanzungsrichtung)

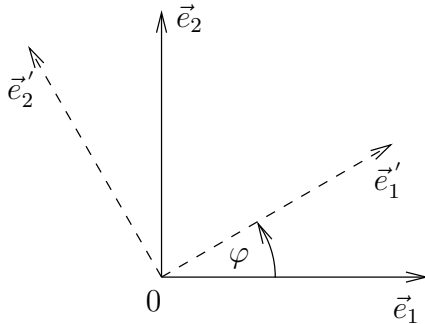
Durch Wahl einer Basis (\vec{e}_1, \vec{e}_2) in \vec{e}^\perp kann jede monochromatische Welle als Superposition von zwei ausgewählten Polarisationsfällen dargestellt werden. Die Basis sei orthonormiert im Sinne des Skalarproduktes

$$(\vec{E}, \vec{F}) = \vec{E} \cdot \vec{F} = (\vec{E}_1 - i \vec{E}_2) \cdot (\vec{F}_1 + i \vec{F}_2) . \quad (3.5)$$

Die Zerlegung ist dann

$$\vec{E}_0 = \sum_{i=1}^2 \alpha_i \vec{e}_i , \quad \alpha_i = (\vec{e}_i, \vec{E}_0) . \quad (3.6)$$

In den folgenden Beispielen ist $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3 \equiv \vec{e})$ eine reelle, orthonormierte, positiv orientierte Basis in \mathbb{R}^3 . Solche Basen gehen unter Drehungen um die \vec{e} -Achse ineinander über:



$$\begin{aligned} \vec{e}'_1 &= \cos \varphi \cdot \vec{e}_1 + \sin \varphi \cdot \vec{e}_2 , \\ \vec{e}'_2 &= -\sin \varphi \cdot \vec{e}_1 + \cos \varphi \cdot \vec{e}_2 . \end{aligned} \quad (3.7)$$

1. $\vec{e}'_1 = \vec{e}_1, \vec{e}'_2 = \vec{e}_2$

Dann ist (3.6) die Zerlegung in zwei zueinander senkrecht linear polarisierte Wellen. Diese Zerlegung ist gemäss (3.7) nicht rotationsinvariant.

2. $\vec{e}'_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_1 \pm i\vec{e}_2)$

Dann ist (3.6) die Zerlegung in eine rechts (+) und eine links (-) zirkular polarisierte Welle. Sie ist rotationsinvariant, denn unter der Drehung (3.7) ist

$$\vec{e}'_{\pm} = e^{\mp i\varphi} \vec{e}_{\pm} , \quad \alpha'_{\pm} = e^{\pm i\varphi} \alpha_{\pm} ,$$

also $\alpha'_\pm \vec{\varepsilon}'_\pm = \alpha_\pm \vec{\varepsilon}_\pm$.

Um die Energiestromdichte der Welle (3.3) auszurechnen, muss man zuerst zu den reellen Feldern übergehen, denn \vec{S} ist nicht linear in den Feldstärken. Für den Betrag $S = |\vec{S}|$ der Energiestromdichte im Punkt $\vec{x} = 0$ findet man aus (3.2, 3.4)

$$S(t) = c (\vec{E}_1^2 \cos^2 \omega t + \vec{E}_2^2 \sin^2 \omega t + \vec{E}_1 \cdot \vec{E}_2 \sin 2\omega t) .$$

Die **Intensität** I ist definiert als das Zeitmittel von $S(t)$:

$$I = \frac{c}{2} (\vec{E}_1^2 + \vec{E}_2^2) = \frac{c}{2} (\vec{E}_0, \vec{E}_0) .$$

Damit erhält das Skalarprodukt (3.5) eine physikalische Bedeutung. Bei der Zerlegung (3.6) in einer orthonormierten Polarisationsbasis sind die Intensitäten additiv:

$$I = \frac{c}{2} (|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2) .$$

3.2 Dynamik des freien Feldes

Wir lösen das Anfangswertproblem der skalaren Wellengleichung $\square u = 0$:

$$\left. \begin{array}{l} u(\vec{x}, 0) \\ \frac{\partial u}{\partial t}(\vec{x}, 0) \end{array} \right\} \longrightarrow u(\vec{x}, t) . \quad (3.8)$$

Damit ist auch das Anfangswertproblem für das freie Feld (2.23) gelöst,

$$\left. \begin{array}{l} \vec{E}(\vec{x}, 0) \\ \vec{B}(\vec{x}, 0) \end{array} \right\} \longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \vec{E}(\vec{x}, t) \\ \vec{B}(\vec{x}, t) \end{array} \right.$$

wobei die linke Seite der Nebenbedingung (2.24) genügen muss. Durch (2.23) sind nämlich

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}(\vec{x}, 0) , \quad \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}(\vec{x}, 0)$$

und somit die Anfangsdaten für (2.25) bekannt. Ausgangspunkt ist die allgemeine kugelsymmetrische Lösung von $\square u = 0$, die wir in der Form

$$u(\vec{x}, t) = \frac{1}{r} f(r, t) , \quad (r = |\vec{x}|)$$

ansetzen. Für solche Funktionen ist

$$\Delta u = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r u - 4\pi \delta(\vec{x}) f(0, t) , \quad (3.9)$$

sodass $f(r, t)$ eine Lösung der eindimensionalen Wellengleichung

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} = 0 , \quad (0 < r < \infty)$$

sein muss. Im Gebiet $0 < r < \infty$ wäre die allgemeine Lösung

$$f(r, t) = g(ct - r) + h(ct + r)$$

mit beliebigen Funktionen g, h . Für (3.8) kommen wegen (3.9) nur Lösungen mit $f(0, t) = 0$ in Betracht. Also: $h = -g$ und

$$u(\vec{x}, t) = \frac{1}{r} [g(ct - r) - g(ct + r)] .$$

Die Distributionslösung

$$D(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi r} [\delta(ct - r) - \delta(ct + r)] \quad (3.10)$$

gehört zu den Anfangsdaten

$$D(\vec{x}, 0) = 0, \quad \frac{1}{c} \frac{\partial D}{\partial t}(\vec{x}, 0) = \delta(\vec{x}), \quad \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 D}{\partial t^2}(\vec{x}, 0) = 0. \quad (3.11)$$

Zum Beweis fasse man $D(\vec{x}, t)$ auf als Distribution in \vec{x} zu festem t . Für jede Testfunktion $f(\vec{x})$ ist dann

$$D(f, t) \equiv \int d^3x f(\vec{x}) D(\vec{x}, t) = \frac{ct}{4\pi} \int_{\Omega} d^2e f(c|t|\vec{e}) = \frac{ct}{4\pi} \int_{\Omega} d^2e f(ct\vec{e}),$$

wobei $\Omega = \{\vec{e} \in \mathbb{R}^3 \mid |\vec{e}| = 1\}$ die Einheitskugel ist; der letzte Ausdruck folgt durch Substitution $\vec{e} \rightarrow -\vec{e}$ und zeigt, dass $D(f, t)$ Ableitungen in t aller Ordnungen hat. $D(f, t)$ ist ungerade in t , also gilt

$$D(f, 0) = \frac{d^2 D}{dt^2}(f, 0) = 0.$$

Ferner ist

$$\frac{1}{c} \frac{dD}{dt}(f, 0) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} d^2e f(0) = f(0).$$

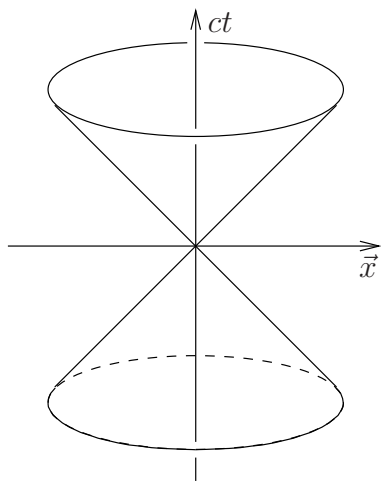
Dies beweist (3.11). Mit der Grundlösung (3.10) lässt sich nun das Anfangswertproblem (3.8) lösen durch

$$u(\vec{x}, t) = \int d^3y \left[\frac{1}{c} \frac{\partial D}{\partial t}(\vec{x} - \vec{y}, t) u(\vec{y}, 0) + D(\vec{x} - \vec{y}, t) \frac{1}{c} \frac{\partial u}{\partial t}(\vec{y}, 0) \right]. \quad (3.12)$$

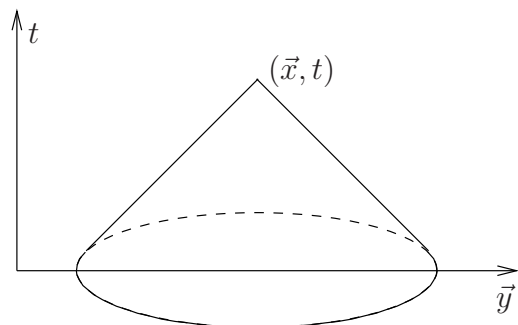
$\square u = 0$ folgt aus $\square D = \square \partial D / \partial t = 0$ und die Anfangswerte stimmen wegen (3.11). Nach Ausintegration der δ -Funktionen in (3.10) lautet sie

$$u(\vec{x}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{4\pi c^2 t} \int_{|\vec{y}-\vec{x}|=c|t|} do u(\vec{y}, 0) + \frac{1}{4\pi c^2 t} \int_{|\vec{y}-\vec{x}|=c|t|} do \frac{\partial u}{\partial t}(\vec{y}, 0).$$

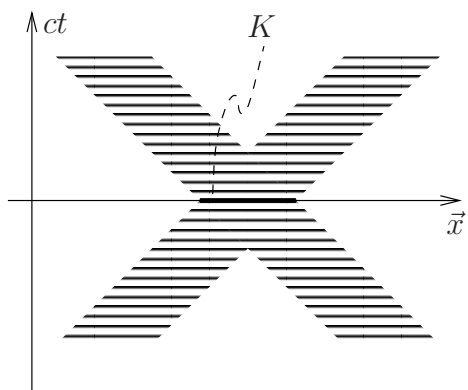
Die Lösung (3.12) bringt die geometrische Charakteristik der Wellenausbreitung zum Ausdruck:



Der Träger der Grundlösung $D(\vec{x}, t)$ ist der **Lichtkegel** $c^2t^2 - \vec{x}^2 = 0$.



Für gegebenes (\vec{x}, t) hängt $u(\vec{x}, t)$ nur ab von den Anfangswerten in den Punkten \vec{y} auf der Kugel $|\vec{y} - \vec{x}| = c|t|$.



Falls die Anfangswerte einen kompakten Träger $K \subset \mathbb{R}^3$ haben, so ist die Wellenausbreitung auf das schraffierte Raum-Zeit Gebiet beschränkt.

Diese Figuren illustrieren die Aussage: c ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit des Lichts.

Die Eindeutigkeit der Lösung von (2.23, 2.24) ergibt sich aus dem Energiesatz (2.26): Für verschwindende Anfangswerte folgt aus der Erhaltung von

$$\int d^3x \left[\vec{E}(\vec{x}, t)^2 + \vec{B}(\vec{x}, t)^2 \right] = 0,$$

dass $\vec{E}(\vec{x}, t) \equiv \vec{B}(\vec{x}, t) \equiv 0$.

4 Die Erzeugung elektromagnetischer Wellen

4.1 Lösung der inhomogenen Wellengleichung

Wir konstruieren eine spezielle Lösung der Maxwell-Gleichungen zu vorgegebenen $\rho(\vec{x}, t)$, $\vec{i}(\vec{x}, t)$ die der Kontinuitätsgleichung (2.6) genügen. In der Lorenz-Eichung (2.31) lauten die Gleichungen

$$\square\varphi = \rho, \quad \square\vec{A} = \frac{\vec{i}}{c}. \quad (4.1)$$

Der auslaufende Teil

$$D_{\text{ret}}(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi r} \delta(ct - r), \quad (r = |\vec{x}|),$$

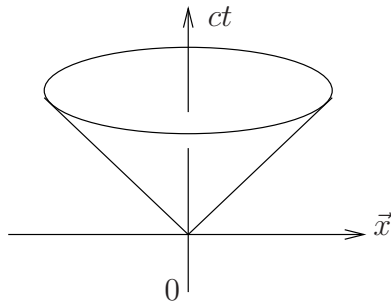
der freien Kugelwelle (3.10) ist eine Greensche Funktion des d'Alembert-Operators, d.h. eine Lösung von

$$\square D_{\text{ret}}(\vec{x}, t) = \frac{1}{c} \delta(\vec{x}) \delta(t). \quad (4.2)$$

Verwendet man Raum-Zeit-Koordinaten $x = (x^0, x^1, x^2, x^3) \equiv (ct, \vec{x})$, so lautet dies

$$\square D_{\text{ret}}(x) = \delta(x),$$

wobei rechts die δ -Distribution in vier Dimensionen steht.



D_{ret} hat als Träger den Vorwärts-Lichtkegel und entspricht einer bei $x = 0$ ausgelösten Kugelwelle.

Zum Beweis von (4.2) erinnern wir zunächst daran, dass $D(f, t)$ glatt in t ist, womit $(\partial^n D / \partial t^n)(\vec{x}, t) \delta(t) = (\partial^n D / \partial t^n)(\vec{x}, 0) \delta(t)$ eine wohldefinierte Distribution auf \mathbb{R}^4 ist. Insbesondere ist nach (3.11)

$$D(\vec{x}, t) \delta(t) = 0, \quad \frac{1}{c} \frac{\partial D}{\partial t}(\vec{x}, t) \delta(t) = \delta(\vec{x}) \delta(t).$$

Somit folgt für $D_{\text{ret}}(\vec{x}, t) = D(\vec{x}, t) \theta(t)$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial D_{\text{ret}}}{\partial t} = \frac{1}{c} \frac{\partial D}{\partial t} \theta, \quad \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 D_{\text{ret}}}{\partial t^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 D}{\partial t^2} \theta + \frac{1}{c} \delta(\vec{x}) \delta(t).$$

Zusammen mit $\Delta D_{\text{ret}} = (\Delta D) \theta$ und $\square D = 0$ folgt die Behauptung.

Eine spezielle Lösung von (4.1) lautet somit

$$\varphi(x) = \int d^4 y D_{\text{ret}}(x - y) \rho(y), \quad \vec{A}(x) = \frac{1}{c} \int d^4 y D_{\text{ret}}(x - y) \vec{i}(y).$$

Wegen der Kontinuitätsgleichung (2.6) erfüllt sie die Lorenz–Eichung (2.31). Nach Integration der δ –Funktion lautet sie

$$\varphi(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi} \int d^3y \frac{\rho(\vec{y}, t - \frac{|\vec{x}-\vec{y}|}{c})}{|\vec{x}-\vec{y}|},$$

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi c} \int d^3y \frac{\vec{i}(\vec{y}, t - \frac{|\vec{x}-\vec{y}|}{c})}{|\vec{x}-\vec{y}|}$$

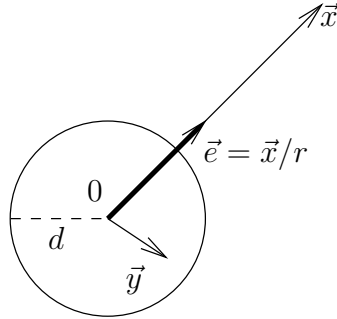
(**retardierte Potentiale**). Der Unterschied zu den statischen Formeln (1.5) und (2.8) für φ und \vec{A} besteht in der Retardierung: eine Änderung von ρ oder \vec{i} an der Stelle \vec{y} wirkt sich erst nach der Zeit $|\vec{x}-\vec{y}|/c$ auf das Feld an der Stelle \vec{x} aus.

Der einlaufende Teil

$$D_{\text{av}}(x) = \frac{1}{4\pi r} \delta(x^0 + r) = D_{\text{ret}}(-x)$$

der freien Kugelwelle (3.10) ist ebenfalls eine Greensche Funktion des d'Alembert–Operators, und die entsprechenden **avancierten Potentiale** eine spezielle Lösung von (4.1). Die retardierten (bzw. avancierten) Potentiale liegen in der kausalen Zukunft (bzw. Vergangenheit) der Quellen ρ, \vec{i} . Also bringen erstere die Einsicht zum Ausdruck, dass die Quellen die **Ursachen** der Felder sind. Diese Kausalitätsforderung ist mit den Maxwell–Gleichungen vereinbar, aber keine Folgerung derselben. Diese zeichnen keine Zeitrichtung aus.

4.2 Ausstrahlung



Wir betrachten eine Ladungs– und Stromverteilung im Gebiet $|\vec{y}| < d$. Im statischen Fall fallen die Felder \vec{E}, \vec{B} für $r \rightarrow \infty$ mindestens ab wie r^{-2} , bzw. r^{-3} . Im zeitabhängigen Fall bewirkt die Retardierung, dass \vec{E}, \vec{B} nur wie r^{-1} abfallen: der Energiefluss in ein festes Raumwinkelelement wird konstant für $r \rightarrow \infty$ (Ausstrahlung). Um die Glieder $\sim r^{-1}$ von \vec{E}, \vec{B} zu finden, schreibt man

$$\frac{1}{|\vec{x}-\vec{y}|} = \frac{1}{r} \left(1 + O\left(\frac{d}{r}\right) \right), \quad (r = |\vec{x}|),$$

sodass

$$\varphi(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi r} \int d^3y \rho\left(\vec{y}, t - \frac{|\vec{x}-\vec{y}|}{c}\right),$$

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi r c} \int d^3y \vec{i}\left(\vec{y}, t - \frac{|\vec{x}-\vec{y}|}{c}\right),$$
(4.3)

sofern

$$r \gg d. \quad (4.4)$$

Auf (4.3) operiert $\vec{\nabla}$ wie

$$-\frac{\vec{x}-\vec{y}}{|\vec{x}-\vec{y}|} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \cong -\frac{\vec{e}}{c} \frac{\partial}{\partial t},$$

falls er auf ρ oder \vec{v} wirkt, und wie Multiplikation mit $-\vec{x}/r^2$, falls er auf r^{-1} wirkt. Der erste Beitrag überwiegt falls $\omega/c \gg r^{-1}$, wobei ω eine typische inverse Zeit ist, über welche ρ, \vec{v} eine relative Änderung der Ordnung 1 erfahren. Im zeitlich harmonischen Fall ($\rho, \vec{v} \sim e^{-i\omega t}$) bedeutet dies

$$r \gg \lambda, \quad (4.5)$$

wobei $\lambda = 2\pi c/\omega$ die Lichtwellenlänge zur Frequenz ω ist. Unter den Bedingungen (4.4, 4.5) ist also

$$\vec{B} = \text{rot } \vec{A} = -\vec{e} \wedge \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

und unter der Benützung von (2.31)

$$\begin{aligned} \vec{E} &= \vec{e} \underbrace{\frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t}}_{-\text{div } \vec{A} = \vec{e} \cdot \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \vec{e} \wedge \left(\vec{e} \wedge \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) = -\vec{e} \wedge \vec{B}. \end{aligned}$$

In Ordnung r^{-1} sind also \vec{E}, \vec{B} vollständig bestimmt durch die Transversalkomponente von \vec{A} (Komponente $\perp \vec{e}$), und $\vec{E}, \vec{B}, \vec{e}$ verhalten sich lokal wie in einer ebenen Welle der Fortpflanzungsrichtung \vec{e} . Das durch (4.4, 4.5) charakterisierte Gebiet heisst deshalb **Wellenzone**. Insbesondere ist dort der Energiefluss radial:

$$\vec{S} = c(\vec{E}^2)\vec{e} = c(\vec{B}^2)\vec{e}.$$

Wir betrachten nun weiter den Fall, wo

$$d \ll \lambda,$$

der insbesondere in der Atomphysik eintritt (Atomdurchmesser $d \approx 10^{-9}\text{m}$, optische Wellenlänge $\lambda \approx 10^{-6}\text{m}$). Mit

$$|\vec{x} - \vec{y}| = r - \vec{e} \cdot \vec{y} + O\left(\frac{d^2}{r}\right)$$

gilt für das Vektorpotential (4.3)

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi r c} \int d^3 y \vec{v}\left(\vec{y}, t - \frac{r}{c} + \frac{\vec{e} \cdot \vec{y}}{c}\right), \quad (4.6)$$

denn in der Zeit $O(d^2/rc)$ ist die relative Änderung von \vec{v} von der Ordnung

$$\frac{d^2}{rc} \cdot \omega \approx \frac{d^2}{r\lambda} \ll 1.$$

In (4.6) können wir uns dann mit den niedrigsten Gliedern der Taylorreihe

$$\vec{v}\left(\vec{y}, t - \frac{r}{c} + \frac{\vec{e} \cdot \vec{y}}{c}\right) = \vec{v}\left(\vec{y}, t - \frac{r}{c}\right) + (\vec{e} \cdot \vec{y}) \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{v}}{\partial t}\left(\vec{y}, t - \frac{r}{c}\right) + \dots \quad (4.7)$$

begnügen.

- Elektrische Dipolstrahlung: Der Beitrag des ersten Terms in (4.7) zu \vec{A} ist

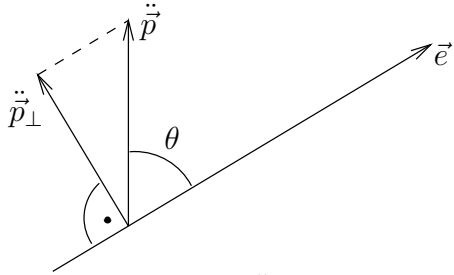
$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \frac{1}{4\pi r c} \int d^3 y \vec{i}(\vec{y}, t - \frac{r}{c}) = \frac{1}{4\pi r c} \dot{\vec{p}}(t - \frac{r}{c})$$

mit dem elektrischen Dipolmoment

$$\vec{p}(t) = \int d^3 y \vec{y} \rho(\vec{y}, t),$$

denn für jeden festen Vektor \vec{n} folgt aus $\vec{n} = \vec{\nabla}_y(\vec{n} \cdot \vec{y})$ und der Kontinuitätsgleichung (2.6)

$$4\pi r c \vec{n} \cdot \vec{A} = \int d^3 y (\vec{i} \cdot \vec{\nabla})(\vec{n} \cdot \vec{y}) = - \int d^3 y (\vec{n} \cdot \vec{y}) \operatorname{div} \vec{i} = \vec{n} \cdot \dot{\vec{p}}.$$



Das zugehörige Feld (in Ordnung r^{-1}) ist

$$\vec{E} = \frac{1}{4\pi r c^2} \underbrace{\vec{e} \wedge (\vec{e} \wedge \ddot{\vec{p}})}_{-\ddot{\vec{p}}_{\perp}}, \quad (4.8)$$

$$\vec{B} = \vec{e} \wedge \vec{E},$$

wobei $\ddot{\vec{p}} = \ddot{\vec{p}}(t - \frac{r}{c})$ zur retardierten Zeit zu nehmen ist. Die Energiestromdichte ist radial mit Betrag

$$S(\theta) = \frac{1}{16\pi^2 r^2 c^3} \ddot{\vec{p}}^2 \sin^2 \theta,$$

(links: Polardiagramm dazu). Die total abgestrahlte Leistung beträgt

$$W = \frac{\ddot{\vec{p}}^2}{16\pi^2 c^3} \underbrace{\int d\Omega \sin^2 \theta}_{8\pi/3} = \frac{1}{6\pi c^3} \ddot{\vec{p}}^2.$$

Im zeitlich harmonischen Fall ist $W \propto \omega^4$.

Den zweiten Term in (4.7) zerlegen wir gemäss

$$(\vec{e} \cdot \vec{y}) \vec{i} = -\frac{1}{2} \vec{e} \wedge (\vec{y} \wedge \vec{i}) + \frac{1}{2} [(\vec{e} \cdot \vec{y}) \vec{i} + (\vec{e} \cdot \vec{i}) \vec{y}]. \quad (4.9)$$

- Magnetische Dipolstrahlung: Der Beitrag des ersten Teils in (4.9) zu \vec{A} ist $\vec{A}(\vec{x}, t) = -\frac{1}{4\pi r c} \vec{e} \wedge \dot{\vec{m}}(t - \frac{r}{c})$, wobei

$$\vec{m}(t) = \frac{1}{2c} \int d^3 y \vec{y} \wedge \vec{i}(\vec{y}, t)$$

das **magnetische Dipolmoment** ist. Das entsprechende Feld ist

$$\vec{B} = \frac{1}{4\pi r c^2} \underbrace{\vec{e} \wedge (\vec{e} \wedge \ddot{\vec{m}})}_{-\ddot{\vec{m}}_{\perp}}, \quad \vec{E} = -\vec{e} \wedge \vec{B}.$$

Es ist analog zur elektrischen Dipolstrahlung und geht aus (4.8) hervor durch die Substitution $(\vec{E}, \vec{B}, \vec{p}) \rightarrow (\vec{B}, -\vec{E}, \vec{m})$. Wegen $\vec{S} \rightarrow \vec{S}$ ist dabei die Ausstrahlung (bei gleichen Dipolmomenten) dieselbe.

• Elektrische Quadrupolstrahlung: Für den zweiten Teil in (4.9) gilt $[(\vec{e} \cdot \vec{y}) \vec{i} + (\vec{e} \cdot \vec{i}) \vec{y}] \cdot \vec{n} = (\vec{i} \cdot \vec{\nabla}_y)(\vec{e} \cdot \vec{y})(\vec{n} \cdot \vec{y})$. Somit ist sein Beitrag zu \vec{A}

$$8\pi c^2 r \vec{n} \cdot \vec{A} = \int d^3 y \left(\frac{\partial \vec{i}}{\partial t} \cdot \vec{\nabla} \right) (\vec{e} \cdot \vec{y})(\vec{n} \cdot \vec{y}) = - \int d^3 y (\vec{n} \cdot \vec{y})(\vec{e} \cdot \vec{y}) \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\text{div } \vec{i}}_{-\partial \rho / \partial t},$$

d.h.

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \frac{1}{24\pi r c^2} \ddot{T}(t - \frac{r}{c}) \vec{e},$$

wobei die Komponenten des Tensors $T(t)$ durch

$$T_{ij}(t) = 3 \int d^3 y y_i y_j \rho(\vec{y}, t)$$

gegeben sind. Benützt man stattdessen den elektrischen Quadrupoltensor (1.35)

$$Q = T - \frac{1}{3} (\text{tr } T) \mathbf{I},$$

so ist

$$\vec{A} = \frac{1}{24\pi r c^2} \left(\ddot{Q} \vec{e} + \frac{1}{3} (\text{tr } \ddot{T}) \vec{e} \right).$$

Da der zweite Term parallel zu \vec{e} ist, trägt er zu \vec{E}, \vec{B} in der Wellenzone nicht bei. Das Feld ist

$$\vec{B} = -\frac{1}{24\pi r c^3} \vec{e} \wedge \ddot{Q} \vec{e}, \quad \vec{E} = -\vec{e} \wedge \vec{B}$$

und die Energiestromdichte

$$S = \frac{1}{576\pi^2 r^2 c^5} \frac{(\vec{e} \wedge \ddot{Q} \vec{e})^2}{\vec{e} \cdot \ddot{Q}^2 \vec{e} - (\vec{e} \cdot \ddot{Q} \vec{e})^2}.$$

Im Hauptachsensystem des Quadrupoltensors ist $Q = \text{diag}(q_1, q_2, q_3)$, $\vec{e} \cdot Q \vec{e} = \sum_i q_i e_i^2$ und

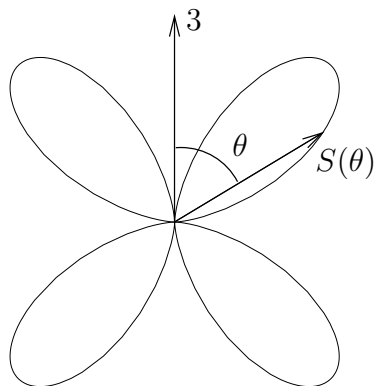
$$\int d\vec{e} (\vec{e} \cdot Q \vec{e})^2 = \sum_{i,j} q_i q_j \underbrace{\int d\vec{e} e_i^2 e_j^2}_{\frac{4\pi}{15}(1+2\delta_{ij})} = \frac{4\pi}{15} [(\text{tr } Q)^2 + 2 \text{tr } Q^2].$$

Somit beträgt die total ausgestrahlte Leistung

$$W = \frac{4\pi}{576\pi^2 c^5} \left(\frac{1}{3} - \frac{2}{15} \right) \text{tr } \ddot{Q}^2 = \frac{1}{720\pi c^5} \text{tr } \ddot{Q}^2.$$

Beispiel: Um die 3–Achse rotationsymmetrische Ladungsverteilung. Dann ist

$$Q = \begin{pmatrix} -q & & \\ & -q & \\ & & 2q \end{pmatrix}, \quad \vec{e} \wedge \ddot{Q} \vec{e} = 3 \ddot{q} (e_2 e_3, -e_1 e_3, 0),$$



$$S(\theta) = \frac{\ddot{q}^2}{64\pi^2 r^2 c^5} \underbrace{[(e_1 e_3)^2 + (e_2 e_3)^2]}_{\sin^2 \theta \cos^2 \theta}.$$

Die verschiedenen Multipolfelder überlagern sich. Dabei sind die Energiestromdichten nicht additiv, es treten Interferenzterme auf. Man kann aber zeigen, dass die total abgestrahlte Leistung additiv ist.

Führt man die Entwicklung (4.7) weiter, so treten, wie in der Elektrostatik, sukzessive höhere Multipole auf, die wir hier nicht behandeln.

5 Das Relativitätsprinzip

5.1 Das klassische Relativitätsprinzip

Nach Festlegung der Einheiten von Länge und Zeit, kennzeichnen wir Ereignisse durch $(t, \vec{x}) \in \mathbb{R}^{1+3}$ mit

t : Zeitkoordinate
 $\vec{x} = (x^1, x^2, x^3)$: kartesische Koordinaten.

Eine absolute, vom Bezugssystem unabhängige Bedeutung haben die Grössen

- $|t_1 - t_2|$: Zeitabstand von zwei beliebigen Ereignissen $(t_1, \vec{x}_1), (t_2, \vec{x}_2)$ (5.1)
(insbesondere: Gleichzeitigkeit ist absolut);

- falls $t_1 = t_2$:
 $|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$: Raumabstand von zwei gleichzeitigen Ereignissen. (5.2)

Die Koordinatentransformationen, die diese Grössen invariant lassen, sind

$$\begin{aligned} t' &= \lambda t + a, & (\lambda = \pm 1, a \in \mathbb{R}), \\ \vec{x}' &= R(t)\vec{x} + \vec{b}(t), & (R(t) \in O(3), \vec{b}(t) \in \mathbb{R}^3), \end{aligned}$$

d.h. die räumlichen Bezugssysteme sind beliebig gegeneinander bewegt.

Physikalisch sind jedoch nicht alle diese Bezugssysteme gleichberechtigt. Die besondere Klasse der **Inertialsysteme** ist ausgezeichnet durch die Gültigkeit des Trägheitsgesetzes:

$$\ddot{\vec{x}} = 0 \tag{5.3}$$

für freie Teilchen. Die dann noch erlaubten Transformationen sind die **Galilei-Transformationen**

$$\begin{aligned} t' &= \lambda t + a, & (\lambda = \pm 1, a \in \mathbb{R}), \\ \vec{x}' &= R\vec{x} + \vec{v}t + \vec{b}, & (R \in O(3), \vec{v}, \vec{b} \in \mathbb{R}^3); \end{aligned} \tag{5.4}$$

insbesondere sind Inertialsysteme geradlinig gleichförmig gegeneinander bewegt. Das **klassische Relativitätsprinzip** verlangt, dass die Bewegungsgleichungen eines isolierten Systems, das keinen äusseren Einflüssen unterliegt, in jedem Inertialsystem gleich lauten, also forminvariant sind unter Galilei-Transformationen. Beispiel: Newtonsche Gleichungen eines N -Teilchensystems

$$m_i \ddot{\vec{x}}_i = \vec{F}_i(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N), \quad (i = 1, \dots, N),$$

falls

$$\vec{F}_i(R\vec{x}_1 + \vec{a}, \dots, R\vec{x}_N + \vec{a}) = R\vec{F}_i(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$$

für alle $R \in O(3), \vec{a} \in \mathbb{R}^3$.

Durch die Elektrodynamik wird dieses Prinzip verletzt: das Gesetz der Lichtausbreitung

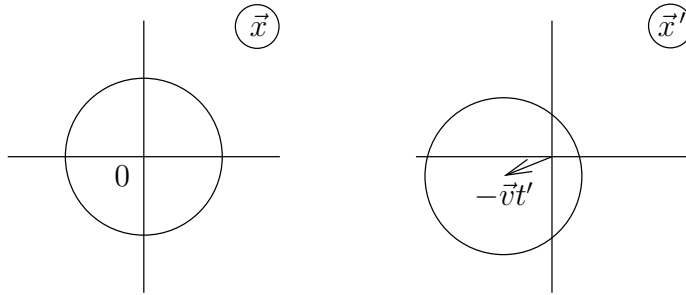
$$c^2(t_1 - t_2)^2 - |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|^2 = 0 \tag{5.5}$$

charakterisiert zwei Ereignisse (t_1, \vec{x}_1) und (t_2, \vec{x}_2) , die durch ein Lichtsignal der festen Geschwindigkeit c verbunden werden können. Insbesondere ist sie unabhängig vom Bewegungszustand des Senders und von der Fortpflanzungsrichtung.

Das Gesetz ist nur noch invariant unter Galilei-Transformationen mit $\vec{v} = 0$. Zum Beispiel beschreibt $|\vec{x}| = ct$ die Front einer vom Ereignis $(0, 0)$ ausgehenden Lichtwelle. Unter der Galilei-Transformation

$$t' = t, \quad \vec{x}' = \vec{x} - \vec{v}t$$

behält das auslösende Ereignis die Koordinaten $(0, 0)$, aber die Wellenfront zur Zeit $t = t'$ wird zur Kugel $|\vec{x}' + \vec{v}t'| = ct'$ mit Mittelpunkt $-\vec{v}t'$:



Mechanik und Elektrodynamik zeichnen eine Klasse “ruhender” Bezugssysteme aus. Diese Vorstellung erschien solange natürlich, als man einen materiellen “Äther” als Träger des elektromagnetischen Feldes vermutete. Die Bewegung eines Inertialsystems relativ zum Äther liesse sich feststellen durch Abweichungen vom Gesetz (5.5) der Lichtausbreitung. Dies aber misslang (Michelson, Morley 1887).

5.2 Das Einsteinsche Relativitätsprinzip

Einstein (1905) befreit sich obiger Auffassung von Raum und Zeit. Er gibt die Invarianten (5.1, 5.2) preis und führt ein neues Relativitätsprinzip ein:

- a) Definition: Inertialsysteme sind ausgezeichnet durch das Trägheitsgesetz (5.3) und das Gesetz (5.5) der Lichtausbreitung.
- b) Postulat: Es gibt Inertialsysteme. Die Gesetze der Mechanik und der Elektrodynamik lauten in jedem Inertialsystem gleich.

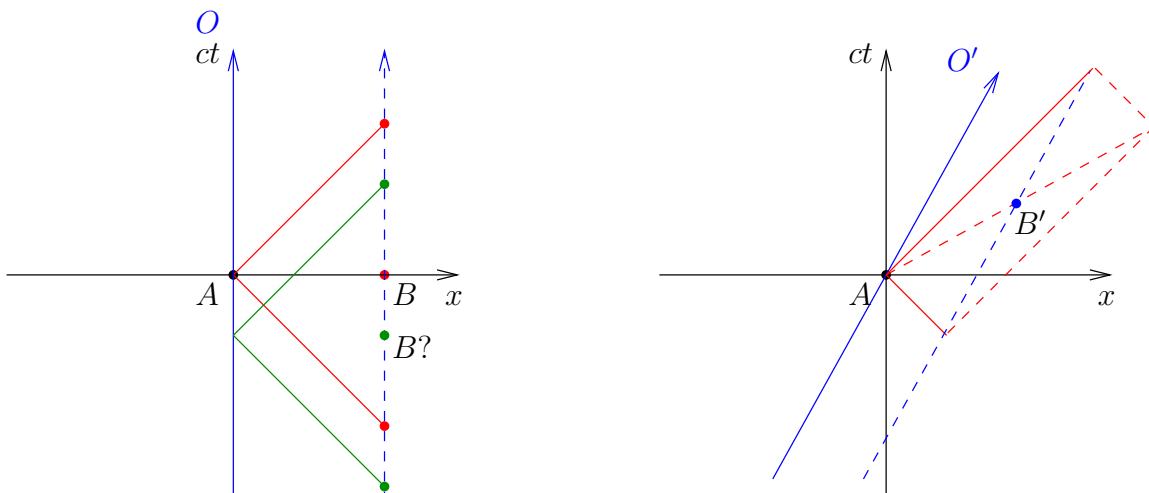
Daraus ergibt sich folgendes Programm: (a) Bestimmung der Gruppe der Transformationen die (5.3) und (5.5) invariant lassen (Lorentz-Transformationen). (b) Relativistische (d.h. Lorentz-invariante) Formulierung der Mechanik und der Elektrodynamik. Dabei zeigt sich, dass die Maxwell-Gleichungen bei passender Transformation der Felder bereits Lorentz-invariant sind. Anders die Mechanik: Fernwirkungsgesetze (Bsp. Newtonsches Gravitationsgesetz) sind a priori nicht-relativistisch, da sie sich auf die klassischen Invarianten (5.1, 5.2) berufen, etwa auf den “Abstand zweier Körper zur gleichen Zeit”. An ihre Stelle tritt die Feldwirkung: eine relativistische Theorie wechselwirkender Teilchen muss das gekoppelte System Materie & Feld beschreiben.

Bevor wir dieses Programm in Strenge umsetzen, soll aus (a) heuristisch gefolgert werden, dass Gleichzeitigkeit relativ ist. Wir nehmen dabei vorweg, dass Inertialsysteme weiterhin

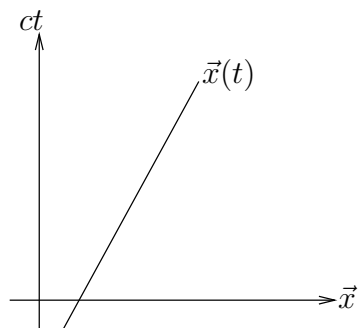
geradlinig gleichförmig gegeneinander bewegt sind, nicht aber die Transformation (5.4). Nur eine einzige räumliche Dimension ist von Bedeutung. Beide Figuren beziehen sich auf die Koordinaten (ct, x) eines Inertialsystems O . Die Bahnen von Lichtsignalen sind nach (5.5) darin durch Geraden der Steigung $\pm 45^\circ$ gegeben, unabhängig vom Bewegungszustand des Senders. Ausgezeichnet ist das Ereignis A mit Koordinaten $(0, 0)$.

In der ersten Figur ist die Bahn des Beobachters O , bzw. die des räumlichen Ursprungs $x = 0$, durch die ct -Achse gegeben (blau); ebenso diejenige eines Gehilfen in einem festem Abstand zu ihm (blau gestrichelt). Ereignisse, die bzgl. O gleichzeitig zu A sind, haben definitionshalber Koordinate $t = 0$. Ein solches Ereignis B kann am Ort des Gehilfen konkret dadurch konstruiert werden, dass er ein Lichtsignal sendet, welches er dann mittels eines beim Beobachter sich befindlichen Spiegels wieder empfängt. Das Ereignis ist gleichzeitig zu A , genau dann falls das Signal im Ereignis A reflektiert wird (rot, nicht grün) und das Ereignis B selbst die Zeit zwischen Sendung und Empfang hälftig teilt.

In der zweiten Figur ist die Bahn einer Beobachterin O' dargestellt, deren Treffen mit O im Ereignis A stattfindet; ebenso diejenige ihrer Gehilfin. Die vorige Konstruktion liefert nun das Ereignis B' als gleichzeitig zu A bzgl. O' (das Parallelogramm dient der hälftigen Teilung des Intervalls). Offensichtlich hat es Koordinate $t \neq 0$!



5.3 Lorentz-Transformationen



Das Trägheitsgesetz (5.3) besagt, dass die Bewegung eines freien Teilchens mit Koordinaten $x = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, \vec{x})$ durch eine Gerade gegeben ist. Die gesuchten Transformationen (bijektive Abbildungen $\mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^4$) müssen deshalb geradentreu sein. Dies sind bloss die affinen Transformationen

$$x'^{\mu} = A^{\mu}_{\nu} x^{\nu} + a^{\mu}, \quad (5.6)$$

kurz: $x' = Ax + a$. Koordinatendifferenzen $\xi = x - y$ transformieren dabei homogen

$$\xi' = A\xi \quad (5.7)$$

(Größen, die so transformieren, heissen **4-er Vektoren**) und wegen (5.5) muss der **Lichtkegel**

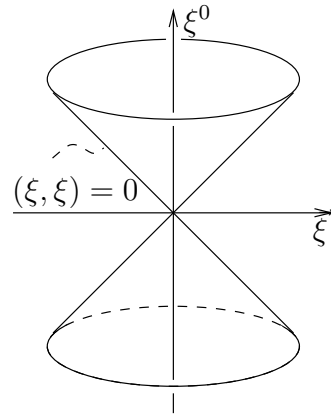
$$(\xi^0)^2 - \vec{\xi}^2 = 0$$

invariant sein. Die hier auftretende quadratische Form ist

$$(\xi, \xi) = g_{\mu\nu} \xi^\mu \xi^\nu = \xi^T g \xi$$

mit

$$g = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ 0 & & & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.8)$$



Man zeigt (s. S. 43), dass (5.5) unter (5.6) invariant bleibt genau, falls

$$A^T g A = \alpha g \quad (5.9)$$

für ein $\alpha \neq 0$. Tatsächlich ist $\alpha > 0$. Dies folgt aus dem Trägheitssatz für quadratische Formen, oder geometrisch: $\alpha < 0$ würde bedeuten, dass unter (5.7) das (nicht zusammenhängende) Innere des Lichtkegels ($(\xi, \xi) > 0$) mit dem (zusammenhängenden) Äusseren ($(\xi, \xi) < 0$) vertauscht wird. Dies ist aber unmöglich, da (5.7) stetig ist.

Die Gruppe der Transformationen (5.6, 5.9) enthält die reinen Dilatationen

$$x \mapsto \lambda x, \quad (\lambda > 0),$$

die einer Änderung der Zeit- und Längeneinheiten entsprechen. Wegen $\alpha > 0$ lässt sich jedes A eindeutig zerlegen in

$$A = \lambda \Lambda, \quad (\lambda > 0), \quad (5.10)$$

$$\Lambda^T g \Lambda = g. \quad (5.11)$$

Die durch (5.11) definierten Transformationen heissen **Lorentz-Transformationen** und bilden die **Lorentz-Gruppe** L . Beschränkt man sich auf Inertialsysteme mit **festen Massstäben**, so folgt aus deren Äquivalenz, dass der Faktor λ in (5.10) durch Λ bestimmt ist, also

$$A(\Lambda) = \lambda(\Lambda) \cdot \Lambda.$$

Die Gruppeneigenschaft dieser Transformationen verlangt

$$\lambda(\Lambda_1) \lambda(\Lambda_2) = \lambda(\Lambda_1 \Lambda_2). \quad (5.12)$$

Man kann zeigen, dass die einzige stetige Lösung $\lambda : L \rightarrow \mathbb{R}$ davon $\lambda \equiv 1$ ist.

Zusammenfassung. Die Gruppe der Transformationen, welche Inertialsysteme mit festen Massstäben verbinden, ist die Gruppe der inhomogenen Lorentz-Transformationen

$$x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu + a^\mu, \quad \text{bzw.} \quad x' = \Lambda x + a.$$

Dies sind die affinen Transformationen mit der Invarianten

$$(x^0 - y^0)^2 - (\vec{x} - \vec{y})^2 . \quad (5.13)$$

Durch (5.13) wird der \mathbb{R}^4 mit einer Metrik versehen, die in jedem Inertialsystem die Normalform (5.8) annimmt.

Anwendung: Zeitdilatation. Sei $\Delta t = t_B - t_A$ die Zeitdifferenz zweier Ereignisse A, B in einem Inertialsystem K , wo sie am selben Ort stattfinden, z.B. Zeitanzeigen einer Uhr in ihrem Ruhesystem: $\Delta \vec{x} = 0$. In einem zweiten Inertialsystem K' bewegt sich die Uhr ebenfalls auf einer Trägheitsbahn, $\vec{x}' = \vec{v}t' + \vec{b}$, aber nun i.A. mit Geschwindigkeit $\vec{v} \neq 0$. In K' beträgt die Zeitdifferenz beider Ereignisse

$$|\Delta t'| = \gamma |\Delta t| , \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} > 1 .$$

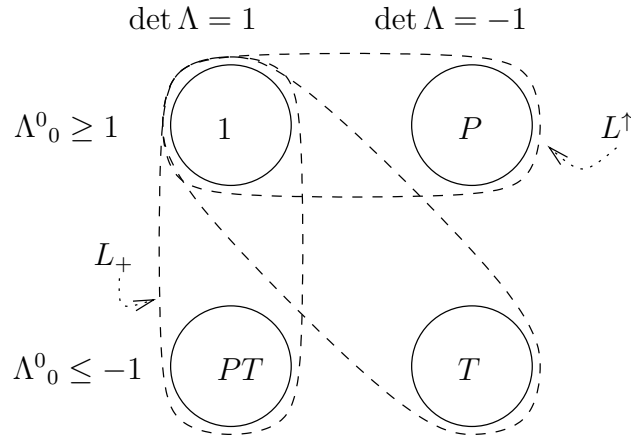
Dies folgt aus (5.13), d.h. $c^2(\Delta t')^2 - (\Delta \vec{x}')^2 = c^2(\Delta t)^2 - (\Delta \vec{x})^2$ und $|\Delta \vec{x}'| = v|\Delta t'|$.

5.4 Diskussion der Lorentz-Gruppe

Durch Bildung der Determinante, bzw. der (00)-Komponente von (5.11) folgt für $\Lambda \in L$

$$\begin{aligned} (\det \Lambda)^2 &= 1 , \\ (\Lambda^0_0)^2 - \sum_{k=1}^3 (\Lambda^k_0)^2 &= 1 . \end{aligned}$$

Somit zerfällt L in 4 disjunkte Komponenten



Dass alle 4 Fälle auftreten, zeigen die **Spiegelungen**

$$\begin{aligned} 1 &= \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} , & P &= \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} , \\ T &= \begin{pmatrix} -1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} , & PT &= \begin{pmatrix} -1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix} , \end{aligned} \quad (5.14)$$

die selber eine Untergruppe bilden. Weitere Untergruppen sind z.B.

$$\begin{aligned} L_+ &= \{\Lambda \in L \mid \det \Lambda = 1\} && \text{eigentliche Lorentz-Transformationen} \\ L^\uparrow &= \{\Lambda \in L \mid \Lambda^0_0 \geq 1\} && \text{orthochrone Lorentz-Transformationen} \\ L_+^\uparrow &= L_+ \cap L^\uparrow. \end{aligned} \tag{5.15}$$

Dass L^\uparrow eine Gruppe ist, sieht man geometrisch: $\Lambda \in L$ bildet das Innere des Lichtkegels auf sich ab und die beiden Teilkegel

$$V_\pm = \{\xi \mid (\xi, \xi) > 0, \pm \xi^0 \geq 0\}$$

bleiben invariant oder werden vertauscht. Entscheidend ist das Vorzeichen $\text{sgn}(\Lambda^0_0)$, da $\Lambda : (1, \vec{0}) \mapsto (\Lambda^0_0, \Lambda^1_0, \Lambda^2_0, \Lambda^3_0)$. Somit sind $\text{sgn}(\Lambda^0_0)$ und $\det \Lambda$ multiplikativ unter Gruppenmultiplikation.

Jedes $\Lambda \in L$ ist das Produkt eines Elements aus L_+^\uparrow mit einer Spiegelung. Wir beschränken uns deshalb auf die Diskussion von L_+^\uparrow .

1) Räumliche Drehungen

$$\Lambda = \left(\begin{array}{c|ccc} * & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & & & \\ 0 & & * & \\ 0 & & & \end{array} \right) \implies \Lambda = \left(\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & & & \\ 0 & & R & \\ 0 & & & \end{array} \right) = \Lambda(R) \tag{5.16}$$

mit $R \in \text{SO}(3)$, wie aus (5.11, 5.15) folgt.

2) **Spezielle Lorentz-Transformationen** (Boosts) sind charakterisiert durch die Blockform

$$\Lambda = \left(\begin{array}{cc|cc} a & b & & 0 \\ c & d & & 0 \\ \hline & & 1 & 0 \\ & & 0 & 1 \end{array} \right) \implies \Lambda = \left(\begin{array}{cc|cc} \text{ch } \chi & -\text{sh } \chi & & 0 \\ -\text{sh } \chi & \text{ch } \chi & & 0 \\ \hline & & 1 & 0 \\ & & 0 & 1 \end{array} \right) = \Lambda(\chi) \tag{5.17}$$

für ein $\chi \in \mathbb{R}$. Beweis: (5.11) lautet

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^2 - c^2 & ab - cd \\ ab - cd & b^2 - d^2 \end{pmatrix}.$$

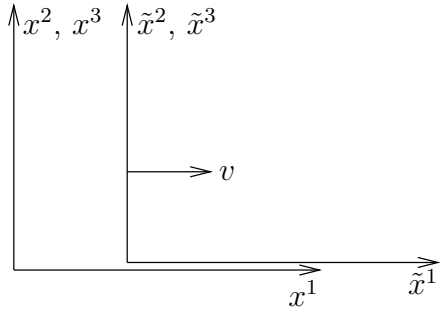
Aus $a = \Lambda^0_0 \geq 1$ und $a^2 - c^2 = 1$ folgt $a = \text{ch } \chi, c = -\text{sh } \chi$ für ein $\chi \in \mathbb{R}$. Aus $ab - cd = 0$ folgt $(b, d) = \lambda(-\text{sh } \chi, \text{ch } \chi)$ für ein $\lambda \in \mathbb{R}$. Schliesslich ist $1 = \det \Lambda = \lambda(\text{ch}^2 \chi - \text{sh}^2 \chi) = \lambda$.

Die Boosts bilden eine Untergruppe, und zwar mit dem Multiplikationsgesetz

$$\Lambda(\chi_1)\Lambda(\chi_2) = \Lambda(\chi_1 + \chi_2). \tag{5.18}$$

Bedeutung der Boosts: $\tilde{x} = \Lambda(\chi)x$ lautet ausgeschrieben

$$\begin{aligned} \tilde{ct} &= (\text{ch } \chi)ct - (\text{sh } \chi)x^1, & \tilde{x}^2 &= x^2, \\ \tilde{x}^1 &= -(\text{sh } \chi)ct + (\text{ch } \chi)x^1, & \tilde{x}^3 &= x^3. \end{aligned} \tag{5.19}$$



Ein im neuen Koordinatensystem ruhender Punkt folgt im alten der Bahn

$$\begin{aligned} x^1 &= (\operatorname{ch} \chi)^{-1} \tilde{x}^1 + (\operatorname{th} \chi) ct, \\ x^2 &= \tilde{x}^2, \quad x^3 = \tilde{x}^3. \end{aligned}$$

$\Lambda(\chi)$ transformiert also auf ein neues Inertialsystem, das gegenüber dem alten achsenparallel ist und sich gleichförmig und in 1-Richtung bewegt mit der Relativgeschwindigkeit

$$v = c \cdot \operatorname{th} \chi,$$

womit $-c < v < c$. Mit

$$\operatorname{ch} \chi = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad \operatorname{sh} \chi = \frac{v/c}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

lautet (5.19)

$$\begin{aligned} \tilde{t} &= \frac{t}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - \frac{vx^1/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, & \tilde{x}^2 &= x^2, \\ \tilde{x}^1 &= -\frac{vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} + \frac{x^1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, & \tilde{x}^3 &= x^3. \end{aligned} \tag{5.20}$$

Schreiben wir dafür $\Lambda(v)$ statt $\Lambda(\chi)$, so lautet (5.18) nun $\Lambda(v_1)\Lambda(v_2) = \Lambda(v)$ mit

$$v = c \cdot \operatorname{th}(\chi_1 + \chi_2) = c \frac{\operatorname{th} \chi_1 + \operatorname{th} \chi_2}{1 + \operatorname{th} \chi_1 \cdot \operatorname{th} \chi_2} = \frac{v_1 + v_2}{1 + \frac{v_1 v_2}{c^2}} \tag{5.21}$$

(Additionsgesetz der Geschwindigkeiten). Im Limes $c \rightarrow \infty$ gehen die Boosts (5.20) über in die Galilei-Transformationen

$$\tilde{t} = t, \quad \tilde{x}^1 = x^1 - vt, \quad \tilde{x}^2 = x^2, \quad \tilde{x}^3 = x^3$$

und (5.21) in $v = v_1 + v_2$.

Lässt man den Boosts (5.17) noch eine Drehung (5.16) vorangehen bzw. nachfolgen, so erhält man alle $\Lambda \in L_+^\uparrow$:

Zerlegungssatz. Jede Lorentz-Transformation $\Lambda \in L_+^\uparrow$ lässt sich schreiben als

$$\Lambda = \Lambda(R_1)\Lambda(\chi)\Lambda(R_2). \tag{5.22}$$

Beweis. Sei $y = \Lambda x$: Betrachte den Unterraum

$$M = \{x \mid x^0 = y^0 = 0\}.$$

Es gibt zwei Fälle:

a) $\dim M = 3$. Dann ist $M = \{x^0 = 0\} = \{y^0 = 0\}$. M ist also invariant unter Λ , ebenso das orthogonale Komplement

$$M^\perp = \{x \mid x^1 = x^2 = x^3 = 0\}$$

im Sinne der Metrik (5.8). Somit hat Λ die für Drehungen typische Blockform (5.16).

b) $\dim M = 2$. Wir wählen in M zwei orthonormierte Vektoren e_2, e_3 . Durch eine passende Drehung in $\{x^0 = 0\} \supset M$ (bzw. in $\{y^0 = 0\} \supset M$) können wir erreichen, dass e_2, e_3 mit den 2- und 3-Richtungsvektoren in den x - (bzw. y -) Koordinaten übereinstimmen. Dann ist $M = \{x^0 = x^1 = 0\} = \{y^0 = y^1 = 0\}$ unter Λ punktweise invariant. $M^\perp = \{x^2 = x^3 = 0\}$ ist zumindest als Menge invariant. Also hat Λ die für Boosts typische Blockform (5.17). \square

Nachtrag zur Herleitung der Lorentz-Transformationen.

Lemma 1. Sei $A : \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^4$, $\det A \neq 0$. Falls A die Gleichung $(\xi, \xi) = \xi^T g \xi = 0$ invariant lässt, dann ist

$$A^T g A = \alpha g, \quad \alpha \neq 0.$$

Beweis. Aus $\xi^0 = \pm |\vec{\xi}|$ folgt $(\xi, \xi) = 0$. Somit muss gelten

$$\begin{aligned} 0 &= (A\xi, A\xi) = \xi^T \underbrace{A^T g A}_{B=B^T} \xi = B_{\mu\nu} \xi^\mu \xi^\nu \\ &= \sum_{k=1}^3 (B_{00} + B_{kk}) \underline{(\xi^k)^2} \pm 2 \sum_{k=1}^3 B_{0k} \underline{|\vec{\xi}| \xi^k} + 2 \sum_{i < k} B_{ik} \underline{\xi^i \xi^k} \end{aligned}$$

für alle $\vec{\xi} \in \mathbb{R}^3$. Da die unterstrichenen Funktionen linear unabhängig sind, folgt

$$B_{ik} = 0, \quad B_{0k} = 0, \quad B_{kk} = -B_{00},$$

d.h. $B = B_{00}g$ und wegen $\det A \neq 0$ ist $B_{00} \neq 0$. \square

Lemma 2. Sei $\lambda : L \rightarrow \mathbb{R}$ stetig mit $\lambda(\cdot) > 0$ und (5.12). Dann ist $\lambda \equiv 1$.

Beweis. Nach (5.12, 5.22) genügt es, $\lambda(\Lambda) = 1$ zu zeigen für Λ (i) eine Spiegelung, (ii) einen Boost, und (iii) eine Drehung.

(i) Aus $\Lambda^2 = 1$ folgt $\lambda(\Lambda)^2 = 1$, also $\lambda(\Lambda) = 1$.

(ii) Es gilt $\Lambda(-\chi) = P\Lambda(\chi)P$. Wegen $\lambda(P) = 1$ ist also $\lambda(-\chi) = \lambda(\chi)$. Aus $\Lambda(-\chi)\Lambda(\chi) = 1$ folgt $\lambda(\chi)^2 = 1$.

(iii) Jede Drehung $R \in \text{SO}(3)$ ist eine Drehung um eine feste Achse \vec{e} mit Winkel φ . Bei festem \vec{e} ist $R(\varphi_1)R(\varphi_2) = R(\varphi_1 + \varphi_2)$ und $R(2\pi) = 1$. Also: $\lambda(\varphi_1)\lambda(\varphi_2) = \lambda(\varphi_1 + \varphi_2)$ und $\lambda(2\pi) = 1$. Sei nun $\varphi = 2\pi m/n$ (m, n ganz). Dann ist $\lambda(\varphi)^n = \lambda(2\pi)^m = 1$, d.h. $\lambda(\varphi) = 1$. Da λ stetig ist, folgt $\lambda(\varphi) = 1$ für alle φ . \square

6 Relativistische Elektrodynamik und Mechanik

6.1 Elektrodynamik

Die Maxwell–Gleichungen erweisen sich als forminvariant unter Lorentz–Transformationen (Lorentz 1904, Poincaré 1905). Zunächst festzulegen ist allerdings das Transformationsverhalten von ρ , \vec{v} , \vec{E} , \vec{B} unter Koordinatentransformationen. Am einfachsten geschieht dies mittels **Tensorfelder**, s. Anhang B: ρ , \vec{v} werden als Komponenten eines 4–er Vektors aufgefasst (**4–er Strom**)

$$j^\mu = (c\rho, \vec{v}) , \quad (6.1)$$

\vec{E} , \vec{B} hingegen als Komponenten eines antisymmetrischen Tensors (**elektromagnetischer Feldtensor**)

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & E_1 & E_2 & E_3 \\ -E_1 & 0 & -B_3 & B_2 \\ -E_2 & B_3 & 0 & -B_1 \\ -E_3 & -B_2 & B_1 & 0 \end{pmatrix} = -F_{\nu\mu} , \quad (6.2)$$

d.h. $E_i = F_{0i}$, $B_i = -F_{i+1\ i+2}$, ($i = 1, 2, 3$). Damit ist das Verhalten dieser Felder unter affinen Koordinatentransformationen $\bar{x}^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu + a^\mu$ festgelegt:

$$\begin{aligned} \bar{j}^\mu(\bar{x}) &= j^\alpha(x) \Lambda^\mu_\alpha , \\ \bar{F}_{\mu\nu}(\bar{x}) &= F_{\alpha\beta}(x) \Lambda_\mu^\alpha \Lambda_\nu^\beta . \end{aligned}$$

Die Maxwell–Gleichungen lauten in relativistischer Form

$$F_{\mu\nu,\sigma} + F_{\sigma\mu,\nu} + F_{\nu\sigma,\mu} = 0 , \quad (6.3)$$

$$F^{\mu\nu}{}_{,\mu} = \frac{1}{c} j^\nu . \quad (6.4)$$

Die Metrik geht darin ein über

$$F^{\mu\nu} = F_{\alpha\beta} g^{\mu\alpha} g^{\nu\beta} .$$

In einem Inertialsystem, d.h. in einem, wo die Metrik die Normalform (5.8) hat, ist

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E_1 & -E_2 & -E_3 \\ E_1 & 0 & -B_3 & B_2 \\ E_2 & B_3 & 0 & -B_1 \\ E_3 & -B_2 & B_1 & 0 \end{pmatrix} = -F^{\nu\mu} .$$

Man prüft nach, dass (6.3, 6.4) mit den Maxwell–Gleichungen (2.20, 2.21) übereinstimmen: ($i = 1, 2, 3$)

$$\begin{aligned} F_{12,3} + F_{31,2} + F_{23,1} &= -(B_{3,3} + B_{2,2} + B_{1,1}) = -\operatorname{div} \vec{B} , \\ F_{0i,i+1} + F_{ii+1,0} + F_{i+10,i} &= E_{i,i+1} - B_{i+2,0} - E_{i+1,i} = -\left(\operatorname{rot} \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}\right)_{i+2} , \end{aligned}$$

$$F^{\mu 0}{}_{,\mu} = E_{1,1} + E_{2,2} + E_{3,3} = \operatorname{div} \vec{E} ,$$

$$F^{\mu i}{}_{,\mu} = -E_{i,0} + B_{i+2,i+1} - B_{i+1,i+2} = \left(\operatorname{rot} \vec{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right)_i .$$

Als Tensorgleichungen gelten (6.3, 6.4) in beliebigen affinen Koordinaten, aber nur in Inertialsystemen stimmen sie mit den Maxwell-Gleichungen für die durch (6.1, 6.2) definierten Felder $\rho, \vec{v}, \vec{E}, \vec{B}$ überein. Weitere Gleichungen der Elektrodynamik lauten in Tensorform:

- Ladungserhaltung: Aus (6.5) und $F^{\mu\nu} = -F^{\nu\mu}$ folgt

$$j^\nu{}_{,\nu} = c F^{\mu\nu}{}_{,\mu\nu} = 0 .$$

- Elektromagnetische Potentiale A_μ :

$$F_{\mu\nu} = A_{\nu,\mu} - A_{\mu,\nu}$$

erfüllt die homogene Maxwell-Gleichung (6.3) und ist mit $A_\mu = (\varphi, -\vec{A})$ äquivalent zu (2.28):

$$\begin{aligned} A_{i,0} - A_{0,i} &= -\left(\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \vec{\nabla} \varphi \right)_i , \\ A_{i+2,i+1} - A_{i+1,i+2} &= -\partial_{i+1}(\vec{A})_{i+2} + \partial_{i+2}(\vec{A})_{i+1} = -(\operatorname{rot} \vec{A})_i , \end{aligned}$$

- Eichtransformationen: $F_{\mu\nu}$ ist invariant unter

$$A_\mu \longrightarrow A_\mu - \chi_{,\mu} \tag{6.5}$$

mit einer beliebigen Funktion $\chi(x)$. Das sind die Eichtransformationen (2.30).

- Lorenz-Eichung: (2.31) lautet

$$A^\mu{}_{,\mu} = 0 .$$

- Wellengleichung: Bei Lorenz-Eichung lautet (2.33)

$$\square A^\mu = \frac{j^\mu}{c} .$$

\square ist der Laplace-Operator bezgl. der Metrik (5.8). Die Wellengleichung folgt aus (6.5) wegen

$$F^{\mu\nu}{}_{,\mu} = \partial_\mu(\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) = \square A^\nu - \partial^\nu(A^\mu{}_{,\mu}) .$$

- Retardiertes Potential: In Inertialsystemen ist

$$A^\mu(x) = \frac{1}{c} \int d^4y D_{\text{ret}}(x-y) j^\mu(y) .$$

Dabei sind $d^4x, D_{\text{ret}}(x)$ Lorentz-invariant (letzteres nur für orthochrone Transformationen). Denn: $|\det \Lambda| = 1$ für das eine,

$$D_{\text{ret}}(x) = \frac{1}{2\pi} \delta(x^\mu x_\mu) \theta(x^0)$$

für das andere.

Transformation der Felder

Wir beschränken uns fortan auf Inertialsysteme und damit auf Lorentz-Transformationen $\Lambda^\mu{}_\nu$.

- Diskrete Transformationen (5.14):

– Raumspiegelung P

$$\begin{aligned}(\rho(\vec{x}, t), \vec{i}(\vec{x}, t)) &\longmapsto (\rho(-\vec{x}, t), -\vec{i}(-\vec{x}, t)) , \\(\vec{E}(\vec{x}, t), \vec{B}(\vec{x}, t)) &\longmapsto (-\vec{E}(-\vec{x}, t), \vec{B}(-\vec{x}, t)) .\end{aligned}$$

Man sagt, \vec{E} (bzw. \vec{B}) transformiere wie ein Vektor (bzw. Pseudovektor).

– Zeitumkehr T

$$\begin{aligned}(\rho(\vec{x}, t), \vec{i}(\vec{x}, t)) &\longmapsto (-\rho(\vec{x}, -t), \vec{i}(\vec{x}, -t)) , \\(\vec{E}(\vec{x}, t), \vec{B}(\vec{x}, t)) &\longmapsto (-\vec{E}(\vec{x}, -t), \vec{B}(\vec{x}, -t)) .\end{aligned}\tag{6.6}$$

Eine weitere Symmetrie der Maxwell-Gleichungen ist die Ladungskonjugation C :

$$\begin{aligned}(\rho(\vec{x}, t), \vec{i}(\vec{x}, t)) &\longmapsto (-\rho(\vec{x}, t), -\vec{i}(\vec{x}, t)) , \\(\vec{E}(\vec{x}, t), \vec{B}(\vec{x}, t)) &\longmapsto (-\vec{E}(\vec{x}, t), -\vec{B}(\vec{x}, t)) .\end{aligned}$$

Die Zeitumkehr (6.6) hat den Nachteil, dass sie das Vorzeichen der Ladung wechselt. Man kann sie aber ersetzen durch ihre Kombination mit C :

$$\begin{aligned}T : (\rho(\vec{x}, t), \vec{i}(\vec{x}, t)) &\longmapsto (\rho(\vec{x}, -t), -\vec{i}(\vec{x}, -t)) , \\(\vec{E}(\vec{x}, t), \vec{B}(\vec{x}, t)) &\longmapsto (\vec{E}(\vec{x}, -t), -\vec{B}(\vec{x}, -t)) .\end{aligned}\tag{6.7}$$

- Boosts (5.17): Für diese lautet (6.3)

$$\begin{aligned}\bar{\rho} &= \frac{\rho}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - \frac{\vec{v} \cdot \vec{i}/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} , \\ \bar{i}_{\parallel} &= -\frac{\rho \vec{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} + \frac{\vec{i}_{\parallel}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} , \quad \bar{i}_{\perp} = \vec{i}_{\perp} , \\ \bar{E}_{\parallel} &= \vec{E}_{\parallel} , \quad \bar{E}_{\perp} = \frac{\vec{E}_{\perp} + \frac{1}{c} \vec{v} \wedge \vec{B}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} , \\ \bar{B}_{\parallel} &= \vec{B}_{\parallel} , \quad \bar{B}_{\perp} = \frac{\vec{B}_{\perp} - \frac{1}{c} \vec{v} \wedge \vec{E}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} ,\end{aligned}$$

wobei \parallel und \perp die Anteile parallel und senkrecht zu \vec{v} bezeichnen. Diese Formeln gelten allgemein für die Transformation auf ein achsenparalleles Inertialsystem, das sich gegenüber dem ursprünglichen System mit der Relativgeschwindigkeit \vec{v} ($v = |\vec{v}| < c$). Zur Herleitung sei $\vec{v} = (v, 0, 0)$ und setze $\beta = v/c$, $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$. Die $F^{\mu\nu}$ transformieren wie Produkte $x^\mu y^\nu$ von Vektorkomponenten, z.B.

$$\bar{x}^1 \bar{y}^0 = \gamma(-\beta x^0 + x^1) \cdot \gamma(y^0 - \beta y^1) = \gamma^2(x^1 y^0 + \beta^2 x^0 y^1) - \gamma^2 \beta(x^0 y^0 + x^1 y^1) ,$$

also, mit $F^{\mu\nu} = -F^{\nu\mu}$,

$$\bar{E}_1 = \bar{F}^{10} = \underbrace{\gamma^2(1 - \beta^2)}_{=1} F^{10} = E_1 ;$$

oder $\bar{x}^2 \bar{y}^1 = x^2 \cdot \gamma(y^1 - \beta y^0)$, d.h.

$$\bar{B}_3 = \bar{F}^{21} = \gamma(F^{21} - \beta F^{20}) = \gamma(B_3 - \beta E_2) .$$

Aus (6.8) ist ersichtlich, dass die Aufspaltung des Feldes in einen elektrischen und magnetischen Anteil vom Bezugssystem abhängt. Invariant sind

$$F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} = 2(\vec{B}^2 - \vec{E}^2) , \quad \det(F_{\mu\nu}) = (\vec{E} \cdot \vec{B})^2 .$$

Somit ist $\vec{E} \cdot \vec{B}$ invariant unter L_+^\uparrow (denn L_+^\uparrow ist zusammenhängend). Zusammen mit dem Verhalten unter P, T ergibt sich

$$\bar{\vec{E}} \cdot \bar{\vec{B}} = \vec{E} \cdot \vec{B} \det \Lambda ,$$

(Pseudoskalar). Die Aussagen $\vec{E}^2 = \vec{B}^2$ und $\vec{E} \perp \vec{B}$ (ebene Welle) sind invariant.

6.2 Relativistische Mechanik

(Einstein 1905) Die Bewegung eines Teilchens ist dargestellt im \mathbb{R}^4 durch seine **Weltlinie** $x(\lambda) = (x^0(\lambda), \vec{x}(\lambda))$, wobei λ ein beliebiger Kurvenparameter ist, z.B. die Zeitkoordinate:

$$x(t) = (ct, \vec{x}(t)) . \quad (6.8)$$

Unabhängig vom Kurvenparameter und Lorentz-invariant ist die Bogenlänge

$$\int_{(1)}^{(2)} d\lambda \left(\frac{dx}{d\lambda}, \frac{dx}{d\lambda} \right)^{1/2} = \int_{(1)}^{(2)} ds ,$$

wobei (\cdot, \cdot) das Skalarprodukt zur Metrik (5.8) ist. Die Bogenlänge s ist charakterisiert durch

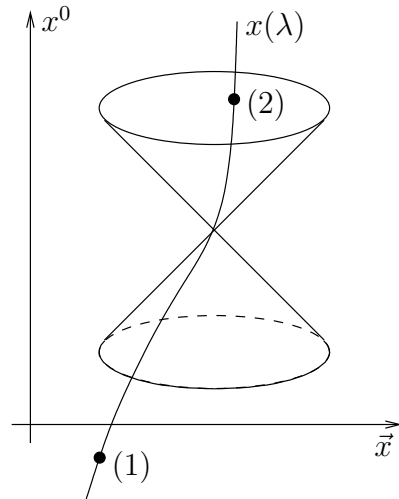
$$\left(\frac{dx}{ds}, \frac{dx}{ds} \right) = 1 , \quad (6.9)$$

d.h.

$$ds^2 = (dx, dx) = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu .$$

Sie ist somit bis auf Transformationen $s' = \lambda s + a$ ($\lambda = \pm 1, a \in \mathbb{R}$) eindeutig. Statt s benutzen wir die **Eigenzeit** $\tau = s/c$. Aus (6.8) folgt dann mit $\vec{v} = d\vec{x}/dt$

$$\begin{aligned} ds^2 &= (c^2 - v^2) dt^2 , \\ d\tau &= dt \cdot \sqrt{1 - v^2/c^2} . \end{aligned} \quad (6.10)$$



– Der Name Eigenzeit rührt davon her, dass $d\tau = dt$ im Ruhesystem des Teilchens (ein Inertialsystem, in dem das Teilchen momentan die Geschwindigkeit Null hat).

– Wir haben $v < c$ vorausgesetzt. Geometrisch bedeutet dies, dass die Weltlinie innerhalb des Lichtkegels durch jeden ihrer Punkte verläuft. Diese Bedingung ist mit der Bewegungsgleichung verträglich (siehe später): gilt sie zu einer Zeit, so zu allen.

– Durch die Wahl der positiven Wurzel in (6.10) hat $d\tau$ stets das Vorzeichen von dt . Deshalb ist $d\tau$ ein Pseudoskalar unter Lorentz-Transformationen,

$$d\bar{\tau} = \text{sgn}(\Lambda^0_0)d\tau .$$

Wir bilden die Pseudovektoren (bzgl. Zeitumkehr)

$$\begin{aligned} u &= \frac{dx}{d\tau} && \text{(4-er Geschwindigkeit) ,} \\ p &= mu && \text{(4-er Impuls) .} \end{aligned}$$

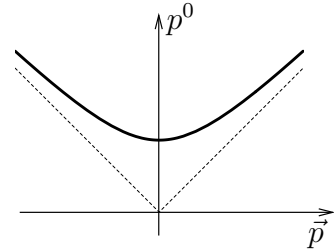
Hier ist $m > 0$ die (Lorentz-invariante) **Masse** des Teilchens. Aus (6.9) folgt

$$(u, u) = c^2 , \quad (p, p) = m^2 c^2 . \quad (6.11)$$

In Komponenten ist

$$u^\mu = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} (c, \vec{v}) , \quad p^\mu = \frac{m}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} (c, \vec{v}) ,$$

wobei stets $p^0 > 0$ ist. Der 4-er Impuls liegt auf einem durch m bestimmten ‘Massenhyperboloid’ im \mathbb{R}^4 : $(p^0)^2 - \vec{p}^2 = m^2 c^2$.



Wir betrachten nun ein Teilchen (Masse m , Ladung e) in einem äusseren elektromagnetischen Feld. Seine Bewegungsgleichung im Ruhesystem ($\vec{v} = 0$) soll die nichtrelativistische sein:

$$m\ddot{\vec{x}} = e \vec{E}(\vec{x}, t) . \quad (6.12)$$

Um die Bewegungsgleichung in einem beliebigen Inertialsystem zu finden, genügt es eine Lorentz-invariante Gleichung anzugeben, die für $v = 0$ mit (6.12) übereinstimmt. Diese ist

$$\frac{dp^\mu}{d\tau} = \frac{e}{mc} F^{\mu\nu}(x) p_\nu .$$

Sie schreibt sich nämlich als

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \frac{d}{dt} \frac{m}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \begin{pmatrix} c \\ v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} &= \\ \frac{e}{mc} \begin{pmatrix} 0 & -E_1 & -E_2 & -E_3 \\ E_1 & 0 & -B_3 & B_2 \\ E_2 & B_3 & 0 & -B_1 \\ E_3 & -B_2 & B_1 & 0 \end{pmatrix} \frac{m}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \begin{pmatrix} c \\ -v_1 \\ -v_2 \\ -v_3 \end{pmatrix} , \end{aligned}$$

also als

$$\frac{d}{dt} cp^0 = \frac{d}{dt} \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = e \vec{E} \cdot \vec{v}, \quad (6.13)$$

$$\frac{d}{dt} \vec{p} = \frac{d}{dt} \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = e \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \wedge \vec{B} \right). \quad (6.14)$$

Für $v = 0$ reduziert sich (6.14) auf (6.12) und (6.13) ist trivial. Im allgemeinen folgt (6.13) aus (6.14): Nach (6.11) ist $(p, dp/dt) = 0$ und somit

$$p^0 \frac{dp^0}{dt} = \vec{p} \cdot \frac{d\vec{p}}{dt} = e \vec{E} \cdot \vec{p} = p^0 e \vec{E} \cdot \frac{\vec{v}}{c}.$$

Rechts in der relativistischen Bewegungsgleichung (6.14) steht die Lorentz-Kraft (2.22), rechts in (6.13) deren Leistung. Also ist

$$cp^0 = \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$$

als relativistische **kinetische Energie** aufzufassen. Die Leistung (6.13) ist über ein endliches Zeitintervall beschränkt, falls \vec{E} es ist; dann ist es auch cp^0 , womit das Teilchen $v = c$ nicht erreichen kann. Für $v \ll c$ ist

$$\frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = mc^2 + \frac{1}{2}mv^2 + \dots :$$

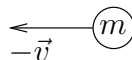
$\frac{1}{2}mv^2$ ist die nichtrelativistische kinetische Energie, mc^2 heisst die **Ruheenergie** des Teilchens. Sie spielt eine Rolle bei Stossprozessen. Dort ist der Gesamtimpuls P^μ erhalten, dafür die Gesamtmasse nicht mehr! Beispiel: symmetrischer Zerfall:

vorher:



$$P^\mu = (Mc, \vec{0})$$

nacher:



$$P^\mu = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}} (2mc, \vec{0})$$

Somit ist

$$2m = M \sqrt{1-v^2/c^2} < M.$$

Lagrange-Funktion. Die Bewegungsgleichung (6.14) ist die Euler-Lagrange Gleichung zur Lagrange-Funktion

$$L(\vec{x}, \vec{v}, t) = \underbrace{-mc^2 \sqrt{1-v^2/c^2}}_{-mc^2 + \frac{mv^2}{2} + \dots} - e \left(\varphi - \frac{\vec{v}}{c} \cdot \vec{A} \right), \quad (6.15)$$

die für $v \ll c$ in die nichtrelativistische Lagrange-Funktion übergeht (bis auf die hier unwesentliche Konstante $-mc^2$). In der Tat:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial v_k} &= \frac{m v_k}{\sqrt{1-v^2/c^2}} + \frac{e}{c} A_k \quad (\text{kanonischer Impuls}), \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial v_k} &= \frac{d}{dt} \frac{m v_k}{\sqrt{1-v^2/c^2}} + \frac{e}{c} \left(\frac{\partial A_k}{\partial t} + A_{k,l} v_l \right), \\ \frac{\partial L}{\partial x_k} &= -e \varphi_{,k} + \frac{e}{c} A_{l,k} v_l. \end{aligned}$$

Die Euler–Lagrange Gleichung $(d/dt)(\partial L/\partial v_k) - (\partial L/\partial x_k) = 0$ lautet deshalb

$$\frac{d}{dt} \frac{m v_k}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = e \underbrace{\left(-\varphi_{,k} - \frac{1}{c} \frac{\partial A_k}{\partial t}\right)}_{E_k} + \frac{e}{c} \underbrace{(A_{l,k} - A_{k,l})v_l}_{(\vec{v} \wedge \vec{B})_k},$$

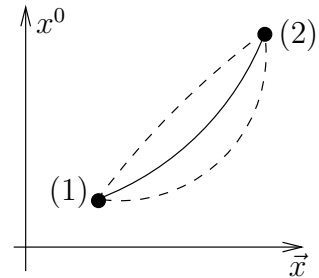
was mit (6.14) übereinstimmt. Die Lagrange–Funktion (6.15) ist selbst nicht Lorentz–invariant, wohl aber

$$L dt = \frac{L}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} d\tau = -\left(mc^2 + \frac{e}{c}(u, A)\right) d\tau.$$

Das Hamiltonsche Variationsprinzip für die Weltlinie des Teilchens hat somit die invariante Form

$$\delta \int_{(1)}^{(2)} \left(mc^2 + \frac{e}{c}(u, A)\right) d\tau = 0$$

bei Variationen mit festen Endpunkten im \mathbb{R}^4 .



L ist auch nicht eichinvariant: unter einer Eichtransformation (6.5) ändert sich L um ein totales Differential

$$L \longrightarrow L + \frac{e}{c} \left(\frac{\partial \chi}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \chi \right) = L + \frac{e}{c} \frac{d\chi}{dt},$$

wodurch die Bewegungsgleichung unverändert bleibt.

7 Die frühe Quantentheorie

7.1 Das Plancksche Strahlungsgesetz (1900)

Nach klassischer Vorstellung ist ein **Teilchen** (z.B. ein Elektron oder ein Atom) charakterisiert durch Ort und Geschwindigkeit, deren Angabe beliebig genau sein kann; eine **Welle** hat eine bestimmte Frequenz und Wellenzahl, oder ist eine Superposition von solchen. Ein (elementares) Teilchen ist unteilbar und verläuft auf einer Bahn; eine Welle ist teilbar und die Teile können miteinander interferieren. Licht besteht aus elektromagnetischen Wellen und Materie aus Teilchen. Die beiden wechselwirken miteinander und gelangen, in einem verspiegelten Hohlraum eingeschlossen, zu einem thermischen Gleichgewicht, das Planck untersuchte.

Das zunächst freie elektromagnetische (e.m.) Feld genügt auf Grund der Maxwell-Gleichungen der Wellengleichung

$$\square \vec{E} = 0 \quad \text{mit} \quad \square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$$

und der Nebenbedingung

$$\operatorname{div} \vec{E} = 0, \quad (7.1)$$

(analog für \vec{B}). Der Separationsansatz

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = f(t) \vec{E}(\vec{x})$$

führt auf

$$\frac{1}{c^2} \ddot{f}(t) \vec{E}(\vec{x}) = f(t) \Delta \vec{E}(\vec{x})$$

und weiter

$$\ddot{f} = -\omega^2 f, \quad -\Delta \vec{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E} \quad (7.2)$$

für eine Konstante $\omega^2 (\geq 0)$: Dies sind die Bewegungsgleichung eines harmonischen Oszillators, bzw. die Eigenwertgleichung für $-\Delta$. Auf dem Rand des Hohlraums sollen die Randbedingungen

$$\vec{E}_{\parallel} = 0, \quad \frac{\partial \vec{E}_{\perp}}{\partial n} = 0$$

ideal leitender Wände gelten. Wählt man diesen einfachheitshalber als den Würfel $0 \leq x_i \leq L$, ($i = 1, 2, 3$), so lauten die Eigenschwingungen

$$E_i(\vec{x}) = E_i \cos(k_i x_i) \sin(k_{i+1} x_{i+1}) \sin(k_{i+2} x_{i+2}) : \quad (7.3)$$

Die Randbedingungen ($E_i = 0$ für $x_j = 0, L$ ($j \neq i$); $\partial E_i / \partial x_i = 0$ für $x_i = 0, L$) sind erfüllt, falls

$$k_i = \frac{\pi}{L} n_i, \quad n_i \text{ ganz, } \geq 0, \text{ höchstens ein } n_i = 0. \quad (7.4)$$

Mit $\vec{E} = (E_1, E_2, E_3)$ und $\vec{k} = (k_1, k_2, k_3)$ verlangt (7.1) $\vec{E} \cdot \vec{k} = 0$: zu jedem \vec{k} gibt es zwei linear unabhängige Eigenschwingungen mit Eigenfrequenzen $\omega = c \cdot |\vec{k}|$. Die Zahl der Eigenschwingungen $\leq \omega$ ist nach (7.4) asymptotisch für $\omega \gg c/L$

$$N(\omega) = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \cdot \left(\frac{\omega L}{\pi c} \right)^3 = \frac{V}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{\omega^3}{3}$$

für grosse ω , wobei $V = L^3$, bzw.

$$\frac{dN}{d\omega} = V \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}. \quad (7.5)$$

Planck stellt sich die Materie vor als bestehend aus Oszillatoren (“Resonatoren”) verschiedener Frequenzen ω_0 , welche die sonst unabhängigen e.m. Schwingungen ins Gleichgewicht bringen. Er geht dabei in zwei Schritten vor:

- i) Die Resonatoren der Frequenz ω_0 werden durch das e.m. Feld angeregt und strahlen auch zurück. Das resultierende dynamische Gleichgewicht zwischen mittlerer Energie der Eigenschwingung, \bar{U}_ω , und das Resonators, \bar{E}_{ω_0} , ist

$$\bar{U}_{\omega_0} = \bar{E}_{\omega_0}. \quad (7.6)$$

- ii) Danach wird \bar{E}_ω im thermischen Gleichgewicht bei der Temperatur T bestimmt (und damit auch \bar{U}_ω).

Die Energieverteilung kann dann durch die spektrale Energiedichte $u(\omega, T)$ beschrieben werden:

$$V \cdot u(\omega, T) d\omega = \bar{U}_\omega \cdot dN$$

ist die Energie aller Moden mit Frequenzen in $[\omega, \omega + d\omega]$; also

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \bar{U}_\omega. \quad (7.7)$$

- i) Die Schwingung eines Resonators, $be^{-i\omega t}$, genügt der Differentialgleichung (Newtonsche Gleichung)

$$m\ddot{b} + \gamma\dot{b} + m\omega_0^2 b = e\mathcal{E}e^{-i\omega t}, \quad (7.8)$$

falls sie durch eine Schwingung $\sim e^{-i\omega t}$ einer Komponenten \mathcal{E} des elektrischen Felds angeregt wird. Dabei sind m, e die Masse, bzw. die Ladung des Resonators und $\gamma = e^2\omega_0^2/(6\pi c^3)$ ist eine summarische Beschreibung der Strahlungsverluste (s. Elektrodynamik). Also ist

$$b = \frac{\frac{e\mathcal{E}}{m}}{\omega_0^2 - \omega^2 - \frac{i\gamma\omega_0}{m}} \approx \frac{e\mathcal{E}}{2m\omega_0} \cdot \frac{1}{\omega_0 - \omega - \frac{i\gamma}{2m}}$$

für $\omega \approx \omega_0$, mit entsprechender (ungestörter) Energie

$$E_{\omega_0}(\omega) = \frac{m}{2}(\omega^2 + \omega_0^2)|b|^2 \approx m\omega_0^2|b|^2 \approx \frac{m}{4} \frac{(\frac{e\mathcal{E}}{m})^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + (\frac{\gamma}{2m})^2}. \quad (7.9)$$

Sind die Phasen der verschiedenen Moden unkorreliert, so sind ihre Beiträge (7.9) im Mittel additiv. Die Gesamtenergie eines Resonators ist damit

$$\bar{E}_{\omega_0} = \int_0^\infty E_{\omega_0}(\omega) dN(\omega) = 3V \overline{|\mathcal{E}_{\omega_0}|^2} = \bar{U}_{\omega_0}$$

unter Verwendung von (7.5) und von $(x^2 + a^2)^{-1} \approx \frac{\pi}{a} \delta(x)$. Die letzte Gleichung folgt aus der Isotropie der Strahlung: $3V \overline{|\mathcal{E}_{\omega_0}|^2} = V \overline{|\vec{E}_{\omega_0}|^2} = \bar{U}_{\omega_0}$.

ii) Folgende Überlegung, die Planck nicht machte, drängt sich hier auf. Die Wahrscheinlichkeit, ein Hamiltonsches System mit Phasenkoordinaten p, q in $dpdq$ zu finden, ist bei der Temperatur T nach Boltzmann

$$w(p, q)dpdq = \frac{e^{-\beta H(p, q)}}{Z(\beta)} dpdq, \quad (7.10)$$

wobei H die Hamiltonfunktion ist, $\beta = (kT)^{-1}$ die inverse Temperatur, k die Boltzmann-Konstante und

$$Z(\beta) = \int dpdq e^{-\beta H(p, q)}. \quad (7.11)$$

Die mittlere Energie ist damit

$$\bar{E} = \int dpdq H(p, q)w(p, q) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(\beta).$$

Für einen 1-dimensionalen harmonischen Oszillator,

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 q^2,$$

ist (7.11) ein Gaußsches Integral,

$$Z(\beta) = \frac{2\pi}{\beta\omega_0},$$

und damit

$$\bar{E} = \frac{1}{\beta} = kT, \quad (7.12)$$

was unabhängig von ω_0 ist. Wendet man dies auf die Resonatoren an und, indirekt über (7.6), auf \bar{U}_{ω_0} (oder, wie Rayleigh, direkt auf die Feldoszillatoren (7.2), ohne auf die Einstellung des Gleichgewichts einzugehen), so folgt aus (7.7)

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT, \quad (7.13)$$

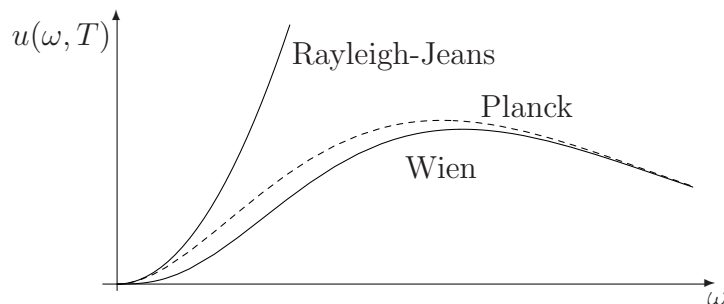
(Rayleigh 1900, berichtigt durch Jeans 1905). Dieses Verhalten führt auf die Energie pro Volumeneinheit

$$\int_0^\infty u(\omega, T) d\omega = \infty \quad (!)$$

(“Ultraviolett katastrophe”) und steht im Widerspruch zum experimentellen Verhalten

$$u(\omega, T) \propto \omega^3 e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \quad (7.14)$$

für grosse ω (Wien, 1896). Planck folgerte über (7.6, 7.7) $\bar{E}_\omega \propto \omega e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}$ und bemerkte, dass \hbar (damals anders benannt) eine neue Naturkonstante sein musste.



Am 7. Oktober 1900 erfuhr Planck von Messungen, die eine Abweichung vom Wienschen Gesetz zeigten. Noch am selben Tag änderte er den Ausdruck für \bar{E}_ω ab und gelangte so zum **Strahlungsgesetz**

$$u(\omega, T) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}, \quad (7.15)$$

(s. Übungen für Details). Sie interpoliert zwischen (7.13) und (7.14). Aus dem Vergleich mit der neuen experimentellen Kurve fand er

$$\begin{aligned} \hbar &= 1,04 (1,05549) \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}, \\ k &= 1,34 (1,3807) \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \end{aligned}$$

(in Klammern die heutigen Werte) und auch den damals besten Wert für die Avogadro Zahl

$$N_A = \frac{R}{k} = 6,17 (6,022) \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}.$$

Die grossartigste Bestätigung fand das Plancksche Gesetz (7.15) in der gemessenen Spektralverteilung der kosmischen Hintergrundstrahlung bei $T = 2,73\text{K}$ (COBE 1992, WMAP 2003).

Nachträglich (14. Dez. 1900) begründet Planck (7.15) so:

“Wir betrachten aber – und dies ist der wesentlichste Punkt der ganzen Berechnung – E als zusammengesetzt aus einer ganz bestimmten Anzahl endlicher Teile und bedienen uns dazu der Naturconstanten $h = 6,55 \cdot 10^{-27}$ [erg·sec].”

(hier ist E die Energie eines Resonators und $h = 2\pi\hbar$).

Die gleichen Teile setzt er dann gleich $\hbar\omega_0$, d.h. die möglichen Energien eines Resonators sind **quantisiert**:

$$E_n = n\hbar\omega_0, \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (7.16)$$

Dies bedingt die Ersetzung von (7.10) durch

$$w_n = \frac{e^{-\beta n\hbar\omega_0}}{Z(\beta)}, \quad Z(\beta) = \sum_0^\infty e^{-\beta n\hbar\omega_0} = \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_0}}$$

und damit

$$\bar{E} = -\frac{\partial}{\partial\beta} \log Z(\beta) = \frac{\hbar\omega_0}{e^{\beta\hbar\omega_0} - 1},$$

was über (7.6, 7.7) auf (7.15) führt. (s. Übungen für Plancks äquivalente Überlegung).

Beachte, dass Planck die Feldoszillatoren nicht quantisierte. Als Einstein dies tat (s. unten), erschien ihm der Schritt zu radikal. Umgekehrt bemängelte Einstein, dass die Quantisierungshypothese (7.16) im Widerspruch zum kontinuierlichen Energieaustausch steht, wie er in (7.8) zum Ausdruck kommt.

7.2 Licht als Teilchen (Einstein 1905)

Der 1. und 2. Hauptsatz der Thermodynamik besagen in knapper Form $dU = TdS - pdV$, d.h.

$$dS = \frac{1}{T}dU + \frac{p}{T}dV, \quad (7.17)$$

wobei S : Entropie, U : innere Energie, V : Volumen, p : Druck, T : Temperatur sich auf Gleichgewichtszustände eines physikalischen Systems beziehen. Diese sollen durch Angabe zweier Zustandsvariablen, z.B. U und V , bestimmt sein. So legt (7.17) die partiellen Ableitungen von $S(U, V)$ fest:

$$\left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_V = \frac{1}{T}, \quad \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_U = \frac{p}{T}.$$

- Für ein ideales Gas aus N Teilchen ist nach dem idealen Gasgesetz

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_U = \frac{p}{T} = \frac{Nk}{V},$$

also

$$S(U, V) - S(U, V_0) = \int_{V_0}^V \frac{\partial S}{\partial V} dV = Nk \log \frac{V}{V_0} = k \log \left(\frac{V}{V_0}\right)^N. \quad (7.18)$$

- Ein Oszillator hat nur eine unabhängige Zustandsvariable, z.B. u oder T . Im Wienschen Grenzfall hat ein Feldoszillator der Frequenz ω die (mittlere) Energie

$$u(T) = \hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}},$$

sodass

$$\begin{aligned} \frac{ds}{du} &= \frac{1}{T} = -\frac{k}{\hbar\omega} \log \frac{u}{\hbar\omega}, \\ s(u) &= \int \frac{ds}{du} du = -\frac{ku}{\hbar\omega} \left(\log \frac{u}{\hbar\omega} - 1 \right), \end{aligned} \quad (7.19)$$

(verwende $\int \log x dx = x(\log x - 1)$; die Wahl der Integrationskonstanten ist unwesentlich).

- Einstein betrachtet als System das e.m. Feld im Hohlraum im Frequenzbereich $[\omega, \omega + \Delta\omega]$ (monochromatische Strahlung). Dessen Entropie und Energie sind

$$S(U, V) = \Delta N \cdot s(u), \quad U = \Delta N \cdot u,$$

wobei

$$\Delta N = V \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \Delta\omega$$

die Anzahl Oszillatoren ist. Also, mit (7.19),

$$S(U, V) = \Delta N \cdot \left(-\frac{kU/\Delta N}{\hbar\omega} \right) \cdot \left(\log \left(\frac{\pi^2 c^3 U}{\hbar\omega^3 \Delta\omega V} \right) - 1 \right)$$

und

$$S(U, V) - S(U, V_0) = \frac{kU}{\hbar\omega} \log \frac{V}{V_0} = k \log \left(\frac{V}{V_0}\right)^{\frac{U}{\hbar\omega}}.$$

Nun vergleicht dies Einstein mit (7.18) und schliesst:

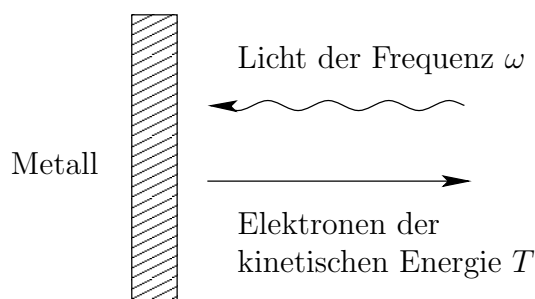
“Monochromatische Strahlung geringer Dichte (innerhalb des Gültigkeitsbereich der Wienschen Strahlungsformel) verhält sich in wärmetheoretischer Beziehung so, wie wenn sie aus voneinander unabhängigen Energiequanten von der Grösse $\hbar\omega$ bestünde.”

Als Gleichung:

$$E = \hbar\omega . \quad (7.20)$$

Er wendet diesen “heuristischen Gesichtspunkt” an, um “zu untersuchen, ob auch die Gesetze der Erzeugung und Verwandlung des Lichts so beschaffen sind, wie wenn das Licht aus derartigen Lichtquanten bestünde”. Eine Anwendung ist auf den **photoelektrischen Effekt** (entdeckt 1887, Hertz).

Beobachtung (Lenard 1902): Die Energie T der emittierten Elektronen hängt (monoton wachsend) nur von der Frequenz, nicht aber von der Intensität der einfallenden Strahlung ab, entgegen der klassischen Vorstellung. Davon abhängig ist hingegen die Emissionsrate.



Deutung (Einstein 1905): ein Lichtquant $\hbar\omega$ wird an ein einziges Elektron übergeben, das dann aus dem Metall mit der Energie

$$T = \hbar\omega - W \quad (7.21)$$

(W : Austrittsarbeit) entweicht. (Erst um 1915 waren die experimentellen Daten gut genug, um (7.21) zu bestätigen.)

7.3 Die Bohrsche Quantenhypothese (1913)

Atome weisen diskrete Lichtemissionsspektren auf. Für das Wasserstoff-Atom gilt die empirisch hergeleitete Formel

$$\omega_{nm} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n, m = 1, 2, \dots, \quad n > m, \quad (7.22)$$

(Balmer 1885, aus den 4 Linien $m = 2, n = 3, 4, 5, 6$).

Bohr nimmt an (analog zur Planckschen Quantisierung des Resonators, aber gegen klassische Vorstellungen), dass das Atom nur in Zuständen mit diskreten Energien E_n existieren kann. Strahlung (nämlich ein Lichtquant) der Frequenz

$$\omega_{nm} = \frac{1}{\hbar} (E_n - E_m)$$

wird emittiert beim Übergang $n \rightarrow m$, $E_m < E_n$. (Auch der Übergang $m \rightarrow n$ ist möglich unter Absorption eines Lichtquants gleicher Frequenz.) Mit diesem Ansatz wird der spektroskopische Befund (7.22) als Energiebilanz erklärt. Für das H-Atom ergibt sich

$$E_n = -\text{Ry} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (7.23)$$

mit $\text{Ry} = R \cdot \hbar$.

Als Modell des Atoms verwendet Bohr das von Rutherford (1911): Ein Elektron (Masse m , Ladung $-e$) im Feld eines viel schwereren Kerns (Ladung e), den wir zunächst als fest annehmen. Längs klassischen Bahnen würde das Elektron strahlen und so dem Kern stets näher kommen. Bohr wählt die Quantenzustände unter den Kreisbahnen (Radius r , Winkelgeschwindigkeit ω , Drehimpuls L , Energie E). Für diese gilt

$$mr\omega^2 = \frac{e^2}{r^2}, \quad L = mr^2\omega, \quad E = \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}.$$

Daraus folgt

$$r = \frac{L^2}{me^2}, \quad E = -\frac{me^4}{2L^2}, \quad \omega = \frac{me^4}{L^3}.$$

Nach (7.23) muss $L \propto n$ sein. Bohr setzt als **Quantenbedingung**:

$$L_n = \hbar n, \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (7.24)$$

und findet

$$\begin{aligned} r_n &= a_0 n^2, & a_0 &= \frac{\hbar^2}{me^2} && \text{(Bohr-Radius)}, \\ E_n &= -\text{Ry} \cdot \frac{1}{n^2}, & \text{Ry} &= \frac{me^4}{2\hbar^2} && \text{(Rydbergkonstante)}, \end{aligned} \quad (7.25)$$

$$\omega_n = \frac{2\text{Ry}}{\hbar n^3} \quad (7.26)$$

mit den heutigen Werten

$$a_0 = 0,529177 \cdot 10^{-10} \text{ m}, \quad \text{Ry} = 13,6058 \text{ eV}.$$

Berücksichtigt man die Mitbewegung des Kerns der Masse M , so ist m durch die reduzierte Masse zu ersetzen; ebenso seine Ladung e durch Ze bei wasserstoffähnlichen Ionen wie He^+ ; also Ry in (7.25) durch

$$Z^2 \frac{M}{M+m} \text{Ry}.$$

Die Wahl von \hbar als Proportionalitätsfaktor in (7.24) ist zwingend, falls man die Gültigkeit der klassischen Strahlungstheorie für grosse n fordert: beim Übergang $n \rightarrow n-1$ soll dann Licht der klassischen Umlauffrequenz ω_n ausgestrahlt werden. In der Tat stimmt

$$\omega_{n,n-1} = \frac{\text{Ry}}{\hbar} \left(\frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2} \right) \approx \frac{2\text{Ry}}{\hbar n^3}, \quad (n \rightarrow \infty)$$

mit (7.26) überein. Später (1923) erhebt Bohr dies zum **Korrespondenzprinzip**: Die Quantentheorie reproduziert die klassische Physik im Grenzfall grosser Quantenzahlen.

Grosse Erfolge der Bohrschen Theorie waren u.A.:

- Der richtige Wert von R .
- a_0 als richtige Grössenordnung der Atome
- Die Erklärung des Verhältnisses $R_{\text{He}^+} : R_{\text{H}} = 4,0016$.

7.4 Die Quantisierung der Wirkung (Sommerfeld 1915)

Sommerfeld verallgemeinert die Bohrsche Bedingung (7.24). Die Quantisierung der **gebundenen** Bahnen eines Hamiltonschen System mit **einem** Freiheitsgrad ist die Quantisierung der Wirkung:

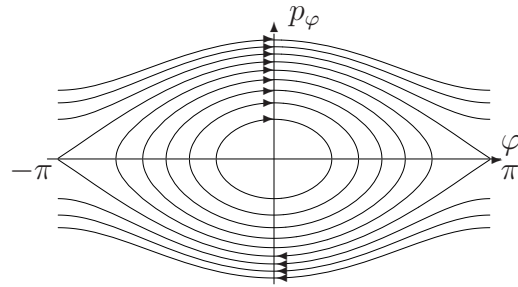
$$\oint p dq = 2\pi n\hbar = nh, \quad (n = (0), (\pm)1, (\pm)2, \dots), \quad (7.27)$$

wobei das Integral sich über eine Bahnkurve erstreckt.

Beispiele. 1. Das ebene Pendel (Masse m , Länge l) mit Hamiltonfunktion

$$H(\varphi, p_\varphi) = \frac{p_\varphi^2}{2ml^2} - mgl \cos \varphi$$

hat je eine Bahnkurve bei Energien $E < mgl$, aber je zwei, falls $E \geq mgl$. Nur im zweiten Fall kann n auch negativ sein.

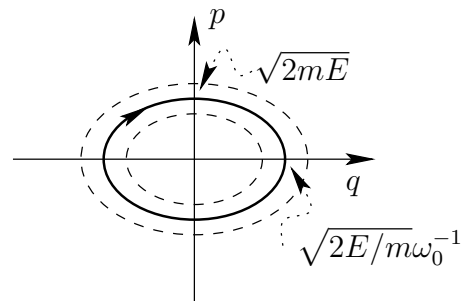


2. Harmonischer Oszillator. Die Bahnkurve der Energie E ,

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 q^2 = E,$$

ist eine Ellipse im Phasenraum, also

$$\oint p dq = \pi \sqrt{2mE} \cdot \sqrt{\frac{2E}{m}} \omega_0^{-1} = \frac{2\pi E}{\omega_0}$$



und (7.27) liefert

$$E_n = n\hbar\omega_0,$$

was überraschend mit Plancks Postulat (7.16) übereinstimmt.

3. Ein Teilchen, dass sich frei längs einem Kreis bewegt (Phasenkoordinaten (φ, p_φ) , $0 \leq \varphi < 2\pi$). Der Drehimpuls $p_\varphi = L$ ist erhalten. Also ist

$$\oint p_\varphi d\varphi = 2\pi L$$

und (7.27) ist (7.24).

Die Bedingung (7.27) lässt sich auf **vollständig separable Systeme** (s. Allgemeine Mechanik) mit f Freiheitsgraden erweitern: Solche, für welche die zeitunabhängige Hamilton-Jacobi Gleichung

$$H\left(q, \dots, q_f, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_f}\right) = E \equiv \alpha_1$$

($H(q, p)$: Hamiltonfunktion in passenden Koordinaten) eine vollständige Lösung der Form

$$S(q_1, \dots, q_f, \alpha_1, \dots, \alpha_f) = \sum_{k=1}^f S_k(q_k, \alpha_1, \dots, \alpha_f)$$

besitzt. Dabei sind $(\alpha_1, \dots, \alpha_f) = \alpha$ Erhaltungsgrößen. Im $2f$ -dimensionalen Phasenraum verläuft die Bewegung auf dem Schnitt von f durch α bestimmte Flächen

$$p_k = \frac{\partial S}{\partial q_k}(q, \alpha) = \frac{\partial S_k}{\partial q_k}(q_k, \alpha), \quad (k = 1, \dots, f). \quad (7.28)$$

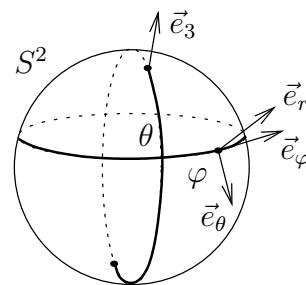
Für festes k definiert die Gleichung einen (topologischen) Kreis in der (q_k, p_k) -Ebene, falls die Bewegung beschränkt ist (wie für $f = 1$ die Kreise in der Figur). Die f -dimensionale Schnittfläche ist deren kartesisches Produkt und somit ein **Torus**. Die Sommerfeld-Bedingung ist anwendbar: Sie zeichnet als erlaubt diejenigen Tori (und nicht spezielle, darin verlaufende Bahnen) aus, für welche

$$W_k(\alpha) := \oint p_k dq_k = 2\pi n_k \hbar, \quad (n_k = 0, (\pm)1, \dots). \quad (7.29)$$

für alle $k = 1, \dots, f$, wo p_k durch (7.28) gegeben ist. Dies bestimmt $(\alpha_1, \dots, \alpha_f)$ als Funktion der n_k und insbesondere die möglichen Energien $E_{n_1 \dots n_f}$.

Beispiel. Das 2-Körperproblem (s. Allgemeine Mechanik). Nach Separation der Schwerpunktsbewegung und Verwendung von Polarkoordinaten (r, θ, φ) für die Relativbewegung,

$$\vec{x} = r \vec{e}_r, \quad \dot{\vec{x}} = \dot{r} \vec{e}_r + r \dot{\theta} \vec{e}_\theta + r(\sin \theta) \dot{\varphi} \vec{e}_\varphi,$$



lautet deren kinetische Energie

$$T = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi}^2),$$

mit kanonischen Impulsen

$$p_r = m\dot{r}, \quad p_\theta = mr^2 \dot{\theta}, \quad p_\varphi = mr^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi}.$$

Der Drehimpuls ist

$$\vec{L} = m\vec{x} \wedge \dot{\vec{x}} = mr^2 \dot{\theta} \vec{e}_r \wedge \vec{e}_\theta + mr^2 (\sin \theta) \dot{\varphi} \vec{e}_r \wedge \vec{e}_\varphi = p_\theta \vec{e}_\varphi - \frac{p_\varphi}{\sin \theta} \vec{e}_\theta,$$

sodass

$$\vec{L} \cdot \vec{e}_3 = p_\varphi, \quad \vec{L}^2 = p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2 \theta}. \quad (7.30)$$

Die Hamiltonfunktion lautet

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2 \sin^2 \theta} \right) + V(r)$$

und die Hamilton-Jacobi Gleichung

$$\frac{1}{2m} \left\{ \left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial S}{\partial \varphi} \right)^2 \right] \right\} + V(r) = E \equiv \alpha_1$$

ist vollständig separabel. Der Ansatz

$$S = S_r(r) + S_\theta(\theta) + S_\varphi(\varphi)$$

führt auf

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_\varphi}{\partial \varphi} &= \alpha_\varphi, \\ \left(\frac{\partial S_\theta}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{\alpha_\varphi^2}{\sin^2 \theta} &= \alpha_\theta^2, \\ \left(\frac{\partial S_r}{\partial r} \right)^2 + \frac{\alpha_\theta^2}{r^2} &= 2m(E - V(r)). \end{aligned}$$

Damit können $W_k(\alpha)$, ($k = r, \theta, \varphi$), in (7.29) berechnet werden:

$$\begin{aligned} W_\varphi(\alpha) &= 2\pi\alpha_\varphi, \\ W_\theta(\alpha) &= 2 \int_{\theta_{\min}=\pi-\theta_{\max}}^{\theta_{\max}} \sqrt{\alpha_\theta^2 - \frac{\alpha_\varphi^2}{\sin^2 \theta}} d\theta = 2\pi(\alpha_\theta - \alpha_\varphi), \end{aligned}$$

also

$$\alpha_\theta = \frac{1}{2\pi}(W_\varphi + W_\theta), \quad (7.31)$$

$$W_r(\alpha) = 2 \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{2m(E - V(r)) - \frac{\alpha_\theta^2}{r^2}} dr. \quad (7.32)$$

Nach Quantisierung der Wirkungen (7.29) sind die erlaubten **Drehimpulse** und **Energien** durch die Quantenzahlen n_r, n_φ, n_θ bestimmt, s. (7.30, 7.31, 7.32):

$$\begin{aligned} \vec{L} \cdot \mathbf{e}_3 &= \alpha_\varphi = n_\varphi \cdot \hbar, \\ \vec{L}^2 &= \alpha_\theta^2 = \underbrace{[(n_\varphi + n_\theta)\hbar]^2}_{:=l}, \\ E &= E_{n_r, l}. \end{aligned}$$

Die Energien hängen nur von zwei (statt 3) Quantenzahlen ab, dafür kommt jede $2l + 1$ mal vor (**Entartung**), denn $|n_\varphi| \leq l$ wegen $|\vec{L} \cdot \mathbf{e}_3| \leq |\vec{L}|$, also $(n_\varphi, n_\theta) = (-l, 2l), \dots, (l, 0)$.

Spezialfall: Wasserstoff-Atom (Kepler-Problem), d.h. $V(r) = -e^2/r$. Dann ist für $E < 0$ (damit Bahnen gebunden)

$$W_r(\alpha) = 2 \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{2mE + \frac{2me^2}{r} - \frac{\alpha_\theta^2}{r^2}} dr = -2\pi \left(\alpha_\theta - \frac{me^2}{\sqrt{-2mE}} \right),$$

(verwende

$$2 \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{-A + 2\frac{B}{r} - \frac{C}{r^2}} dr = -2\pi \left(\sqrt{C} - \frac{B}{\sqrt{A}} \right)$$

für $A, B, C > 0$), und damit

$$n_r \hbar = -l \hbar + e^2 \sqrt{\frac{m}{-2E}}, \quad (n_r = 1, 2, \dots),$$

$$E_n = -\frac{me^4}{2n^2 \hbar^2}, \quad (n = n_r + l = 1, 2, \dots).$$

Dies stimmt mit (7.23) überein. Die Entartung ist nun

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad (7.33)$$

Die Entartungen sind Ausdruck von Symmetrien: der Rotationen (Drehimpulserhaltung) beim 2-Körper-Problem und, darüber hinaus beim Kepler-Problem, der Erhaltung des Laplace-Lenz-Vektors.

Auf Systeme, die nicht separabel sind (und dies ist der generische Fall), ist Sommerfelds Bedingung nicht anwendbar.

7.5 Emission und Absorption (Einstein 1917)

Einstein gibt eine neue Herleitung des Planckschen Gesetzes (7.15). Auch er bestimmt die spektrale Energiedichte des Strahlungsfelds über das Gleichgewicht mit der Materie, ohne allerdings weder (7.6) noch ein konkretes Modell der Materie, wie die Resonatoren, zu verwenden. Die Moleküle, die einfachheitshalber alle von derselben Sorte seien, haben diskrete Energien E_n , wobei Entartungen ($E_n = E_m$ für $n \neq m$) erlaubt sind. Jedes Molekül kann folgende Übergänge eingehen:

- **spontane Emission:** Übergang $n \rightarrow m$, ($E_n > E_m$) mit

$$\text{Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit: } A_{nm}. \quad (7.34)$$

- **induzierte Emission, bzw. Absorption** in Anwesenheit von Strahlung: Übergang $n \rightarrow m$, ($E_n > E_m$, bzw. $E_n < E_m$) mit

$$\text{Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit: } B_{nm} u(\omega_{nm}). \quad (7.35)$$

wobei $u(\omega)$ die spektrale Energiedichte ist und ω_{nm} eine durch n und m festgelegte Frequenz: $\omega_{nm} = \omega_{mn}$.

Im thermischen Gleichgewicht (Temperatur T) ist die mittlere Anzahl Moleküle im Zustand E_n

$$N_n = N \cdot \frac{e^{-E_n/kT}}{Z},$$

wobei N deren Gesamtzahl und $Z = \sum_n e^{-E_n/kT}$ die sogenannte Zustandssumme ist. Für die Zahl der Moleküle, die pro Zeiteinheit den Übergang $n \rightarrow m$ machen, setzt somit Einstein:

$$W_{nm} = \frac{N}{Z} e^{-E_n/kT} \cdot \begin{cases} B_{nm} u(\omega_{nm}) + A_{nm}, & (E_n > E_m), \\ B_{nm} u(\omega_{nm}), & (E_n < E_m). \end{cases}$$

Im Gleichgewicht ist $W_{nm} = W_{mn}$, also für $E_n > E_m$:

$$u(\omega_{nm}, T) = \frac{A_{nm}}{B_{nm}} \left(\frac{B_{mn}}{B_{nm}} e^{\frac{E_n - E_m}{kT}} - 1 \right)^{-1}, \quad (7.36)$$

mit expliziter T -Abhängigkeit der rechten Seite! Aus der Wienschen Strahlungsformel (7.14) *folgt* deshalb die Bohrsche Frequenzbedingung

$$E_n - E_m = \text{const} \cdot \omega_{nm} =: \hbar \omega_{nm}.$$

Weiter soll bei festen n, m für $T \rightarrow \infty$ das klassische Rayleigh-Jeans Gesetz (7.13) gelten. Dies verlangt zunächst $u \rightarrow \infty$ für $T \rightarrow \infty$, also

$$B_{mn} = B_{nm}, \quad (7.37)$$

und dann weiter

$$\frac{A_{nm}}{B_{nm}} \left(e^{\frac{E_n - E_m}{kT}} - 1 \right)^{-1} \rightarrow \frac{A_{nm}}{B_{nm}} \frac{kT}{\hbar \omega_{nm}} = \frac{\omega_{nm}^2}{\pi^2 c^3} kT.$$

Daraus folgt die Beziehung

$$\frac{A_{nm}}{B_{nm}} = \frac{\hbar \omega_{nm}^3}{\pi^2 c^3} \quad (7.38)$$

zwischen spontaner und induzierter Emission und (7.36) wird zum Planckschen Strahlungsgesetz (7.15) für $u(\omega_{nm}, T)$. Weil darin alle Moleküleigenschaften entfallen, muss es für beliebige Frequenzen ω gelten. Die Berechnung der molekularen Grössen E_n, A_{nm}, B_{nm} bleibt der späteren Quantenmechanik vorbehalten. Zum Vergleich mit ihr ist es zweckmässig, die Wahrscheinlichkeit (7.35) für induzierte Übergänge auf die mittlere Anzahl Lichtquanten $\bar{U}_\omega / \hbar \omega$ in einer Mode der Frequenz $\omega = \omega_{nm}$ zu beziehen, vgl. (7.7),

$$B_{nm} u(\omega_{nm}) = B_{nm} \frac{\hbar \omega_{nm}^3}{\pi^2 c^3} N_{\omega_{nm}} =: \tilde{B}_{nm} \cdot N_{\omega_{nm}}.$$

Dann vereinfacht sich (7.38) nämlich zu

$$A_{nm} = \tilde{B}_{nm}.$$

Bemerkenswert ist die Beschreibung (7.34) der spontanen Emission: Selbst im Vakuum ($u = 0$) gibt es für ein Molekül in einem **bestimmten** Quantenzustand nur eine **Wahrscheinlichkeitsaussage** für das zukünftige Verhalten. Dieser prinzipielle Verzicht auf eine (im klassischen Sinn) kausale Dynamik haftet der ganzen Quantentheorie an.

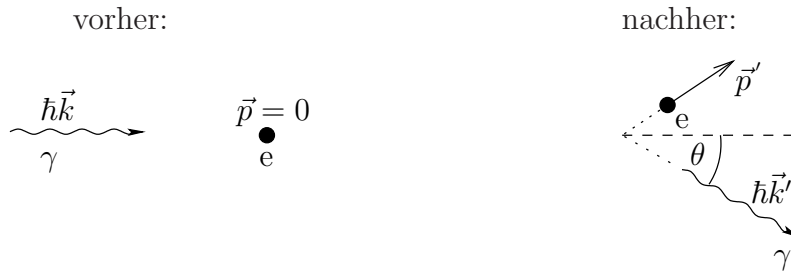
In derselben Arbeit erweitert Einstein seine Lichtquantenhypothese (7.20) zu einer relativistisch kovarianten Beziehung zwischen dem 4er-Impuls $(E/c, \vec{p})$ und dem 4er-Wellenvektor $(\omega/c, \vec{k})$,

$$\begin{pmatrix} E/c \\ \vec{p} \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} \omega/c \\ \vec{k} \end{pmatrix}, \quad \text{bzw.} \quad p^\mu = \hbar k^\mu, \quad (7.39)$$

und schliesst somit, dass ein Lichtquant auch einen Impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ mit $|\vec{k}| = \omega/c$ trägt.

7.6 Licht als Teilchen (Compton 1922)

Der direkte Nachweis der Wellen-Teilchen Dualität des Lichts lieferte Compton. Bei der Streuung von Röntgenstrahlen an (ruhenden) Elektronen ändert sich der Impuls der Lichtquanten (Teilcheneigenschaft) und wegen (7.39) die Wellenlänge λ der Strahlung (Welleneigenschaft):



Aus der Energie-Impuls Erhaltung

$$\hbar k^\mu + p^\mu = \hbar k'^\mu + p'^\mu$$

folgt

$$\lambda' - \lambda = \frac{4\pi\hbar}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2}. \quad (7.40)$$

Rechnung: Das Minkowski-Quadrat von $\hbar(k'^\mu - k^\mu) = p^\mu - p'^\mu$ ist $-\hbar^2 k^\mu k'_\mu = m^2 c^2 - p^\mu p'_\mu$ mit

$$k^\mu k'_\mu = |\vec{k}||\vec{k}'|(1 - \cos \theta) = 2|\vec{k}||\vec{k}'| \sin^2 \frac{\theta}{2},$$

$$p^\mu p'_\mu = mc \frac{E'}{c} = mc(mc + \hbar|\vec{k}| - \hbar|\vec{k}'|),$$

also

$$-2\hbar^2 |\vec{k}||\vec{k}'| \sin^2 \frac{\theta}{2} = mch(|\vec{k}'| - |\vec{k}|).$$

Mit $\lambda = 2\pi/|\vec{k}|$ folgt (7.40).

7.7 Teilchen als Welle (de Broglie 1923)

De Broglie überträgt die Wellen-Teilchen Dualität von Licht auf Materie: einem Teilchen mit Impuls p^μ ist eine Welle ("Materiewelle") zugeordnet mit Wellenvektor k^μ , wie in

(7.39). Aus $p^\mu p_\mu = (E/c)^2 - \vec{p}^2 = m^2 c^2$ folgt das Dispersionsgesetz dieser Wellen:

$$\omega(\vec{k}) = c \sqrt{\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 + \vec{k}^2}.$$

In nicht-relativistischer Näherung, wo

$$E(\vec{p}) = \underline{mc^2} + \frac{\vec{p}^2}{2m}, \quad (7.41)$$

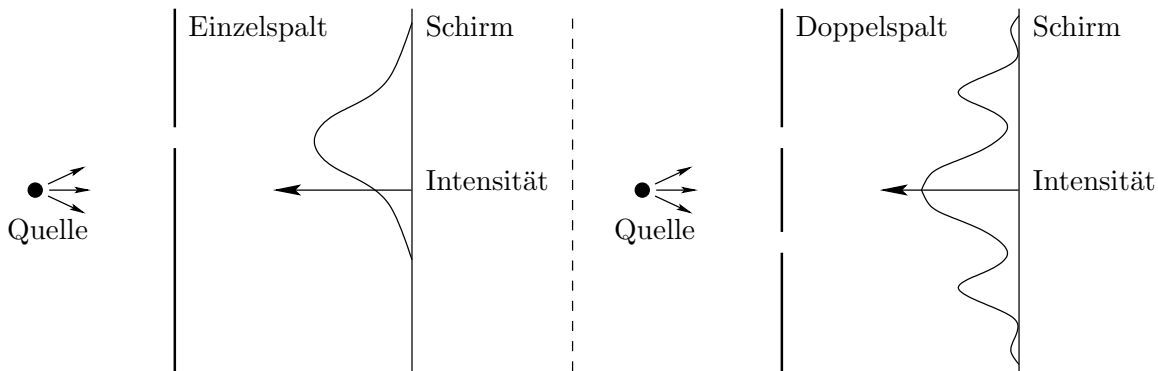
lautet es

$$\omega(\vec{k}) = \frac{mc^2}{\hbar} + \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}, \quad (7.42)$$

wobei die unterstrichenen Terme der Ruheenergie entsprechen. Nicht relativistisch betrachtet kann eine solche Konstante in der Energie $E(\vec{p})$ weggelassen werden und ebenso (siehe später) bei der Frequenz $\omega(\vec{k})$.

De Broglie vermutet, dass sich Beugungs- und Interferenzerscheinungen auch mit Teilchenstrahlen ergeben.

Beispiel. Doppelspaltexperiment



Die Intensität beim Doppelspalt ist nicht die Summe der Intensitäten von je einem offenen Spalt. Die Interferenz deutet darauf hin, dass hingegen Amplituden additiv sind. Das Experiment kann heute mit Elektronen, Neutronen, ja Fulleren-Molekülen C_{60} durchgeführt werden.

Weitere Entwicklungen, auf die wir hier nicht eingehen, waren das Ausschlussprinzip (Pauli, 1925), welches mit einem weiteren, 2-wertigen Freiheitsgrad im Zusammenhang steht (Pauli, 1924); letzterer wurde sodann als **Spin** des Elektrons gedeutet (Uhlenbeck, Goudsmit 1925).

Darauf folgte die moderne Form der Quantenmechanik in der Gestalt der Matrizenmechanik (Heisenberg, dann Born und Jordan, sowie Dirac, alle 1925) und der Wellenmechanik (Schrödinger 1926), auf die im nächsten Kapitel eingegangen wird.

8 Wellen- und Matrizenmechanik

8.1 Wellenmechanik und Schrödinger-Gleichung

Nach de Broglie, s. (7.39), ist einem Teilchen mit Impuls \vec{p} eine Welle (Zustand)

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{x}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}, \quad (\vec{p} = \hbar\vec{k}), \quad (8.1)$$

zugeordnet. Allgemeine Zustände ergeben sich durch Superposition

$$\psi(\vec{x}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar} \hat{\psi}(\vec{p}) d^3p. \quad (8.2)$$

Die Zeitentwicklung eines Zustands der Energie E ergibt sich durch Multiplikation mit

$$\cdot e^{-i\omega t}, \quad (E = \hbar\omega).$$

Für ein **freies Teilchen** ist $E = E(\vec{p})$ und damit

$$\psi(\vec{x}, t) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x} - E(\vec{p})t)/\hbar} \hat{\psi}(\vec{p}) d^3p.$$

Die Bewegung des Zustands erfüllt

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x} - E(\vec{p})t)/\hbar} E(\vec{p}) \hat{\psi}(\vec{p}) d^3p$$

und, falls das Teilchen **nicht-relativistisch** (7.41) ist,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi.$$

Anders gesagt: Dies erhält man aus (7.42) durch die Substitution

$$\omega \rightarrow i \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{k} \rightarrow -i \vec{\nabla} \quad (8.3)$$

und Anwendung auf $\psi(\vec{x}, t)$. (Für ebene Wellen $e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \omega t)}$ liefern ja die rechten Seiten (8.3) die linken.)

Für ein **nicht freies** Teilchen mit klassischer Hamiltonfunktion

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$$

liefert (8.3) die **Schrödinger-Gleichung**

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right) \psi. \quad (8.4)$$

Damit ist H auch quantenmechanisch die Erzeugende der Zeitentwicklung. Für Wellen fester Frequenz,

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}) e^{-iEt/\hbar},$$

lautet (8.4)

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(\vec{x}))\psi = 0 . \quad (8.5)$$

Schrödinger (1926) erhielt diese zeitunabhängige Gleichung als wellenoptische Verallgemeinerung der Hamilton-Jacobi Gleichung. Hier soll sein Weg skizziert werden: In der skalaren Wellenoptik ist eine Licht**welle** fester Frequenz $\psi(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x})e^{-i\omega t}$ eine Lösung der Gleichung (mit Wellenzahl $k(\vec{x}) = \omega n(\vec{x})/c$ und Brechungsindex $n(\vec{x})$)

$$\Delta\psi + k^2\psi = 0 . \quad (8.6)$$

Sie kann unter Umständen (siehe unten) ein Bündel von Licht**strahlen** beschreiben über die Zerlegung

$$\psi(\vec{x}) = A(\vec{x})e^{iS(\vec{x})}$$

in Amplitude $A(\vec{x})$ und Phase $S(\vec{x})$ (beide reell), und zwar als Schar der Orthogonaltrajektorien $\vec{x}(s)$ (s : Bogenlänge) der Flächen konstanter Phase:

$$\frac{d\vec{x}}{ds} = \frac{\vec{\nabla}S}{|\vec{\nabla}S|} . \quad (8.7)$$

Mit

$$\vec{\nabla}(Ae^{iS}) = (\vec{\nabla}A + iA\vec{\nabla}S)e^{iS} ,$$

$$\Delta(Ae^{iS}) = \text{div } \vec{\nabla}(Ae^{iS}) = (\Delta A + iA\Delta S + 2i\vec{\nabla}A \cdot \vec{\nabla}S - A(\vec{\nabla}S)^2)e^{iS}$$

besagt (8.6) nach Trennung von Real- und Imaginärteil

$$\Delta A - A(\vec{\nabla}S)^2 + Ak^2 = 0 , \quad (8.8)$$

$$A\Delta S + 2\vec{\nabla}A \cdot \vec{\nabla}S = 0 . \quad (8.9)$$

Die Strahlenoptik ist eine gute Näherung in Gebieten, wo die Amplitude $A(\vec{x})$ wenig variiert über eine Wellenlänge $2\pi/k$, oder genauer, wo

$$\left| \frac{\Delta A}{A} \right| \ll k^2 . \quad (8.10)$$

Dort wird (8.8) zu

$$(\vec{\nabla}S)^2 = k^2 \quad (8.11)$$

und (8.7) zu

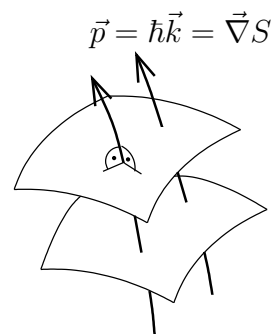
$$\vec{k} \equiv k \frac{d\vec{x}}{ds} = \vec{\nabla}S . \quad (8.12)$$

Die Gleichung $\vec{p} = \vec{\nabla}S$, wodurch in der Hamiltonschen Mechanik die Wirkung S ein Bündel von Bahnen beschreibt, steht über $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ in Übereinstimmung mit (8.12), falls S/\hbar als Phase einer Lösung von (8.5) angesetzt wird. Dann wird (8.11) zu

$$\left(\frac{\vec{\nabla}S}{\hbar} \right)^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(\vec{x})) ,$$

also zur HJ-Gleichung

$$\frac{(\vec{\nabla}S)^2}{2m} + V(\vec{x}) = E .$$



Schrödinger vollzieht den Übergang von der Mechanik zur Wellenmechanik auch für Hamiltonsche Systeme des Typs

$$H = \frac{1}{2} g^{\alpha\beta}(q) p_\alpha p_\beta + V(q) .$$

Wir formulieren die Schrödinger Gleichung aber nur für N -Teilchensysteme

$$H = \sum_{k=1}^N \frac{\vec{p}_k^2}{2m_k} + V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) :$$

Die Wellenfunktion $\psi = \psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, t)$ erfüllt

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\sum_{k=1}^N -\frac{\hbar^2 \Delta_k}{2m_k} + V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \right) \psi , \quad (8.13)$$

wobei Δ_k der gewöhnliche Laplace-Operator im \mathbb{R}^3 ist, der nur auf die Variable \vec{x}_k wirkt. Wichtig ist, dass die **Wellenfunktion** $\psi(q)$ auf dem **Konfigurationsraum** des klassischen System lebt, hier dem \mathbb{R}^{3N} . Nur im Fall eines Teilchens kann dieser mit dem physikalischen \mathbb{R}^3 identifiziert werden. Die Auffassung der Materiewelle als einer Welle im Raum ist somit nicht haltbar.

Unter (8.4) verhalten sich die Grössen

$$\rho(\vec{x}, t) = |\psi|^2 = A^2 , \quad (8.14)$$

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \bar{\psi} \vec{\nabla} \psi = \frac{A^2}{m} \vec{\nabla} S \quad (8.15)$$

wie eine Dichte, bzw. eine Stromdichte, insofern die **Kontinuitätsgleichung**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0 \quad (8.16)$$

gilt (Nachrechnen; oder: Im zeitabhängigen Fall (8.4) erhält man statt (8.9)

$$A \Delta S + 2 \vec{\nabla} A \cdot \vec{\nabla} S = -2m \frac{\partial A}{\partial t} ,$$

nach Multiplikation mit A also $\text{div}(A^2 \vec{\nabla} S) = -m \partial A^2 / \partial t$, d.h. (8.16)). In integrierter Form:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho d^3 x = - \int_{\partial \Omega} \vec{j} \cdot d\vec{\sigma} , \quad (\Omega \subset \mathbb{R}^3) .$$

Insbesondere ist $\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3 x$ konstant in t (falls ψ für $|\vec{x}| \rightarrow \infty$ abfällt).

Eine Energieverschiebung $V(\vec{x}) \rightarrow V(\vec{x}) + E_0$ ändert zwar die Frequenz der Lösung, vgl. (7.42), gemäss $\psi(\vec{x}, t) \rightarrow \psi(\vec{x}, t) e^{-iE_0 t/\hbar}$, bzw. $A \rightarrow A$, $S \rightarrow S - E_0 t$, was aber ohne Einfluss auf (8.14, 8.15) bleibt.

Die **Deutung** der Zustände $\psi(\vec{x})$ ist **statistisch** (Born 1926): Man normiere ψ so, dass

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{x})|^2 d^3 x = 1 . \quad (8.17)$$

Dann ist ρ eine Wahrscheinlichkeitsdichte, d.h.

$$\int_{\Omega} |\psi(\vec{x})|^2 d^3x$$

ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich das Teilchen in $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ befindet. Ebenso, in Bezug auf (8.13), $|\psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, t)|^2 d^3x_1 \dots d^3x_N$ die, die N Teilchen der Reihe nach in d^3x_1, \dots, d^3x_N um $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N$ zu finden.

8.2 Matrizenmechanik und Heisenberg-Gleichung

Nach Sommerfeld, s. (7.27), genügt das mechanische System mit einem Freiheitsgrad

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

der Quantisierungsbedingung: Eine gebundene Bahn der Energie E ist quantentheoretisch zulässig, falls

$$n(E) := \frac{1}{2\pi\hbar} \oint p dx$$

eine ganze Zahl ($n = 0, 1, 2, \dots$) ist. Vorderhand betrachten wir beliebige Bahnen; sie entsprechen reellen $n \geq 0$. Es ist

$$n(E) = \frac{2}{2\pi\hbar} \int_{a_-}^{a_+} \sqrt{2m(E - V(x))} dx ,$$

wobei $a_{\pm} = a_{\pm}(E)$ die Umkehrpunkte der Bahn sind. Die Periode ist, mit $\dot{x} = dx/dt$,

$$T(E) = \oint dt = 2 \int_{a_-}^{a_+} \frac{dx}{\dot{x}} = 2 \int_{a_-}^{a_+} \frac{dx}{\sqrt{2(E - V(x))/m}} = 2\pi\hbar \frac{dn}{dE} ,$$

die Frequenz $\omega = 2\pi/T$ also

$$\omega(n) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dn} .$$

Funktionen $a(p, x)$ (Observablen) weisen längs der Bahn, $a(t) = a(p(t), x(t))$, diese Periode auf und sind folglich Fourierreihen der Form

$$a(t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A_m(n) e^{im\omega(n)t} , \quad (8.18)$$

wobei

$$A_{-m}(n) = \overline{A_m(n)} , \quad (8.19)$$

falls a reell ist. Ebenso

$$\dot{a}(t) = i\omega(n) \sum_{m=-\infty}^{\infty} mA_m(n) e^{im\omega(n)t} . \quad (8.20)$$

Observablen können multipliziert werden, $c(p, q) = a(p, q)b(p, q)$, bzw. $c(t) = a(t)b(t)$. Gruppiert man im Produkt die Terme nach ihrer Frequenz, so resultiert die Faltung

$$C_m(n) = \sum_{m'} A_{m-m'}(n) B_{m'}(n) . \quad (8.21)$$

Insbesondere gilt (8.18) für das Dipolmoment $d(t) = ex(t)$, welches in drei Dimensionen die Ausstrahlung

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \frac{1}{r^3 c^2} (\vec{r} \wedge (\vec{r} \wedge \ddot{\vec{d}}))$$

($r \gg \lambda \gg |\vec{x}|$) bestimmt (vgl. Elektrodynamik): Klassisch strahlt das System in der Bahn $n \in \mathbb{R}$ mit der Frequenz $\omega(n)$ und ihren Oberschwingungen $m\omega(n)$; quantenmechanisch ($n \in \mathbb{N}$) gemäss der Bohrschen Frequenzbedingung für den Übergang $n \rightarrow n - m$:

$$\begin{array}{ccc} \text{klassisch} & \rightarrow & \text{quantenmechanisch} \\ m\omega(n) = m \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dn} & \rightarrow & \omega_{n,n-m} = \frac{E(n) - E(n-m)}{\hbar} . \end{array} \quad (8.22)$$

Für grosse n , wo $d^2 E/dn^2 \ll dE/dn$, sind die beiden Ausdrücke annähernd gleich, was das Korrespondenzprinzip auf S. 58 bekräftigt.

Die Quantisierung des klassischen Systems erfordert nach Heisenberg nicht bloss, dass in (8.18) die Frequenzen gemäss (8.22) ersetzt werden, sondern ebenso

$$A_m(n) \rightarrow A_{n,n-m} : \quad (8.23)$$

was für die Phasen recht ist, kann für die Amplituden nur billig sein. Insgesamt

$$A_m(n) e^{im\omega(n)t} \rightarrow A_{n,n-m} e^{i\omega_{n,n-m}t} .$$

Links stehen lauter Eigenschaften der selben Bahn n , unabhängig von $m \in \mathbb{Z}$; rechts Eigenschaften verschiedener Paare von Zuständen $(n, n - m)$. So ist links die Summe (8.18) sinnvoll; nicht aber rechts, sozusagen gemäss dem Verbot, Äpfel und Birnen zu addieren (Heisenberg: “nicht ohne Willkür möglich und deshalb nicht sinnvoll”). Es ist somit die Gesamtheit

$$A = (A_{nn'} e^{i\omega_{nn'}t})_{nn'}$$

als Matrix aufzufassen. Wodurch ist das Produkt (8.21) zu ersetzen? Nach dem Ritzschen Kombinationsprinzip ist

$$\omega_{nn'} + \omega_{n'n''} = \omega_{nn''} \quad (8.24)$$

und damit $e^{i\omega_{nn'}t} e^{i\omega_{n'n''}t} = e^{i\omega_{nn''}t}$. Im Matrixprodukt $C = AB$, d.h.

$$C_{nn''} e^{i\omega_{nn''}t} = \sum_{n'} A_{nn'} e^{i\omega_{nn'}t} B_{n'n''} e^{i\omega_{n'n''}t} ,$$

kommt (8.24) zum Tragen (“ergibt sich diese Art der Zusammensetzung nahezu zwangsläufig aus der Kombinationsrelation der Frequenzen”).

Im Übrigen ist die Vorschrift (8.22) nicht eindeutig, denn auf $-m$ angewandt ergibt sie

$$m\omega(n) \rightarrow -\omega_{n,n+m} = \omega_{n+m,n} \neq \omega_{n,n-m} .$$

Der Unterschied ist aber $\hbar^{-1} O(d^2 E/dn^2)$ und damit von der selben Ungenauigkeit wie die Näherung, die der Vorschrift (8.22) zugrundeliegt. Folglich ist auch

$$A_m(n) \rightarrow A_{n+m,n}$$

ebenso passend wie (8.23). Die Anwendung beider Regeln auf die Reellitätsbedingung (8.19) liefert eine Gleichung, in der beidseits dasselbe Zustandspaar vorkommt, und zwar

$$A_{n-m,n} = \overline{A_{n,n-m}}, \quad \text{d.h. } A = A^* .$$

Die Energie H nimmt unter den Observablen eine Sonderstellung ein, da erhalten. Ihre Fourierentwicklung ist somit $H_m(n) = \delta_{m0}E(n)$ und quantenmechanisch entspricht ihr nach (8.23) die Diagonalmatrix

$$H_{nn'} = E(n)\delta_{nn'} . \quad (8.25)$$

Damit ist

$$A(t)_{nn'} \equiv A_{nn'}e^{i\omega_{nn'}t} = e^{iE(n)t/\hbar}A_{nn'}e^{-iE(n')t/\hbar} = (e^{iHt/\hbar}Ae^{-iHt/\hbar})_{nn'} ,$$

kurz

$$A(t) = e^{iHt/\hbar}Ae^{-iHt/\hbar} . \quad (8.26)$$

Es folgt $\dot{A}(t) = (i/\hbar)e^{iHt/\hbar}(HA - AH)e^{-iHt/\hbar}$ und somit die **Heisenberg-Gleichung**: die Bewegungsgleichung

$$\dot{A}(t) = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)] \quad (8.27)$$

einer beliebigen Observablen $A(t)$.

Insbesondere gilt dies für den Ort $X(t)$ und den Impuls $P(t)$, die anstelle der Bahn $(p(t), x(t))$ treten:

$$\dot{X} = \frac{i}{\hbar}[H, X], \quad \dot{P} = \frac{i}{\hbar}[H, P] . \quad (8.28)$$

Nun gilt es die Nabelschnur zur "halbklassischen" Quantentheorie Sommerfelds zu kappen: wo in (8.25) H noch über $E(n)$ durch die Quantisierungsbedingung (7.29) bestimmt ist, soll neu die Energie durch

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X) \quad (8.29)$$

gegeben sein, wobei $P^2 = P \cdot P$ und $V(X)$ (z.B. für $V(x) = \alpha x^2 + \beta x^3$) als Matrixprodukte zu verstehen sind. Die Berechnung der Kommutatoren in (8.28) verlangt schlussendlich nach jener von $(i/\hbar)[P, X]$.

Letztere wird durch Heisenberg, Born und Jordan wie folgt mit (7.29) in Verbindung gebracht. Klassisch ist nach (8.18) $\oint a(t)dt = (2\pi/\omega(n))A_0(n)$, also nach (8.20, 8.21)

$$n = \frac{1}{2\pi\hbar} \oint p dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \oint p \dot{x} dt = \frac{i}{\hbar} \sum_{m=-\infty}^{\infty} m P_{-m}(n) X_m(n) .$$

Ableitung nach n liefert

$$1 = \frac{i}{\hbar} \sum_{m=-\infty}^{\infty} m \frac{d}{dn} P_{-m}(n) X_m(n) .$$

Das Korrespondenzprinzip verlangt $X_m(n) \rightarrow X_{n+m,n}$, $P_{-m}(n) \rightarrow P_{n,n+m}$; durch Erweiterung von (8.22) auf $E(n) \rightsquigarrow P_{n,n+m}X_{n+m,n}$ verwandelt es den Ausdruck in

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{i}{\hbar} \sum_m (P_{n,n+m}X_{n+m,n} - P_{n-m,n}X_{n,n-m}) \\ &= \frac{i}{\hbar} ((PX)_{nn} - (XP)_{nn}) = \frac{i}{\hbar} [P, X]_{nn} . \end{aligned}$$

Die Diagonalelemente von $D = (i/\hbar)[P, X]$ sind damit bestimmt. Insbesondere folgt, dass die Matrizen P, X nicht von endlicher Ordnung N sein können, denn die Summe über n würde $N = (i/\hbar)\text{tr}[P, X] = 0$ liefern. Die Bestimmung von $D_{nn'}$, ($n \neq n'$) erfordert eine zusätzliche Annahme: Die Ähnlichkeit (Dirac) von $(i/\hbar)[P, X]$ zur klassischen Poissonklammer $\{p, x\}$ und deren Unabhängigkeit von der Zeit, $\{p(t), x(t)\} = 1$, verleiten zu $\dot{D} = 0$. Aus (8.27), also $\dot{D} = (i/\hbar)[H, D]$, d.h. $\dot{D}_{nn'} = (i/\hbar)(E(n) - E(n'))D_{nn'}$, folgt so $D_{nn'} = 0$, ($n \neq n'$), da $E(n) \neq E(n')$. Insgesamt ist

$$\frac{i}{\hbar} [P, X] = 1 . \quad (8.30)$$

Als Folge davon gilt (s. Übungen)

$$\frac{i}{\hbar} [P, f(X)] = f'(X) , \quad \frac{i}{\hbar} [g(P), X] = g'(P)$$

und die Bewegungsgleichungen (8.28)

$$\dot{P} = -V'(X) , \quad \dot{X} = \frac{P}{m}$$

sind formal identisch mit den kanonischen Bewegungsgleichungen der klassischen Mechanik.

9 Die allgemeine Form der Quantenmechanik

9.1 Darstellung im Hilbertraum

Wir fassen die Wellenfunktion $\psi(\vec{x})$ eines Teilchens (zu fester Zeit) auf als ein **Vektor** $|\psi\rangle$ im Hilbertraum $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ der quadratintegrierbaren Funktionen mit dem Skalarprodukt

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi}(x)\phi(x) d^3x . \quad (9.1)$$

Er soll (8.17) entsprechend normiert sein. Allgemeiner sind Zustände eines quantenmechanischen Systems Vektoren ψ eines Hilbertraums \mathcal{H} über \mathbb{C} mit Skalarprodukt $\langle\psi|\phi\rangle$: Sie sind stets normiert, d.h.

$$\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = 1 , \quad (9.2)$$

und stellen bis auf die Äquivalenz

$$|\psi\rangle \sim e^{i\alpha}|\psi\rangle , \quad (\alpha \in \mathbb{R}) \quad (9.3)$$

die **Zustände** des Systems dar.

Observablen und Dynamik sind in der Quantenmechanik durch **Operatoren** dargestellt, d.h. (etwas ungenau) durch lineare Abbildungen $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Man schreibt

$$\langle\phi|A|\psi\rangle := \langle\phi|A\psi\rangle .$$

Der zu A **adjungierte Operator** $A^* : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ist durch

$$\langle\phi|A^*\psi\rangle := \langle A\phi|\psi\rangle , \quad (|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}) \quad (9.4)$$

erklärt. Den **Observablen** entsprechen **selbstadjungierte** Operatoren, $A^* = A$. Wir illustrieren den Begriff und die Zuordnung anhand eines Beispiels: ein Teilchen in einer Dimension, also $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$. Das Ereignis P , das Teilchen in $\Omega \subset \mathbb{R}$ zu finden (ja: $P = 1$, nein: $P = 0$) ist durch den orthogonalen Projektor $P : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, ($P = P^2 = P^*$),

$$(P\psi)(x) = P_\Omega(x)\psi(x) , \quad (9.5)$$

(P_Ω : charakteristische Funktion von Ω) gegeben, insofern

•

$$\langle\psi|P|\psi\rangle = \int \bar{\psi}(x)P_\Omega(x)\psi(x)dx = \int_\Omega |\psi(x)|^2 dx$$

die **Wahrscheinlichkeit** des Ereignisses ist;

- Die **Eigenwerte** von P , d.h. $\lambda = 0, 1$, die möglichen **Ergebnisse** der Messung sind.
- Für die entsprechenden **Eigenvektoren**, $P|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$, das Ergebnis **deterministisch** ausfällt: $\langle\psi|P|\psi\rangle = 0$ oder 1 .

Das Ergebnis der Messung einer physikalischen Grösse (Observable) ist i.A. nicht auf 1, 0 eingeschränkt, z.B. des Orts $x \in \mathbb{R}$ des Teilchens. Damit verbunden ist der **Ortsoperator** $x : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, ($x = x^*$)

$$x : \psi(x) \mapsto x\psi(x)$$

(Multiplikation mit x), im Sinne, dass

$$\langle x \rangle_\psi := \langle \psi | x | \psi \rangle = \int x |\psi(x)|^2 dx \quad (9.6)$$

der **Erwartungswert** der Messung ist.

Für einen allfälligen Eigenvektor $|\psi\rangle$,

$$x\psi(x) = \lambda\psi(x) , \quad (9.7)$$

gilt $\psi(x) = 0$, ($x \neq \lambda$), also $|\psi\rangle = 0$ im Sinne von $\psi \in L^2(\mathbb{R})$. Formal hat (9.7) die Lösung $\psi(x) = \delta(x - \lambda)$, aber $\psi \notin L^2(\mathbb{R})$. Bezeichnet man diesen **uneigentlichen Zustand** zum Eigenwert $\lambda = x$ mit $|x\rangle$, so ist

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

und, vgl. (9.5), $\langle \phi | P | \psi \rangle = \int_\Omega \bar{\phi}(x) \psi(x) dx = \int_\Omega \langle \phi | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx$, also formal

$$P = \int_\Omega dx |x\rangle \langle x| . \quad (9.8)$$

Insbesondere ist

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x') , \quad \int dx |x\rangle \langle x| = \mathbb{1} ,$$

womit die $\{|x\rangle\}$ eine uneigentliche Orthonormalbasis bilden (Dirac- statt Kronecker- δ , Integral statt Summe).

Das **Schwankungsquadrat** der Messung,

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle_\psi := \int (x - \langle x \rangle_\psi)^2 |\psi(x)|^2 dx = \|(x - \langle x \rangle_\psi)\psi\|^2 > 0 ,$$

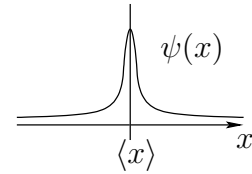
ist zwar stets positiv, da x keine Eigenvektoren hat, kann aber durch passende Wahl von $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ beliebig klein gemacht werden. Dies motiviert die auf $\dim \mathcal{H} = \infty$ zugeschnittene **Definition:**

Das **Spektrum** $\sigma(A)$ eines selbstadjungierten Operators $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ist erklärt durch:

$$\lambda \in \sigma(A) : \iff \text{zu jedem } \varepsilon > 0 \text{ existiert ein Zustand } \psi_\varepsilon, (\|\psi_\varepsilon\| = 1) \text{ so, dass} \\ \|(A - \lambda)\psi_\varepsilon\| \leq \varepsilon . \quad (9.9)$$

Bemerkungen. 1. Ein Eigenwert λ liegt vor, falls (9.9) mit $\varepsilon = 0$ gilt; folglich liegt er in $\sigma(A)$. Ferner ist $\lambda \in \mathbb{R}$, da $\bar{\lambda} \langle \psi | \psi \rangle = \langle A\psi | \psi \rangle = \langle \psi | A\psi \rangle = \lambda \langle \psi | \psi \rangle$ wegen $A = A^*$. Es gilt aber auch $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ (s. Anhang A).

2. Im **endlich-dimensionalen** Fall, $\dim \mathcal{H} < \infty$, ist die Einheitskugel $\{\psi \in \mathcal{H} | \|\psi\| = 1\}$ kompakt, also folgt aus (9.9): $\|(A - \lambda)\psi\| = 0$ für ein $\psi \in \mathcal{H}$ mit $\|\psi\| = 1$. Also: $\sigma(A) = \{\text{Eigenwerte von } A\}$.



Für den Ortsoperator ist also $\sigma(x) = \mathbb{R}$:

- Das Spektrum von x besteht aus den möglichen Ergebnisse seiner Messung.

Analog für den **Impulsoperator**. Die (uneigentlichen) Eigenzustände sind nach (8.1)

$$\psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}$$

mit Eigenwert p , aber $\psi_p \notin L^2(\mathbb{R})$. Notation: $|p\rangle$. Für (8.2) ist

$$(p\psi)(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int p e^{ipx/\hbar} \widehat{\psi}(p) dp = \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dx}. \quad (9.10)$$

Der Operator

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad (9.11)$$

ist ebenfalls selbstadjungiert (partielle Integration) und (9.10) besagt

$$p = \mathcal{F}^{-1} x \mathcal{F}, \quad (9.12)$$

wobei $\mathcal{F} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$

$$(\mathcal{F}\psi)(p) \equiv \widehat{\psi}(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx = \langle p | \psi \rangle$$

die Fouriertransformation ist. \mathcal{F} ist **unitär**, $\mathcal{F}^{-1} = \mathcal{F}^*$ (Parseval Identität). Folglich ist auch $\sigma(p) = \mathbb{R}$ und die Zustände $|p\rangle$ mit Wellenfunktion ψ_p bilden eine uneigentliche Orthonormalbasis,

$$\langle p | p' \rangle = \delta(p - p'), \quad \int dp |p\rangle \langle p| = \mathbf{1},$$

Eine allgemeinere, präzise Definition eines uneigentlichen Zustandes wird sich dank des Spektralsatzes erübrigen. Trotzdem sei bemerkt: Man könnte vermuten, dass ψ_p auch für $p \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ als einen solchen zugelassen werden sollte, da ja nach wie vor $-i\hbar\psi'_p = p\psi_p$, obschon $\psi_p(x)$ nun exponentiell wachsend statt beschränkt ist. Dem ist nicht so, denn nur für $p_0 \in \mathbb{R}$ stellt ψ_{p_0} eine vernünftige Idealisierung von Zuständen $\psi_n \in L^2(\mathbb{R})$ dar: " $\psi_n \rightarrow \psi_{p_0}$ " mit $\|\psi_n\|^{-1} \|(p - p_0)\psi_n\| \rightarrow 0$, ($n \rightarrow \infty$).

Die Verallgemeinerung der Wahrscheinlichkeitsinterpretation auf beliebige Observablen beruht auf dem Spektralsatz, den wir zunächst im Fall eines endlich-dimensionalen Zustandsraums \mathcal{H} in Erinnerung rufen: Selbstadjungierte Operatoren besitzen eine orthonormierte Eigenbasis $\{\phi_i\}$,

$$A|\phi_i\rangle = a_i|\phi_i\rangle, \\ \langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}, \quad \sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = \mathbf{1},$$

und damit die Spektraldarstellung

$$A = \sum_i a_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = \sum_{a \in \sigma(A)} a P_a,$$

wobei $P_a = \sum_{i:\alpha_i=a} |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = P_a^* = P_a^2$ der Projektor auf den Eigenraum zum Eigenwert a ist. Sie ermöglicht, Funktionen von Operatoren zu definieren,

$$f(A) := \sum_{a \in \sigma(A)} f(a) P_a, \quad (9.13)$$

wobei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ eine Funktion und $f(A) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ ein Operator ist. Die Zuordnung $f \mapsto f(A)$ hat die Eigenschaften

$$(\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2)(A) = \alpha_1 f_1(A) + \alpha_2 f_2(A), \quad (\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}), \quad (9.14)$$

$$(f_1 f_2)(A) = f_1(A) f_2(A), \quad (9.15)$$

$$\bar{f}(A) = f(A)^*, \quad (9.16)$$

$$f(A) = \begin{cases} \mathbf{1} & \text{für } f(a) \equiv 1, \\ A & \text{für } f(a) = a, \end{cases} \quad (9.17)$$

sowie Stetigkeit bzgl. f , auf die wir nicht näher eingehen.

Die Definition (9.13) besitzt eine Verallgemeinerung auf $\dim \mathcal{H} = \infty$, und zwar den **Spektralsatz**:

Satz. Sei $A = A^*$. Dann gibt es eine eindeutige Zuordnung

$$f \mapsto f(A) \quad (9.18)$$

mit den Eigenschaften (9.14–9.17).

Beweis. s. Anhang A.

Sei nun $I \subset \mathbb{R}$ ein Intervall und $P_I(a)$ dessen charakteristische Funktion. Dann ist $P_I(A)$ ein orthogonaler Projektor,

$$P_I(A) = P_I(A)^* = P_I(A)^2$$

(folgt aus (9.15, 9.16)), und für disjunkte Intervalle I_1, I_2 gilt

$$P_{I_1 \cup I_2}(A) = P_{I_1}(A) + P_{I_2}(A)$$

(folgt aus (9.14)). Für jeden Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ist

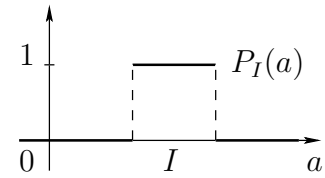
$$W_\psi(I) = \langle\psi|P_I(A)|\psi\rangle$$

ein **Wahrscheinlichkeitsmass** auf \mathbb{R} :

$$\begin{aligned} W_\psi(I) &= \|P_I(A)\psi\|^2 \geq 0 \\ W_\psi(I_1 \cup I_2) &= W_\psi(I_1) + W_\psi(I_2), \quad (I_1 \cap I_2 = \emptyset), \\ W_\psi(\mathbb{R}) &= 1. \end{aligned}$$

Interpretation. $W_\psi(I)$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass A im Zustand $|\psi\rangle$ einen Messwert $a \in I$ annimmt. (Dies ist konsistent mit (9.3).)

Insbesondere, wenn A selbst durch einen orthogonalen Projektor P gegeben ist, so ist $\langle\psi|P|\psi\rangle$ die Wahrscheinlichkeit im Zustand $|\psi\rangle$ für das Eintreten des Ereignisses, dem P zugeordnet ist. Dieses ist sicher, genau dann falls $P|\psi\rangle = |\psi\rangle$.



Beispiel. Der Projektor $P = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ hat den einfachen Eigenwert 1 mit Eigenvektor $|\varphi\rangle$ und ist somit dem Ereignis “das System ist im Zustand $|\varphi\rangle$ ” zugeordnet, denn genau in diesem Zustand ist sein Eintreten sicher. Für einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle$ ist

$$\langle\psi|P|\psi\rangle = |\langle\varphi|\psi\rangle|^2 \quad (9.19)$$

die Wahrscheinlichkeit, es in $|\varphi\rangle$ zu finden.

Für beliebige Observablen A ergeben sich aus obiger Interpretation einige Folgerungen:

Erwartungswert. Die Wahrscheinlichkeit eines Messwerts in $(\lambda, \lambda + d\lambda]$ ist $dW_\psi((-\infty, \lambda])$. Der Erwartungswert von A im Zustand ψ folglich

$$\langle A \rangle_\psi = \int \lambda dW_\psi((-\infty, \lambda]) = \langle\psi|A|\psi\rangle, \quad (9.20)$$

da $\int \lambda dP_{(-\infty, \lambda]}(x) = x$, vgl. (9.14, 9.17).

Beispiel. Für den Ortsoperator x ist $f(x)$ Multiplikation mit der Funktion $f(x)$; somit ist $P_\Omega(x)$ identisch mit (9.5, 9.8). Für den Impulsoperator p ist nach (9.12)

$$f(p) = \mathcal{F}^{-1}f(x)\mathcal{F}, \quad \text{d.h.} \quad \widehat{f(p)\psi}(p) = f(p)\widehat{\psi}(p),$$

bzw.

$$(f(p)\psi)(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int f(p)e^{ipx/\hbar}\widehat{\psi}(p)dp. \quad (9.21)$$

Das Ereignis, dass der Messwert des Impuls p in I liegt, hat die Wahrscheinlichkeit

$$\langle\psi|P_I(p)|\psi\rangle = \int_I |\widehat{\psi}(p)|^2 dp.$$

Messwerte. Allgemein sind nun $\lambda \in \sigma(A)$ die möglichen Messwerte der Observablen A :

$$\begin{aligned} \lambda \in \sigma(A) &\iff P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(A) \neq 0, \quad \forall \varepsilon > 0, \\ \text{also:} &\iff \forall \varepsilon \exists \psi_\varepsilon (\|\psi_\varepsilon\| = 1) \text{ mit } W_{\psi_\varepsilon}(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon) > 0. \end{aligned} \quad (9.22)$$

Zum Beweis bemerken wir zunächst, dass

$$f \geq g \implies f(A) \geq g(A).$$

Dies folgt aus dem Spezialfall $g = 0$ (also $f = (\sqrt{f})^2 \geq 0$), der seinerseits aus

$$\langle\psi|f(A)|\psi\rangle = \langle\psi|f^{1/2}(A)f^{1/2}(A)|\psi\rangle = \langle f^{1/2}(A)\psi|f^{1/2}(A)\psi\rangle \geq 0$$

folgt.

\Leftarrow : Dann gibt es einen Zustand $|\psi_\varepsilon\rangle$ mit $P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(A)|\psi_\varepsilon\rangle = |\psi_\varepsilon\rangle$. Aus $(x-\lambda)^2 P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(x) \leq \varepsilon^2$ folgt

$$\|(A-\lambda)\psi_\varepsilon\|^2 = \langle\psi_\varepsilon|(A-\lambda)^2|\psi_\varepsilon\rangle \leq \varepsilon^2 \langle\psi_\varepsilon|\psi_\varepsilon\rangle,$$

also $\lambda \in \sigma(A)$ nach (9.9).

\Rightarrow : Aus $P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(A) = 0$ für ein $\varepsilon > 0$ folgt $|\psi\rangle = (1 - P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(A))|\psi\rangle$ für alle $|\psi\rangle$. Wegen $(x-\lambda)^2(1 - P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(x)) \geq \varepsilon^2(1 - P_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(x))$ folgt nun

$$\|(A-\lambda)\psi\|^2 \geq \varepsilon^2 \|\psi\|^2$$

für alle $|\psi\rangle$, also $\lambda \notin \sigma(A)$.

Schwankungsquadrat und Unschärferelation. Das mittlere Schwankungsquadrat einer Observablen A im Zustand ψ ist gegeben als

$$\langle(\Delta A)^2\rangle_\psi := \langle(A - \langle A \rangle_\psi)^2\rangle_\psi = \|(A - \langle A \rangle_\psi)\psi\|^2 = \langle A^2 \rangle_\psi - \langle A \rangle_\psi^2.$$

Somit ist

$$\langle(\Delta A)^2\rangle_\psi = 0 \iff A\psi = \lambda\psi : \quad (9.23)$$

Die Eigenzustände von A sind gerade diejenigen Zustände, in denen A mit Sicherheit (Schwankung Null) einen bestimmten Wert annimmt, nämlich den entsprechenden Eigenwert.

Zwei Observablen A, B haben in der Regel keinen gemeinsamen Eigenvektor, d.h. es gibt keinen Zustand des Systems, in dem A und B scharfe Werte annehmen. Ein quantitativer Ausdruck hierfür ist die Unschärferelation (Heisenberg 1925):

$$\langle(\Delta A)^2\rangle_\psi \langle(\Delta B)^2\rangle_\psi \geq \frac{1}{4} |\langle[A, B]\rangle_\psi|^2. \quad (9.24)$$

Beweis. Aus $|\langle\phi|\psi\rangle| \leq \|\phi\|\|\psi\|$ folgt

$$|\langle\psi|[A, B]\psi\rangle| = |\langle A\psi|B\psi\rangle - \langle B\psi|A\psi\rangle| \leq 2\|A\psi\|\|B\psi\|.$$

Quadriere und ersetze $A \rightarrow A - \langle A \rangle_\psi$, $B \rightarrow B - \langle B \rangle_\psi$ (also $[A, B] \rightarrow [A, B]$); es resultiert (9.24).

Bemerkung. Der Beweis beinhaltet zwei Ungleichungen: die Cauchy-Schwarz Ungleichung und die Dreiecksungleichung in der Form $|z - \bar{z}| \leq 2|z|$. Gleichheit gilt wenn ϕ, ψ linear abhängig sind, bzw. wenn z rein imaginär ist. Daraus folgt: In (9.24) herrscht Gleichheit, genau dann falls

$$\alpha(A - a)\psi + \beta(B - b)\psi = 0 \quad (9.25)$$

mit $(\alpha, \beta) \neq (0, 0)$ und $\bar{\alpha}\beta$ rein imaginär; dann ist $a = \langle A \rangle_\psi$ und $b = \langle B \rangle_\psi$.

Beispiel. Auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ sind

$$x_k : \psi(x) \mapsto x_k \psi(x) ; \quad p_k : \psi(x) \mapsto \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x_k} \quad (9.26)$$

die Komponenten von Ort und Impuls. Es gilt

$$i[p_k, x_l] = \hbar \delta_{kl}$$

und damit

$$\langle(\Delta p_k)^2\rangle \langle(\Delta x_l)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \delta_{kl}. \quad (9.27)$$

Im analogen 1-dimensionalen Fall, $\langle(\Delta p)^2\rangle \langle(\Delta x)^2\rangle \geq \hbar^2/4$, ist das Produkt der Schwankungen minimal genau für die Zustände

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{C}{\pi}} e^{iax/\hbar} e^{-C(x-b)^2/2}$$

mit $C > 0$. Dies sind in der Tat bis auf die Normierung die Lösungen der Differentialgleichung (9.25) mit $A = p$, $B = x$. Der Zusatzbedingung entspricht C reell.

Präparation der Zustände. Die allgemeine Interpretation der Quantenmechanik auf S. 75 setzt eine konkrete Zuordnung zwischen physikalischen Observablen und selbstadjungierten Operatoren voraus, wie sie in den vorangehenden Beispielen zum Ausdruck kommt; grundsätzlich auch eine ebensolche für Zustände. Letztere kann aber auf erstere zurückgeführt werden mittels der Vorschrift (im einfachsten Fall): Liefert die Messung von A den einfachen Eigenwert λ , so ist unmittelbar danach dessen Eigenvektor der Zustand des Systems. (Dies ist konsistent mit (9.3).)

Dynamik. Die Bewegungsgleichung ist die Schrödinger-Gleichung in der allgemeinen Form

$$i\hbar \frac{d|\psi_t\rangle}{dt} = H|\psi_t\rangle, \quad (H = H^*), \quad (9.28)$$

geschrieben als gewöhnliche Differentialgleichung für die vektorwertige Funktion $t \mapsto |\psi_t\rangle \in \mathcal{H}$. Der Operator H heisst **Hamiltonoperator**.

Beispiele. 1. Ein Teilchen im Potential $V(x)$ (vgl. (8.4)):

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V = \sum_{k=1}^3 \frac{p_k^2}{2m} + V(\vec{x}) \quad (9.29)$$

mit x_k, p_k wie in (9.26). Die über die Vorschrift (9.26) erzielte Übersetzung ‘Hamiltonfunktion \rightarrow Hamiltonoperator’ heisst **kanonische Quantisierung**.

2. N -Teilchensystem (8.13):

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \quad (9.30)$$

auf $L^2(\mathbb{R}^{3N})$. Hier indiziert $k = 1, \dots, N$ die Teilchen, entsprechend wirkt $\vec{p}_k^2 = -\hbar^2 \Delta_k$ auf die Variable $\vec{x}_k \in \mathbb{R}^3$ in $\psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$.

3. Ein Teilchen der Ladung e im elektromagnetischen Feld:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 + e\varphi(\vec{x}, t) \quad \text{auf } L^2(\mathbb{R}^3) \quad (9.31)$$

entsteht wie (9.29) und (9.30) durch kanonische Quantisierung der klassischen Hamiltonfunktion, wobei die elektromagnetischen Potentiale $A_k(\vec{x}, t)$ und $\varphi(\vec{x}, t)$ wieder als Multiplikationsoperatoren aufzufassen sind. Falls das äussere Feld von t abhängt, ist das System nicht autonom. Bekanntlich (vgl. Elektrodynamik) bleiben die elektromagnetischen Felder unverändert unter **Eichtransformationen**

$$\varphi \rightarrow \varphi' = \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} \chi,$$

mit einer beliebigen Funktion $\chi = \chi(\vec{x}, t)$; nicht aber der Hamiltonoperator, $H \rightarrow H'$, noch der Zustand. Hingegen erfüllt

$$\psi'(\vec{x}, t) = e^{ie\chi(\vec{x}, t)/\hbar c} \psi(\vec{x}, t) \quad (9.32)$$

die Schrödinger-Gleichung mit Hamiltonoperator H' . Dies folgt aus

$$\begin{aligned} e^{-ie\chi/\hbar c} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi' \right) e^{ie\chi/\hbar c} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi, \\ e^{-ie\chi/\hbar c} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}' \right) e^{ie\chi/\hbar c} &= \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} : \end{aligned} \quad (9.33)$$

wie in der klassischen Mechanik ist $m\vec{v} = \vec{p} - (e/c)\vec{A}$ eichinvariant.

Allgemein wird die Dynamik eines autonomen Systems (H in (9.28) unabhängig von t) beschrieben durch den Propagator (Lösungsabbildung)

$$U(t) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad \psi_0 \mapsto \psi_t \quad (9.34)$$

von (9.28), die den (beliebigen) Anfangszustand ψ_0 in den Zustand zur Zeit t abbildet. Die Operatoren $U(t)$ bilden eine 1-parametrische Gruppe ($U(0) = \mathbf{1}$, $U(t)U(s) = U(t+s)$), die wegen

$$\frac{d}{dt} \langle \phi_t | \psi_t \rangle = \frac{i}{\hbar} [\langle H \phi_t | \psi_t \rangle - \langle \phi_t | H \psi_t \rangle] = 0$$

(benutze $H = H^*$) unitär ist: $\langle U(t)\phi_0 | U(t)\psi_0 \rangle = \langle \phi_t | \psi_t \rangle = \langle \phi_0 | \psi_0 \rangle$. Die Gruppe genügt der Differentialgleichung

$$i\hbar \frac{dU(t)}{dt} = HU(t), \quad (9.35)$$

deren Lösung

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} \quad (9.36)$$

ist. Im Fall $\dim \mathcal{H} < \infty$ ist dies über die Exponentialreihe erklärt; ansonsten und allgemeiner über den Spektralsatz (9.18). Umgekehrt hat jede 1-parametrische unitäre Gruppe $U(t)$ eine selbstadjungierte Erzeugende (Satz von Stone).

Für nicht-autonome Systeme tritt anstelle von $U(t)$ eine 2-parametrische unitäre Schar $U(t, s) : \psi_s \mapsto \psi_t$, die den (beliebigen) Zustand zur Zeit s in den Zustand zur Zeit t abbildet. Entsprechend ist dann $U(t, t) = \mathbf{1}$, $U(t, r)U(r, s) = U(t, s)$.

Bilder. Erwartungswerte verändern sich im Laufe der Zeit gemäss

$$\langle e^{-iHt/\hbar} \psi | A | e^{-iHt/\hbar} \psi \rangle = \langle \psi | e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} | \psi \rangle =: \langle A \rangle_t. \quad (9.37)$$

In der Schreibweise links findet wie in (9.34) eine zeitliche Entwicklung der Zustände statt, $\psi \rightarrow e^{-iHt/\hbar} \psi$ (**Schrödinger-Bild**). In jener rechts findet wie in (8.26) eine der Observablen statt, $A(t) = e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar}$ (**Heisenberg-Bild**) und die Bewegungsgleichung ist (8.27).

Für die Erwartungswerte selbst gilt

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_t = \left\langle \frac{i}{\hbar} [H, A] \right\rangle_t.$$

Instruktiv ist das Beispiel (9.29) des Teilchens im Kraftfeld $\vec{F}(\vec{x}, t) = -\vec{\nabla}V(\vec{x}, t)$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle x_k \rangle_t &= \frac{1}{2m} \left\langle \frac{i}{\hbar} [\vec{p}^2, x_k] \right\rangle_t = \frac{1}{m} \langle p_k \rangle_t, \\ \frac{d}{dt} \langle p_k \rangle_t &= \left\langle \frac{i}{\hbar} [V, p_k] \right\rangle_t = \langle F_k \rangle_t. \end{aligned}$$

Ist nun $V(\vec{x}, t)$ ein Polynom in x vom Grad ≤ 2 (Beispiele: freies Teilchen, homogenes Feld, harmonischer Oszillator), so ist $\vec{F}(\vec{x}, t)$ (affin) linear in \vec{x} und deshalb $\langle F_k \rangle_t = F_k(\langle x \rangle_t, t)$. Dann erfüllen die Erwartungswerte von Ort und Impuls exakt die klassischen Bewegungsgleichungen! Näherungsweise gilt dies, solange die Welle $\psi(\vec{x}, t)$ in Gebieten lokalisiert ist, in denen $\vec{F}(\vec{x}, t)$ annähernd linear verläuft.

Die Äquivalenz der beiden Bilder ist aus (9.37) offensichtlich. Allgemeiner ist die Darstellung eines quantenmechanischen Systems nur bis auf unitäre Äquivalenz eindeutig: Unter einer unitären Abbildung $U : \mathcal{H} \rightarrow \tilde{\mathcal{H}}$, bei der Zustände und Observablen gemäss $\psi \mapsto U\psi$, $A \mapsto UAU^*$ transformieren, bleiben die physikalischen Aussagen dieselben. Speziell entspricht (9.36) dem Übergang vom Heisenberg- zum Schrödinger-Bild.

9.2 Das freie Teilchen

Die Schrödinger-Gleichung des freien Teilchens

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\vec{p}^2}{2m} \psi$$

(mit $\psi(t) \in L^2(\mathbb{R}^3)$) löst man am einfachsten über Fouriertransformation, vgl. (9.21),

$$\begin{array}{ccc} \psi(\vec{x}, 0) & \xrightarrow{\quad\quad\quad} & \psi(\vec{x}, t) \\ \downarrow \mathcal{F} & & \uparrow \mathcal{F}^{-1} \\ \hat{\psi}(\vec{p}, 0) & \xrightarrow[\text{mit } e^{-i\vec{p}^2 t/2m\hbar}]{\text{Multiplikation}} & \hat{\psi}(\vec{p}, t) \end{array}$$

d.h.:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{-i\vec{p}^2 t/2m\hbar} e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar} \hat{\psi}(\vec{p}, 0) d^3p \\ &= \int d^3y \underbrace{(2\pi)^{-3} \int d^3k e^{i[\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{y}) - \frac{\hbar\vec{k}^2}{2m}t]} \psi(\vec{y}, 0)}_{g(\vec{x}-\vec{y}, t)} \end{aligned} \quad (9.38)$$

mit $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$ (Faltung). Mit

$$\int e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - a\vec{k}^2)} d^3k = \underbrace{\int e^{-ia(\vec{k} + \frac{\vec{x}}{2a})^2} d^3k}_{(|a|^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(\text{sgn } a)s^2} ds)^3} \cdot e^{i\frac{\vec{x}^2}{4a}}$$

und dem bedingt konvergenten (Fresnel-)Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\pm is^2} ds = \sqrt{\pi} e^{\pm i\frac{\pi}{4}} \quad (9.39)$$

(Beweis s. Anhang E) findet man

$$g(\vec{x}, t) = e^{-i\frac{3\pi}{4} \text{sgn } t} \left(\frac{m}{2\pi\hbar|t|} \right)^{3/2} e^{i\frac{m\vec{x}^2}{2\hbar t}}.$$

Für integrable $|\psi(\vec{y}, 0)|$ folgt damit aus (9.38)

$$|\psi(\vec{x}, t)| \leq \sup_{\vec{x}} |g(\vec{x}, t)| \cdot \int |\psi(\vec{y}, 0)| d^3 y \leq \text{const} \cdot |t|^{-3/2}$$

für alle \vec{x} : das Wellenpaket $\psi(\vec{x}, t)$ zerfließt. Dies ist ein weiteres Anzeichen, dass $|\psi(\vec{x}, t)|^2$ nicht etwa als Massendichte eines ausgedehnten Teilchens, sondern (vgl. (8.14)) als Wahrscheinlichkeitsdichte für das Auffinden bei \vec{x} (zur Zeit t) eines punktförmigen Teilchens aufzufassen ist.

Für grosse t lässt sich (9.38) in führender Ordnung ausrechnen: mit $\sqrt{it} = e^{\frac{i\pi(\text{sgn } t)}{4}} \sqrt{|t|}$ ist

$$\begin{aligned} \psi(\vec{x}, t) &= e^{i\frac{m\vec{x}^2}{2\hbar t}} \left(\frac{m}{it}\right)^{3/2} (2\pi\hbar)^{-3/2} \int e^{-i\frac{m\vec{x}\cdot\vec{y}}{\hbar t}} \underbrace{e^{i\frac{m\vec{y}^2}{2\hbar t}}}_{1+O(\vec{y}^2/\hbar t)} \psi(\vec{y}, 0) d^3 y \\ &= e^{i\frac{m\vec{x}^2}{2\hbar t}} \left(\frac{m}{it}\right)^{3/2} \widehat{\psi}\left(\frac{m\vec{x}}{t}, 0\right) + O(t^{-5/2}), \end{aligned}$$

gleichmässig in \vec{x} , falls $|\vec{y}^2\psi(\vec{y}, 0)|$ integrel ist. Darin kommt der Zusammenhang von (9.38) zur klassischen freien Bewegung

$$\vec{x}(t) = \vec{x}(0) + \frac{\vec{p}(0)}{m}t, \quad \vec{p}(t) = \vec{p}(0)$$

zum Ausdruck: für letztere ist

$$m\frac{\vec{x}(t)}{t} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \vec{p}(0),$$

für erstere ist die Wahrscheinlichkeit, $m\vec{x}/t$ in $G \subset \mathbb{R}^3$ zu finden, gleich

$$W = \int_{\frac{m\vec{x}}{t} \in G} |\psi(\vec{x}, t)|^2 d^3 x \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \int_G |\widehat{\psi}(\vec{p}, 0)|^2 d^3 p,$$

d.h. für grosse t durch die Impulsverteilung im Anfangszustand gegeben.

9.3 Der harmonische Oszillator

Die klassische Hamiltonfunktion des 1-dimensionalen Oszillators

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}fx^2$$

vereinfacht sich nach der kanonischen Transformation

$$x \rightarrow \frac{1}{(fm)^{1/4}}x, \quad p \rightarrow (fm)^{1/4}p$$

zu

$$H = \frac{\omega}{2}(p^2 + x^2),$$

wobei $\omega = \sqrt{f/m}$ die Oszillatorfrequenz ist. Die Bahnen sind dann Kreise im Phasenraum:

$$x(t) + ip(t) = (x(0) + ip(0))e^{-i\omega t}. \quad (9.40)$$

Quantenmechanisch lautet der Hamiltonoperator nach kanonischer Quantisierung

$$H = \frac{\omega}{2} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + x^2 \right) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right)$$

bzgl. der dimensionslosen Variablen $\xi = x/\sqrt{\hbar}$ (oder direkt $\xi = \sqrt{\omega m \hbar^{-1}} x$ bzgl. der ersten Variablen x). Nützlich erweisen sich die Operatoren (Dirac)

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(x + ip) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right), & \text{(Vernichtungsoperator)}, \\ a^* &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(x - ip) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right), & \text{(Erzeugungsoperator)}. \end{aligned}$$

Damit ist

$$\begin{aligned} [a, a^*] &= 2 \cdot \frac{1}{2} \left[\frac{d}{d\xi}, \xi \right] = 1, \\ N := a^* a &= \frac{1}{2} \left(\xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} - \underbrace{\left[\frac{d}{d\xi}, \xi \right]}_{=1} \right), \\ H &= \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right). \end{aligned}$$

Für die Eigenwerte E von H gilt damit

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (9.41)$$

wobei n ein Eigenwert von N ist. Wir zeigen gleich: dies sind genau die Zahlen

$$n \in \mathbb{N}. \quad (9.42)$$

Folglich ist $E_0 = \hbar\omega/2$ die Energie des **Grundzustands** $n = 0$ (Nullpunktsenergie). Zunächst ist $n \geq 0$, denn aus $N|\psi\rangle = n|\psi\rangle$ folgt

$$n\|\psi\|^2 = \langle \psi | N | \psi \rangle = \|a\psi\|^2 \geq 0.$$

Für $n = 0$ gibt es einen Eigenvektor $|\psi_0\rangle$:

$$\begin{aligned} a|\psi_0\rangle = 0 &\iff \frac{d\psi_0}{d\xi} + \xi\psi_0(\xi) = 0 \\ &\iff \psi_0(\xi) = \pi^{-1/4} e^{-\xi^2/2}, \quad (\text{bis auf ein Vielfaches}). \end{aligned} \quad (9.43)$$

Die Normierung, $\|\psi_0\|^2 \equiv \int |\psi_0(\xi)|^2 d\xi = 1$, und die Wahl der Phase, $\psi_0(\xi) > 0$, machen ψ_0 eindeutig. Eigenvektoren $|\psi_n\rangle$ zu $n = 1, 2, \dots$ ($N|\psi_n\rangle = n|\psi_n\rangle$, $\|\psi_n\|^2 = 1$) findet man rekursiv dank

$$\begin{aligned} Na^* &= a^* a a^* = a^* (a^* a + 1) = a^* (N + 1), \\ Na^* |\psi_{n-1}\rangle &= a^* (N + 1) |\psi_{n-1}\rangle = n a^* |\psi_{n-1}\rangle, \\ \|a^* |\psi_{n-1}\rangle\|^2 &= \langle \psi_{n-1} | \underbrace{a a^*}_{N+1} | \psi_{n-1} \rangle = n \langle \psi_{n-1} | \psi_{n-1} \rangle \end{aligned}$$

als

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^* |\psi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^*)^n |\psi_0\rangle. \quad (9.44)$$

Die $|\psi_n\rangle$'s sind orthogonal, da Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerte von $N = N^*$. Die entsprechenden Wellenfunktionen sind

$$\langle \xi | \psi_n \rangle = \psi_n(\xi) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n!}} \underbrace{\left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2/2}}_{\equiv H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}},$$

wobei $H_n(\xi)$ ein Polynom mit führendem Term $(2\xi)^n$ ist:

$$H_n(\xi) = e^{\xi^2/2} \left(\underbrace{\xi - \frac{d}{d\xi}}_{-e^{\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} e^{-\xi^2/2}} \right)^n e^{-\xi^2/2} = e^{\xi^2} \left(-\frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2}, \quad (\text{Hermite Polynome}).$$

Die endlichen Linearkombination der $|\psi_n\rangle$'s sind die Funktionen der Form $e^{-\xi^2/2} P(\xi)$ (P ein Polynom), und diese sind dicht in $L^2(\mathbb{R})$: steht nämlich $|\psi\rangle \in L^2(\mathbb{R})$ orthogonal auf ihnen allen, so ist

$$f(z) := \int e^{-\xi^2/2} \psi(\xi) e^{iz\xi} d\xi$$

eine analytische Funktion mit

$$\left. \frac{d^n f}{dz^n} \right|_{z=0} = \int e^{-\xi^2/2} (i\xi)^n \psi(\xi) d\xi = 0,$$

also $f \equiv 0$, da f durch die Taylorreihe gegeben ist, und $\psi = 0$, da $e^{-\xi^2/2} \psi(\xi)$ die Fouriertransformierte von f ist. Insbesondere bilden die $|\psi_n\rangle$, ($n \in \mathbb{N}$) eine orthonormierte Basis für $L^2(\mathbb{R})$ (**Besetzungszahlbasis**) und das Spektrum von H ist durch (9.41, 9.42) ausgeschöpft.

Verschiebungsoperatoren. Die Erzeugende der 1-parametrischen Gruppe der Translationen

$$U(s) : \psi(x) \mapsto \psi(x - s)$$

ist

$$i\hbar \left. \frac{d\psi}{ds} \right|_{s=0} = -i\hbar \frac{d\psi}{ds} = p\psi, \quad \text{d.h.} \quad U(s) = e^{-ips/\hbar}.$$

Analog ist $e^{ixs/\hbar}$ eine Translation um s im Impulsraum: $|p\rangle \mapsto |p + s\rangle$. Für $\alpha \in \mathbb{C}$ lässt sich

$$V(\alpha) := e^{\alpha a^* - \bar{\alpha} a}$$

wegen

$$\alpha a^* - \bar{\alpha} a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} [\alpha(x - ip) - \bar{\alpha}(x + ip)] = i\sqrt{2\hbar} [(\text{Im } \alpha)x - (\text{Re } \alpha)p] / \hbar \quad (9.45)$$

als Translation im Phasenraum um

$$(\Delta x, \Delta p) = \sqrt{2\hbar} (\text{Re } \alpha, \text{Im } \alpha), \quad \text{bzw.} \quad \Delta x + i\Delta p = \sqrt{2\hbar} \alpha$$

auffassen. Eigenschaften:

- i) $V(\alpha)^* = V(\alpha)^{-1} = V(-\alpha)$,
- ii) $V(\alpha) = e^{\alpha a^*} e^{-\bar{\alpha} a} e^{-|\alpha|^2/2}$,
- iii) $aV(\alpha) = V(\alpha)(a + \alpha)$.

(i) folgt aus (9.45); (ii) daraus, dass allgemein gilt

$$e^{X+Y} = e^X e^Y e^{-[X,Y]/2} ,$$

falls $[[X, Y], X] = [[X, Y], Y] = 0$, wie wir nun zeigen. Zunächst folgt

$$\frac{d}{dt}(e^{-tX} Y e^{tX}) = -e^{-tX} [X, Y] e^{tX} = -[X, Y] ,$$

also

$$e^{-tX} Y e^{tX} = Y - t[X, Y] ; \quad (9.46)$$

damit ist

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(e^{-tX} e^{t(X+Y)} e^{-tY} e^{t^2[X,Y]/2}) = \\ e^{-tX} Y e^{t(X+Y)} e^{-tY} e^{t^2[X,Y]/2} + e^{-tX} e^{t(X+Y)} e^{-tY} (-Y + t[X, Y]) e^{t^2[X,Y]/2} = 0 , \end{aligned} \quad (9.47)$$

da (9.46) auch für $X + Y$ anstelle von X gilt. Damit ist die Klammer in (9.47) gleich 1 für $t \in \mathbb{R}$. Die Voraussetzung ist für

$$X = \alpha a^* , \quad Y = -\bar{\alpha} a , \quad [X, Y] = -|\alpha|^2 [a^*, a] = |\alpha|^2$$

erfüllt. (iii) folgt aus (9.46) für $X = \alpha a^* - \bar{\alpha} a$, $Y = a$ und $t = 1$:

$$V(\alpha)^{-1} a V(\alpha) = a - \alpha [a^*, a] = a + \alpha .$$

Die **kohärenten Zustände** sind definiert als

$$|\alpha\rangle = V(\alpha)|0\rangle \equiv V(\alpha)|\psi_0\rangle , \quad (\alpha \in \mathbb{C}) .$$

Wegen (iii), (9.43) ist

$$a|\alpha\rangle = aV(\alpha)|0\rangle = V(\alpha)(a + \alpha)|0\rangle = \alpha|\alpha\rangle ,$$

d.h. $|\alpha\rangle$ ist ein Eigenvektor von a zum Eigenwert α .

Bemerkung. a^* hat hingegen keine Eigenwerte: wäre $a^*|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$, so

$$\lambda\langle\psi_n|\psi\rangle = \langle\psi_n|a^*\psi\rangle = \langle a\psi_n|\psi\rangle = \begin{cases} \sqrt{n}\langle\psi_{n-1}|\psi\rangle , & (n \neq 0) , \\ 0 , & (n = 0) . \end{cases}$$

Ist $\lambda = 0$, so folgt $|\psi\rangle = 0$; ist $\lambda \neq 0$, so $\langle\psi_0|\psi\rangle = 0$ und damit wieder $|\psi\rangle = 0$.

Insbesondere kennzeichnet α den Erwartungswert von Ort x und Impuls p im Zustand $|\alpha\rangle$:

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\langle x\rangle_\alpha + i\langle p\rangle_\alpha) = \langle a\rangle_\alpha = \alpha .$$

Kohärente Zustände haben eine **klassische Dynamik**:

$$e^{-iHt/\hbar}|\alpha\rangle = e^{-i\omega t}|\alpha_t\rangle, \quad (9.48)$$

wobei $\alpha_t = \alpha e^{-i\omega t}$ die klassische Bahn (9.40) ist, die dem Phasenraumpunkt $\alpha := (x + ip)/\sqrt{2\hbar}$ entspringt. (Die Phase rechts in (9.48) könnte durch Verschiebung des Energienullpunkts eliminiert werden.) Dies folgt mit (ii), (9.43) aus

$$|\alpha\rangle = V(\alpha)|0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}e^{\alpha a^*}|0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|\psi_n\rangle, \\ e^{-iHt/\hbar}|\psi_n\rangle = e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t}|\psi_n\rangle = e^{-i\omega\frac{t}{2}}(e^{-i\omega t})^n|\psi_n\rangle.$$

9.4 Symmetrien und Erhaltungssätze

Wir betrachten die durch $H = H^*$ (Hamiltonoperator) und $A = A^*$ (eine Observable) erzeugten 1-parametrischen unitären Gruppen

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\psi_0\rangle : \text{Lösung von } i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle \text{ zum Anfangszustand } |\psi_0\rangle, \\ |\varphi(\lambda)\rangle = e^{-iA\lambda/\hbar}|\psi_0\rangle : \text{Lösung von } i\hbar \frac{d|\varphi\rangle}{d\lambda} = A|\varphi\rangle \text{ zum Anfangszustand } |\psi_0\rangle.$$

Dann ist

$$\left. \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \right|_{t=0} = \langle \psi_0 | \frac{i}{\hbar} [H, A] | \psi_0 \rangle = - \langle \psi_0 | \frac{i}{\hbar} [A, H] | \psi_0 \rangle = - \left. \frac{d}{d\lambda} \langle \varphi(\lambda) | H | \varphi(\lambda) \rangle \right|_{\lambda=0}.$$

Folgende Aussagen sind deshalb äquivalent:

- a) A ist eine **Erhaltungsgrösse**, d.h. $\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle$ ist für jeden Anfangszustand $|\psi_0\rangle$ zeitlich konstant. Oder:

$$e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar} = A;$$

- b) $[H, A] = 0$;

- c) $\langle \varphi(\lambda) | H | \varphi(\lambda) \rangle$ ist unabhängig von λ für jeden Anfangszustand $|\psi_0\rangle$, oder

$$e^{iA\lambda/\hbar} H e^{-iA\lambda/\hbar} = H.$$

Man nennt dann $e^{-iA\lambda/\hbar}$ eine (1-parametrische) **Symmetriegruppe** von H .

Beispiel. Jede Drehung $R \in O(3)$ induziert im Raum $L^2(\mathbb{R}^3)$ eine unitäre Transformation

$$U(R) : \psi(\vec{x}) \mapsto \psi(R^{-1}\vec{x}). \quad (9.49)$$

Es gilt $U(1) = \mathbf{1}$, $U(R_2)U(R_1) = U(R_2R_1)$, d.h. $R \mapsto U(R)$ ist eine unitäre **Darstellung** der Drehgruppe $O(3)$. Die Drehungen $R(\lambda)$ um eine feste Achse \vec{e} , ($|\vec{e}| = 1$) mit Drehwinkel λ bilden eine 1-parametrische Untergruppe von $SO(3) \subset O(3)$, und es ist

$$\left. \frac{d}{d\lambda} R(\lambda)\vec{x} \right|_{\lambda=0} = \vec{e} \wedge \vec{x}.$$

Die zugehörigen $U(\lambda) \equiv U(R(\lambda))$ bilden eine 1-parametrische unitäre Gruppe. Ihre Erzeugende A ergibt sich aus

$$(A\psi)(\vec{x}) = i\hbar \frac{d}{d\lambda} \psi(R(-\lambda)\vec{x}) \Big|_{\lambda=0} = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \vec{x}} \cdot (\vec{e} \wedge \vec{x}) = \vec{e} \cdot \left(\vec{x} \wedge \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial \vec{x}} \right), \quad (9.50)$$

d.h. es ist

$$A = \vec{e} \cdot (\vec{x} \wedge \vec{p}) = \mathbf{e} \cdot \vec{L} = \text{Drehimpulskomponente in Richtung der Drehachse } \mathbf{e}.$$

Somit ist $\mathbf{e} \cdot \vec{L}$ genau dann erhalten, wenn $U(\lambda)$ eine Symmetriegruppe von H ist. Für

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$$

findet man

$$U(R)^{-1} H U(R) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(R\vec{x}).$$

Somit ist $\mathbf{e} \cdot \vec{L}$ erhalten, wenn $V(\vec{x})$ rotationssymmetrisch um die Achse \mathbf{e} ist. Bei voller Rotationssymmetrie, d.h. falls $V = V(|\vec{x}|)$, sind alle Drehimpulskomponenten erhalten:

$$[H, \vec{L}] = 0. \quad (9.51)$$

Ebenfalls erhalten ist dann $\vec{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$, d.h.

$$[H, \vec{L}^2] = 0. \quad (9.52)$$

Bemerkung. In Polarkoordinaten (r, θ, φ) wirkt $R(\lambda) : (r, \theta, \varphi) \mapsto (r, \theta_\lambda, \varphi_\lambda)$ nicht auf r . Wird $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$ in diesen dargestellt, so kann $U(\lambda)$ als unitäre Abbildung auf $L^2(\Omega)$, ($\Omega = \text{Einheitskugel}$) aufgefasst werden; entsprechend nach (9.50) die Erzeugenden L_i , ($i = 1, 2, 3$), und damit \vec{L}^2 , als selbst-adjungierte Operatoren darauf. Beispiel: $\mathbf{e} = \mathbf{e}_3$, also $\theta_\lambda = \theta$, $\varphi_\lambda = \varphi + \lambda$:

$$L_3 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

10 Das Zweikörperproblem

10.1 Schwerpunkts- und Relativbewegung

Der Hamiltonoperator ist

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|) \quad \text{auf } L^2(\mathbb{R}^6). \quad (10.1)$$

Speziell beschreibt

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (10.2)$$

die Wechselwirkung eines Elektrons der Ladung $-e$ mit einem Atomkern der Ladung $Z \cdot e$ ($Z = 1$: Wasserstoff-Atom). Zunächst bleiben wir aber bei einem allgemeinen Potential $V(r)$.

Nach klassischem Muster schreibt man H in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten

$$\vec{X} = \frac{1}{M}(m_1\vec{x}_1 + m_2\vec{x}_2), \quad \vec{x} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2 \quad (10.3)$$

und den konjugierten Impulsen

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2, \quad \vec{p} = m\left(\frac{\vec{p}_1}{m_1} - \frac{\vec{p}_2}{m_2}\right),$$

wobei $M = m_1 + m_2$ und $m = m_1m_2/M$ (reduzierte Masse). So wird

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(|\vec{x}|), \quad P_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial X_k}; \quad p_k = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k}, \quad (10.4)$$

denn es ist gleichgültig, ob die Quantisierung in den Koordinaten (\vec{x}_1, \vec{x}_2) oder (\vec{X}, \vec{x}) erfolgt. Beschränken wir uns auf Wellenfunktionen der Form

$$\Psi(\vec{X}) \psi(\vec{x})$$

(die $L^2(\mathbb{R}^6)$ aufspannen), so ergeben sich zwei unabhängige Schrödingergleichungen:

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = \frac{\vec{P}^2}{2M} \Psi; \quad i\hbar \frac{d\psi}{dt} = \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} \psi + V(|\vec{x}|) \right) \psi. \quad (10.5)$$

Die erste beschreibt die freie Bewegung des Schwerpunkts (die wir nicht weiter betrachten), die zweite die Relativbewegung: ein **Zentralkraftproblem** mit dem Hamiltonoperator

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(|\vec{x}|) \quad \text{auf } L^2(\mathbb{R}^3). \quad (10.6)$$

Da H rotationssymmetrisch ist, gilt der Erhaltungssatz (9.51). Dadurch wird sich das Problem weiter auf eine eindimensionale Schrödingergleichung für die radiale Bewegung reduzieren lassen. Aus (9.52) folgt, dass H die Eigenräume von \vec{L}^2 in sich abbildet. Wir untersuchen daher zuerst das Eigenwertproblem von \vec{L}^2 , dann jenes von H .

Drehimpuls: Wir setzen $\vec{L} = \hbar\vec{M}$, $\vec{M} = -i\vec{x} \wedge \partial/\partial\vec{x}$. Es ist

$$\begin{aligned}\vec{M}^2 &= M_1^2 + M_2^2 + M_3^2 = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 (x_i\partial_j - x_j\partial_i)^2 \\ &= -\sum_{i,j} (x_i \underbrace{\partial_j x_i}_{x_i\partial_j + \delta_{ij}} \partial_j - x_i \underbrace{\partial_j x_j \partial_i}_{\partial_i x_j \partial_j + (1 - \delta_{ij})\partial_i}) \\ &= -\sum_{i,j} (x_i^2 \partial_j^2 - x_i \partial_i x_j \partial_j - x_i \partial_i + 2\delta_{ij} x_i \partial_i) .\end{aligned}$$

In Polarkoordinaten ist $\sum_i x_i \partial_i = \vec{x} \cdot \vec{\nabla} = r\partial/\partial r$, also

$$\vec{M}^2 = -r^2 \Delta + \left(r \frac{\partial}{\partial r}\right)^2 + (3-2)r \frac{\partial}{\partial r} = -r^2 \Delta + r \frac{\partial^2}{\partial r^2} r ,$$

oder

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \vec{M}^2 . \quad (10.7)$$

Die Eigenvektoren von \vec{M}^2 (als Operator auf $L^2(\Omega)$ aufgefasst, vgl. Bemerkung auf S. 86), sind die Kugelfunktionen Y_l (Definition: s. Anhang B):

$$\vec{M}^2 Y_l = l(l+1) Y_l .$$

Weiter gilt der Satz in Anhang B. Als Operator auf $L^2(\Omega)$ hat damit \vec{M}^2 das rein diskrete Spektrum der Eigenwerte $l(l+1)$, ($l = 0, 1, 2, \dots$), die $(2l+1)$ -fach entartet sind.

Hamiltonoperator: H lässt für jedes l den Unterraum der Wellenfunktionen

$$\psi(\vec{x}) = \frac{u(r)}{r} Y_l(\mathbf{e}) \quad (10.8)$$

mit $u \in L^2(0, \infty)$, d.h. $\int_0^\infty |u(r)|^2 dr < \infty$, invariant. (Beachte: $\int |\psi(\vec{x})|^2 d^3x = \int_\Omega |Y_l(\mathbf{e})|^2 d^2e \cdot \int_0^\infty |u(r)|^2 dr$, da $d^3x = r^2 dr d^2e$.) In jedem solchen Unterraum reduziert sich $H\psi = E\psi$ auf das "radiale Eigenwertproblem"

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \mathcal{V}(r)\right)u = \varepsilon u \quad (10.9)$$

in $L^2(0, \infty)$, wobei wir

$$\mathcal{V}(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) , \quad \varepsilon = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

gesetzt haben. Wir diskutieren das Verhalten der Lösung bei $r \rightarrow 0$ und $r \rightarrow \infty$. Dabei nehmen wir an, dass $V(r)$ für $r \rightarrow \infty$ verschwindet und für $r \rightarrow 0$ weniger singulär ist als $1/r^2$.

Bei $r \rightarrow 0$ reduziert sich (10.9) auf

$$-u'' + \frac{l(l+1)}{r^2} u = 0$$

mit der allgemeinen Lösung

$$u(r) = ar^{l+1} + br^{-l} .$$

Falls $l > 0$, ist sie bei $r = 0$ quadratintegrierbar, nur falls $b = 0$. Auch für $l = 0$ ist die Lösung $r^{-l} = 1$ zu verwerfen: dann ist nach (10.8) $\psi(\vec{x}) = 1/r$, also $-\Delta\psi = 4\pi\delta$ nicht quadratintegrierbar. Die verbleibende Lösung ist bis auf die Konstante a bestimmt. Damit hat (10.9) für jedes ε nur eine einzige Lösung $u(\varepsilon, r) \approx r^{l+1}$, ($r \rightarrow 0$): die ‘reguläre Lösung’.

Bei $r \rightarrow \infty$ reduziert sich (10.9) auf

$$-u'' = \varepsilon u$$

mit der allgemeinen Lösung

$$ae^{ikr} + be^{-ikr} , \quad (k = \sqrt{\varepsilon}) .$$

Insbesondere ist zu erwarten, dass die reguläre Lösung $u(\varepsilon, r)$ von (10.9) für $r \rightarrow \infty$ die asymptotische Form

$$u(\varepsilon, r) \approx a(\varepsilon)e^{ikr} + b(\varepsilon)e^{-ikr} \quad (10.10)$$

besitzt.

Gebundene Zustände entsprechen (normierbaren) Eigenzuständen, $u(\varepsilon, \cdot) \in L^2(0, \infty)$. Dann muss erstens $\varepsilon < 0$: wir legen dann k fest durch

$$k = i\kappa , \quad \kappa = \sqrt{-\varepsilon} > 0 , \quad (10.11)$$

also $e^{\pm ikr} = e^{\mp \kappa r}$. Zweitens muss $b(\varepsilon) = 0$ sein: die Eigenwerte ε ergeben sich als **Nullstellen** der Funktion $b(\varepsilon)$. Dann reduziert sich (10.10) auf

$$u(\varepsilon, r) \approx a(\varepsilon)e^{-\kappa r} , \quad (r \rightarrow \infty) .$$

10.2 Das Wasserstoff-Atom

Wir behandeln nun den Fall (10.2) des Coulombpotentials

$$\mathcal{V}(r) = -\frac{\gamma}{r} , \quad \gamma = \frac{2mZe^2}{\hbar^2} .$$

Die allgemeine Diskussion motiviert den Ansatz

$$u(r) = e^{-\kappa r} \sum_{k=l+1}^{\infty} c_k r^k . \quad (10.12)$$

Einsetzen in die Differentialgleichung liefert unter Benutzung von (10.11) die einfache Rekursion

$$c_{k+1} = c_k \frac{\gamma - 2\kappa k}{l(l+1) - k(k+1)} , \quad (k = l+1, l+2, \dots) . \quad (10.13)$$

Falls die Rekursion nicht abbricht (d.h. alle $c_k \neq 0$), so ist für $k \rightarrow \infty$

$$c_{k+1} \approx c_k \frac{2\kappa}{k+1} , \quad \text{also} \quad c_k \approx C \frac{(2\kappa)^k}{k!} ,$$

was auf

$$u(r) \approx e^{-\kappa r} \cdot C e^{2\kappa r} = C e^{\kappa r}$$

führt. Falls (10.13) hingegen abbricht, d.h. falls für ein n

$$c_n \neq 0, \quad c_{n+1} = 0,$$

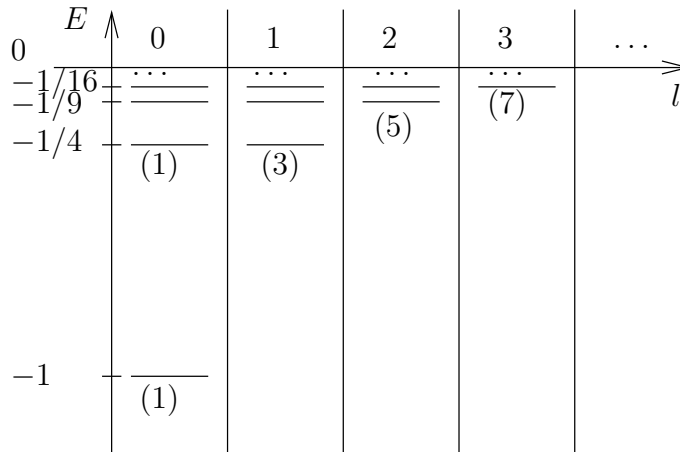
so ist die Lösung eine Eigenfunktion. Die Bedingung dafür ist

$$\kappa_n = \frac{\gamma}{2n}, \quad (n = l + 1, l + 2, \dots),$$

d.h.

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \kappa_n^2 = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (10.14)$$

(Schrödinger 1926). Dies ist die von Bohr im Rahmen der "alten Quantentheorie" hergeleitete Formel (7.25) für die Energieniveaus. Das Schema der Eigenwerte stellen wir so dar:



Die Eigenwerte sind aufgetragen in der Einheit 1Ry (Rydberg); die Zahlen in Klammern sind die Vielfachheiten $2l + 1$ der Eigenwerte zu gegebenem l , entsprechend der Dimension des Raums der Kugelfunktionen zum Index l . Zu gegebenem n ist die Vielfachheit (oder Entartung) von E_n gleich

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2,$$

was mit (7.33) übereinstimmt.

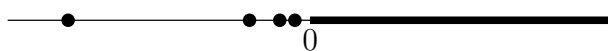
Fundamental ist die Existenz eines energetisch tiefsten Zustands ($l = 0, n = 1$): die Energie des H-Atom ist nach unten beschränkt und es ist damit stabil! Dies im Gegensatz zum klassischen H-Atom, wo das (beschleunigte) Elektron beliebig viel Energie durch Ausstrahlung abgeben würde (vgl. Elektrodynamik). Die Wellenfunktion des Grundzustandes ist nach (10.12)

$$u(r) = e^{-\kappa_1 r}, \quad \kappa_1 = \frac{\gamma}{2} = \frac{me^2}{\hbar^2},$$

also (bis auf Normierung), da Y_0 eine Konstante ist,

$$\psi(\vec{x}) = e^{-|\vec{x}|/a}, \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Der Bohr-Radius a ist der Radius des Atoms in der Bohrschen Theorie. Durch (10.14) sind alle Eigenwerte von H (vgl. (10.6, 10.2)) gefunden (ohne Beweis). Damit ist aber (im Unterschied zum harmonischen Oszillator) noch nicht das gesamte Spektrum $\sigma(H)$ ausgeschöpft, welches (wie beim freien Teilchen) auch einen kontinuierlichen Anteil $[0, \infty)$ besitzt:



Um dies einzusehen, vgl. (9.9), konstruiere man sich zu jedem $E \geq 0$ und beliebig kleinem $\varepsilon > 0$ ein Zustand ψ mit der Eigenschaft

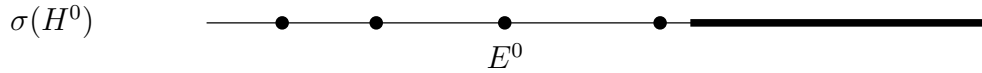
$$\|(H - E)\psi\| \leq \varepsilon.$$

Idee: ein approximierter Eigenzustand des freien Teilchens, weit weg vom Kern.

11 Näherungsmethoden

11.1 Störung des Eigenwertproblems

$H^0 = H^{0*}$ habe den vom Rest des Spektrums isolierten Eigenwert E^0 :



Es sei M^0 der Eigenraum von H^0 zum Eigenwert E^0 , $\dim M^0 \equiv n^0 < \infty$, und P^0 die Projektion auf M^0 . Dann ist $Q^0 \equiv 1 - P^0$ die Projektion auf $M^{0\perp}$. M^0 und $M^{0\perp}$ sind invariant unter H^0 , und die Teile von H^0 in M^0 bzw. $M^{0\perp}$ haben die Spektren $\{E^0\}$, bzw. $\sigma(H^0) \setminus \{E^0\}$. Insbesondere existiert $(E^0 - H^0)^{-1}$ auf $M^{0\perp}$, d.h. auch die reduzierte Resolvente

$$R^0 = (E^0 - H^0)^{-1}Q^0 = Q^0(E^0 - H^0)^{-1}Q^0. \quad (11.1)$$

Wir untersuchen nun das Verhalten des Eigenwerts E^0 unter dem Einfluss einer **Störung**

$$H^0 \rightsquigarrow H^0 + \varepsilon H^1, \quad (H^1 = H^{1*}) \quad (11.2)$$

für kleine Werte des Störparameters ε . Das triviale Beispiel $H^0 = E^0 \cdot \mathbf{1}$ zeigt schon, was passieren kann: der Eigenwert E^0 spaltet auf in n^0 Eigenwerte

$$E_k = E^0 + \varepsilon E_k^1, \quad (k = 1, \dots, n^0),$$

wobei die E_k^1 die Eigenwerte von H^1 sind. Im Allgemeinen nehmen wir an, dass E^0 in n^0 Eigenwerte $E_k(\varepsilon)$ mit Eigenvektoren $\psi_k(\varepsilon)$ aufspaltet, und dass $E_k(\varepsilon)$ und $\psi_k(\varepsilon)$ Entwicklungen nach Potenzen von ε besitzen. So setzen wir an:

$$(H^0 + \varepsilon H^1 - E^0 - \varepsilon E_k^1 - \varepsilon^2 E_k^2 - \dots)(\psi_k^0 + \varepsilon \psi_k^1 + \varepsilon^2 \psi_k^2 + \dots) = 0, \quad (k = 1, \dots, n^0)$$

und finden durch Koeffizientenvergleich:

$$(H^0 - E^0)\psi_k^0 = 0, \quad (11.3)$$

$$(H^0 - E^0)\psi_k^1 + (H^1 - E_k^1)\psi_k^0 = 0, \quad (11.4)$$

$$(H^0 - E^0)\psi_k^2 + (H^1 - E_k^1)\psi_k^1 - E_k^2\psi_k^0 = 0, \quad (11.5)$$

.....

Nullte Ordnung. Gl. (11.3) bedeutet nur

$$Q^0\psi_k^0 = 0, \quad (11.6)$$

d.h. $\psi_k^0 \in M^0$. Weiter sind die ψ_k^0 in nullter Ordnung nicht bestimmt. Nur wenn E^0 ein einfacher Eigenwert ist, ist ψ_k^0 (bis auf Vielfache) dadurch bestimmt. Denn ansonsten hängen sie tatsächlich von der Störung ab: sie sind die Grenzwerte der gestörten Eigenvektoren $\psi_k(\varepsilon)$ für $\varepsilon \rightarrow 0$.

Die ψ_k^0 können somit innerhalb von M^0 erst in höherer Ordnung bestimmt werden. Die Reihe $E_k(\varepsilon)$ wird sich dann eindeutig ergeben, nicht aber ohne Weiteres die des Eigenvektors $\psi_k(\varepsilon)$, denn dieser bleibt einer (mit Grenzwert ψ_k^0) selbst nach Multiplikation mit

einer beliebigen Reihe der Form $1 + c_1\varepsilon + c_2\varepsilon^2 + \dots$. Diese Freiheit wird beseitigt durch die Normierung $\langle \psi_k^0 | \psi_k(\varepsilon) \rangle = 1$, d.h.

$$\langle \psi_k^0 | \psi_k^l \rangle = 0, \quad (l = 1, 2, \dots). \quad (11.7)$$

Erste Ordnung. Wir operieren mit P^0 auf (11.4). Wegen $P^0(E^0 - H^0) = 0$ und (11.6) ergibt sich

$$P^0 H^1 P^0 \psi_k^0 = E_k^1 \psi_k^0, \quad (k = 1, \dots, n^0). \quad (11.8)$$

Die Eigenwertstörungen erster Ordnung E_k^1 sind die Eigenwerte des Operators $P^0 H^1 P^0$ auf M^0 : ein n^0 -dimensionales Eigenwertproblem. Dieses bestimmt die ψ_k^0 (bis auf Normierung) soweit keine Entartungen auftreten. Praktisch wahlt man in M^0 eine orthonormierte Basis $\{\varphi_r\}$ ungestorter Eigenvektoren. Dann ist der Operator $P^0 H^1 P^0$ dargestellt durch die Matrix

$$\langle \varphi_r | H^1 | \varphi_s \rangle, \quad (r, s = 1, \dots, n^0).$$

Die E_k^1 sind die Eigenwerte dieser Matrix, die zugehorigen Eigenvektoren (Spaltenvektoren) die Entwicklungskoeffizienten von ψ_k^0 in der Basis $\{\varphi_r\}$. Im Spezialfall $n^0 = 1$ ist bei Normierung $\|\psi^0\| = 1$

$$E^1 = \langle \psi^0 | H^1 | \psi^0 \rangle \quad (11.9)$$

die **Eigenwertverschiebung 1. Ordnung**. Wir operieren noch mit Q^0 auf (11.4) und finden wegen $Q^0 \psi_k^0 = 0$:

$$(H^0 - E^0) Q^0 \psi_k^1 = -Q^0 H^1 \psi_k^0,$$

also

$$Q^0 \psi_k^1 = R^0 H^1 \psi_k^0. \quad (11.10)$$

Im nicht entarteten Fall ($n^0 = 1$) folgt mit (11.7)

$$\psi_k^1 = R^0 H^1 \psi_k^0. \quad (11.11)$$

Zweite Ordnung. Wir greifen einen n^1 -fachen Eigenwert E^1 von (11.8) heraus mit Eigenvektoren ψ_k^0 , ($k = 1, \dots, n^1$), welche den zugehorigen Eigenraum $M^1 \subset M^0$ von $P^0 H^1 P^0$ aufspannen ($n^1 \leq n^0$). Es sei P^1 die Projektion auf M^1 , also $P^1 \psi_k^0 = \psi_k^0$; $P^1 = P^1 P^0$; $P^1(H^0 - E^0) = 0$ und $P^1 P^0 (H^1 - E^1) P^0 = 0$. Operieren wir mit P^1 auf (11.5) so ergibt sich damit:

$$\begin{aligned} E_k^2 \psi_k^0 &= P^1 (H^1 - E^1) \psi_k^1 = P^1 P^0 (H^1 - E^1) (P^0 + Q^0) \psi_k^1 \\ &= P^1 H^1 Q^0 \psi_k^1, \end{aligned}$$

und aus (11.10):

$$P^1 H^1 R^0 H^1 P^1 \psi_k^0 = E_k^2 \psi_k^0. \quad (11.12)$$

Dies ist ein n^1 -dimensionales Eigenwertproblem zur Bestimmung der Eigenwertstorungen E_k^2 und derjenigen ψ_k^0 , die in erster Ordnung noch unbestimmt geblieben sind. Im Fall $n^1 = 1$ ist ψ^0 schon durch (11.8) bestimmt, und fur $\|\psi^0\| = 1$ ist

$$E^2 = \langle \psi^0 | H^1 R^0 H^1 | \psi^0 \rangle \quad (11.13)$$

die **Eigenwertverschiebung 2. Ordnung**. Wenn E^0 der tiefste Eigenwert von H^0 ist (Grundzustand), so ist $(E^0 - H^0) < 0$ auf M^{\perp} , also $R^0 \leq 0$ und folglich auch $E^2 \leq 0$. Das Auftreten der reduzierten Resolvente R^0 verunmöglicht oft die exakte Auswertung der Störungsformeln 2. Ordnung. Im Fall, dass H^0 nebst E^0 rein diskretes Spektrum besitzt, mit Eigenwerte $E_m^{\perp} \neq E^0$ und normierten Eigenvektoren ψ_m^{\perp} , so ist

$$R^0|\varphi\rangle = \sum_m |\psi_m^{\perp}\rangle \frac{\langle \psi_m^{\perp}|\varphi\rangle}{E^0 - E_m^{\perp}}$$

mit entsprechenden Ausdrücke für (11.11, 11.13).

Beispiel: Stark-Effekt. Wir untersuchen die Störung des Niveaus $n = 2$ des Wasserstoffatoms

$$H^0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

durch ein homogenes elektrisches Feld $(0, 0, E)$:

$$H^1 = -eEx_3 .$$

Hier spielt E die Rolle des Störparameters. Die 4 Funktionen

$$\psi_{2lm}(\vec{x}) = \frac{u_{2l}(r)}{r} Y_{lm}(\vec{x}) , \quad (l = 0, 1; m = -l, \dots, l) .$$

bilden eine orthonormierte Basis im Raum der Eigenfunktionen von H^0 zur Energie $E_2 = -1/4 \text{ Ry}$. Allgemein ist

$$\langle \psi_{nlm} | x_3 | \psi_{n'l'm'} \rangle = 0 , \quad (11.14)$$

falls $m \neq m'$, da M_3 mit x_3 vertauscht. Ebenso gilt (11.14) falls $l = l'$, da dann die beiden Faktoren des Skalarprodukts ungleiche Parität haben. Die 4×4 -Matrix $\langle \psi_{2lm} | H^1 | \psi_{2l'm'} \rangle$ hat also die sehr einfache Form:

$$\begin{array}{c|cccc} & \psi_{200} & \psi_{210} & \psi_{211} & \psi_{21-1} \\ \hline \psi_{200} & 0 & \varepsilon & 0 & 0 \\ \psi_{210} & \bar{\varepsilon} & 0 & 0 & 0 \\ \psi_{211} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \psi_{21-1} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \quad (11.15)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon &= -eE \langle \psi_{200} | x_3 | \psi_{210} \rangle = -eE \underbrace{\int_0^{\infty} dr u_{20}(r) r u_{21}(r)}_{-3\sqrt{3}a_0} \underbrace{\int d\Omega Y_{00} \cos(\theta) Y_{10}}_{1/\sqrt{3}} \\ &= 3ea_0E , \quad (a_0 = \text{Bohr-Radius}) . \end{aligned}$$

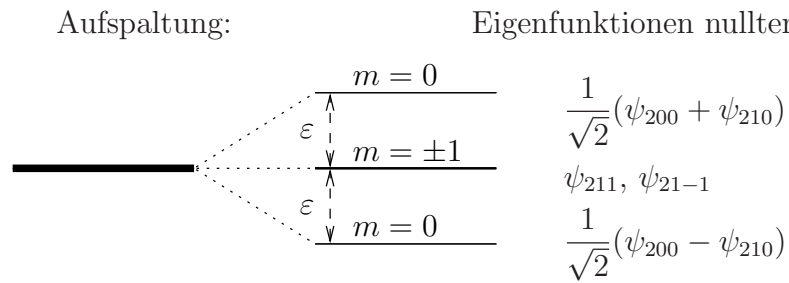
Diese Werte erhält man durch Berechnung der normierten radialen Eigenfunktionen $u_{20}(r)$ und $u_{21}(r)$ unter Benutzung von (10.13). Ausgedrückt durch das Feld des Kerns

$$E_{\text{Bohr}} \equiv \frac{e}{a_0^2} = 5.14 \cdot 10^{11} \text{ Volt} \cdot \text{m}^{-1}$$

im Abstand eines Bohr-Radius schreibt sich

$$\varepsilon = 3 \frac{E}{E_{\text{Bohr}}} \cdot E_{\text{Bohr}} a_0 e = 6 \frac{E}{E_{\text{Bohr}}} \frac{me^4}{2\hbar^2} = 6 \frac{E}{E_{\text{Bohr}}} \text{ Ry} ,$$

ist also praktisch sehr klein gegen die Bindungsenergie des H -Atoms. Aus der Lösung des Eigenwertproblems für die Matrix (11.15) ergibt sich folgendes Bild:



12 Drehimpuls und Spin

12.1 Symmetrien im Hilbertraum

Bevor wir zum eigentlichen Thema des Kapitels gelangen, soll der Zustandsbegriff und insbesondere (9.3) nochmals erörtert werden. Dem folgenden Satz gehen zwei Definitionen voran.

Der Zustandsraum eines quantenmechanischen Systems ist ein Hilbertraum \mathcal{H} über \mathbb{C} . Ein (reiner) Zustand ist ein **Strahl**: $\{\lambda\psi\}$, wobei $\psi \in \mathcal{H}$, $\|\psi\| = 1$ fest und $\lambda \in \mathbb{C}$, $|\lambda| = 1$ beliebig ist, und umgekehrt. Eindeutig sind reine Zustände gegeben durch **1-dimensionale orthogonale Projektoren** Π auf \mathcal{H} :

$$\Pi\phi = |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle$$

(bzw. $\Pi = |\psi\rangle\langle\psi|$). Sei $\Pi(\mathcal{H})$ die Menge aller solcher Projektoren.

Definition. Eine **Symmetrie** (zwischen \mathcal{H} und \mathcal{H}') ist eine Abbildung $S : \Pi(\mathcal{H}) \rightarrow \Pi(\mathcal{H}')$, $\Pi \mapsto \Pi'$, derart dass

$$\text{tr}(\Pi_1\Pi_2) = \text{tr}(\Pi'_1\Pi'_2) . \quad (12.1)$$

Durch Strahlen ausgedrückt:

$$|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2 = |\langle\psi'_1|\psi'_2\rangle|^2 ,$$

d.h. invariant sind die Wahrscheinlichkeiten, deren Bedeutung aus (9.19) erhellt.

Definition. Ein **antilinear Operator** $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}'$ ist eine Abbildung mit

$$A(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \bar{\lambda}_1 A|\psi_1\rangle + \bar{\lambda}_2 A|\psi_2\rangle , \quad (\lambda_i \in \mathbb{C}, |\psi_i\rangle \in \mathcal{H}) .$$

Sein adjungierter Operator ist durch

$$\langle\phi|A^*\psi\rangle = \langle\psi|A\phi\rangle , \quad (|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H})$$

definiert (beachte den Unterschied zu (9.4)). Eine antilineare **Isometrie** liegt vor, falls

$$\langle A\phi|A\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle ,$$

d.h. $A^*A = 1$. Ist ferner A invertierbar oder, äquivalent dazu, $AA^* = 1$, so heisst A **antiunitär**.

Es gelten die Regeln wie im linearen Fall. Beachte allerdings

$$(\lambda A)^* = A^*\bar{\lambda} = \lambda A^* . \quad (12.2)$$

Satz. (Wigner) Jede Symmetrie ist dargestellt als

$$S(\Pi) = U\Pi U^* \quad (12.3)$$

(d.h. $\psi' = U\psi$) mit U einer entweder linearen oder antilinearen Isometrie. U ist eindeutig bis auf Multiplikation mit einer Phase $c \in \mathbb{C}$, $|c| = 1$.

Beweis. s. Anhang D.

Bemerkung. Ist die Symmetrie umkehrbar, so ist U unitär oder antiunitär.

Diskrete Symmetrien. Wir betrachten zunächst ein klassisches Teilchen im Raum (oder stillschweigend mehrere), bei dem dynamischer und kinematischer Impuls übereinstimmen: $\vec{p} = m\vec{x}$. Die diskreten Symmetrien **Raumspiegelung** P und **Zeitumkehr** T sind

$$\begin{aligned} P &: (\vec{x}, \vec{p}) \rightarrow (-\vec{x}, -\vec{p}) , \\ T &: (\vec{x}, \vec{p}) \rightarrow (\vec{x}, -\vec{p}) . \end{aligned}$$

Sollen P, T auch Symmetrien im Sinne obiger quantenmechanischer Definition sein, so ist von den Operatoren U_P, U_T aus Gl. (12.3)

$$\begin{aligned} U_P^* x_i U_P &= -x_i , & U_P^* p_i U_P &= -p_i , \\ U_T^* x_i U_T &= x_i , & U_T^* p_i U_T &= -p_i \end{aligned}$$

zu verlangen. Insbesondere ist $U_P^* [p_i, x_j] U_P = [p_i, x_j]$, $U_T^* [p_i, x_j] U_T = -[p_i, x_j]$. Vergleich mit $[p_i, x_j] = -i\hbar\delta_{ij}$ zeigt, dass U_P **linear** und U_T **antilinear** sein muss.

Für eine Symmetrie S mit $S^2 = 1$ folgt aus (12.3) für das entsprechende U

$$U^2 = c$$

mit $|c| = 1$. Im linearen Fall kann durch Wahl der (unbestimmten) Phase von U $c = 1$ erreicht werden. Im antilinearen bringt dies nichts; hingegen folgt aus $U^2 U = U U^2$, dass $c = \bar{c}$. Also

$$U^2 = \begin{cases} 1 , & \text{(linear),} \\ \pm 1 , & \text{(antilinear),} \end{cases}$$

wobei das Vorzeichen eindeutig durch S bestimmt ist. Insbesondere folgt aus $P^2 = T^2 = 1$

$$U_P^2 = 1 , \quad U_T^2 = c_T = \pm 1 .$$

Für ein Teilchen im \mathbb{R}^3 ohne weitere Freiheitsgrade (Spin), also $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$, erfüllen die Abbildungen

$$(U_P\psi)(\vec{x}) = -\psi(-\vec{x}) , \quad (U_T\psi)(\vec{x}) = \overline{\psi(\vec{x})}$$

alle obigen Vorgaben und zwar mit $c_T = +1$. Allgemein ist S eine **Symmetrie des Hamiltonoperators** H , falls für das entsprechende U gilt

$$U e^{-iHt/\hbar} = c(t) \begin{cases} e^{-iHt/\hbar} U , & \text{(linear),} \\ e^{+iHt/\hbar} U , & \text{(antilinear),} \end{cases} \quad (12.4)$$

mit $|c(t)| = 1$. Im Fall $S^2 = 1$ folgt daraus

$$c(t) = 1 , \quad (12.5)$$

(s. unten). Äquivalent zu (12.4) ist dann, und zwar in beiden Fällen,

$$[U, H] = 0 ,$$

wie man durch Ableitung nach t sieht.

Beweis von (12.5). Im linearen Fall folgt aus $(Ue^{-iHt/\hbar})U = U(e^{-iHt/\hbar}U)$ und (12.4), dass $c(t) = \overline{c(t)}$, also $c(t) = \pm 1$ und $c(t) = 1$ aus $c(0) = 1$ und Stetigkeit. Im antilinearen Fall multipliziert man (12.4) mit $(U^*)^2$; da $(U^*)^2 = \pm 1$ kann dies links von links und rechts von rechts geschehen: $U^*e^{-iHt/\hbar} = c(t)e^{iHt/\hbar}U^*$. Das Adjungierte davon (beachte (12.2)) ist (12.4) mit $c(t) \rightarrow \overline{c(t)}$. Es folgt $c(t) = 1$ wie vorher.

Auch für Systeme, bei welchen \vec{x}, \vec{p} keine Observablen sind, ist die Zeitumkehr antilinear. Denn $t \rightarrow -t$ als Symmetrie des Hamiltonoperators bedeutet hier sinngemäss $U_T e^{-iHt/\hbar} = e^{2i\alpha(t)/\hbar} e^{iHt/\hbar} U_T$. Wäre U_T linear, so würde folgen

$$U_T^*(H + \dot{\alpha})U_T = -(H + \dot{\alpha})$$

und insbesondere müsste das Spektrum bei geeigneter Verschiebung des Energienullpunkts symmetrisch bzgl. $\lambda \rightarrow -\lambda$ sein. Diese an sich schon restriktive Bedingung steht im Widerspruch zum Spektrum typischer Hamiltonoperatoren, welches nach unten beschränkt, nach oben aber unbeschränkt ist.

Kontinuierliche Symmetrien. Sei G eine zusammenhängende Lie-Gruppe. Eine **projektive Darstellung** von G in \mathcal{H} ist eine (umkehrbare) Symmetrie $S_g : \Pi(\mathcal{H}) \rightarrow \Pi(\mathcal{H})$ für $g \in G$ mit

$$S_g \circ S_h = S_{gh}, \quad S_g(\Pi) \text{ stetig in } g. \quad (12.6)$$

Nach dem Satz entspricht der Symmetrie S_g eine (bis auf eine Phase eindeutigen) Abbildung $U_g : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ mit

$$S_g(\Pi) = U_g \Pi U_g^*$$

und (12.6) bedeutet

$$U_g U_h = \omega(g, h) U_{gh}$$

mit $\omega(g, h) \in U(1) = \{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\}$. ($g \mapsto U_g$ heisst ebenfalls projektive Darstellung von G). Insbesondere ist U_g unitär (und nicht antiunitär), da jedes $g \in G$ von der Form $g = h^2$ ist. Durch Betrachtung von $U_f U_g U_h$ folgt

$$\omega(f, g)\omega(fg, h) = \omega(f, gh)\omega(g, h) \quad (12.7)$$

und speziell $\omega(g, e) = \omega(e, g) = \omega(e, e)$, (e : Einheit in G). Die Phase $\omega(g, h)$ ist nicht eindeutig: Unter der "Eichtransformation" $U_g \mapsto \lambda(g)U_g$ mit $\lambda(g) \in U(1)$ geht sie über in die äquivalente Phase

$$\omega'(g, h) = \omega(g, h)\lambda(g)\lambda(h)\lambda(gh)^{-1}. \quad (12.8)$$

Insbesondere ist U_g äquivalent zu einer (üblichen) Darstellung, falls $\omega'(g, h) \equiv 1$ erzielt werden kann.

Satz. Betrachte die Listen von zusammenhängenden Lie-Gruppen:

- (i) $SO(n)$, Euklidische Bewegungsgruppe, $\Lambda(4)$ (Lorentz-Gruppe), $\mathcal{P}(4)$ (inhomogene Lorentz-Gruppe);
- (ii) \mathbb{R} (bzgl. +), $SU(n)$, $Spin(n)$ ($n \geq 2$), universelle Überlagerungsgruppen aus (i).

In einer genügend kleinen Umgebung von $e \in G$ kann $\omega(g, h) = 1$ gewählt werden. Für die **einfach zusammenhängenden** unter ihnen (Liste (ii)) gilt dies global. Dann ist jede projektive Darstellung von G zu einer (üblichen) unitären Darstellung äquivalent.

Nicht in die Liste aufgenommen werden dürfen \mathbb{R}^n ($n \geq 2$), sowie die Galilei-Gruppe.

12.2 Drehungen

Unter einer Drehung $R \in \text{SO}(3)$, $\vec{x} \mapsto R\vec{x}$ eines quantenmechanischen Systems ändern sich seine Zustände $\psi \in \mathcal{H}$ gemäss $\psi \mapsto U(R)\psi$, wobei $U(R)$ eine **unitäre Darstellung** von $\text{SO}(3)$ ist, d.h.

$$\begin{aligned} U : \text{SO}(3) &\rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}) = \{\text{lineare Abbildungen } \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}\}, \\ R &\mapsto U(R) \end{aligned} \quad (12.9)$$

ein Homomorphismus ist,

$$U(R_1)U(R_2) = U(R_1R_2), \quad U(1) = \mathbb{1},$$

der unitär ist: $U(R)^{-1} = U(R)^*$.

Beispiel. Vgl. (9.49):

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3), \quad (U_0(R)\psi)(\vec{x}) = \psi(R^{-1}\vec{x}). \quad (12.10)$$

Bemerkung. Nach dem vorigen Abschnitt erfordert die Quantenmechanik bloss, dass die Darstellung der $\text{SO}(3)$ eine projektive ist. Wir übersehen dies zunächst, kommen aber später auf Seite 108 darauf zurück.

Infinitesimale Drehungen sind Elemente Ω des Tangentialraums an $\text{SO}(3)$ im Punkt $\mathbb{1}$,

$$\Omega = \left. \frac{d}{dt} R(t) \right|_{t=0}, \quad (12.11)$$

wobei $t \mapsto R(t)$ eine differenzierbare Kurve in $\text{SO}(3)$ durch $R(0) = \mathbb{1}$ ist. Mit Ω_1 und Ω_2 sind dann auch

$$\begin{aligned} \alpha_1\Omega_1 + \alpha_2\Omega_2 &= \left. \frac{d}{dt} R_1(\alpha_1 t) R_2(\alpha_2 t) \right|_{t=0}, \quad (\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}), \\ R\Omega_1 R^{-1} &= \left. \frac{d}{dt} R R_1(t) R^{-1} \right|_{t=0}, \quad (R \in \text{SO}(3)), \\ [\Omega_1, \Omega_2] &= \left. \frac{d}{dt} R_1(t) \Omega_2 R_1(t)^{-1} \right|_{t=0} \end{aligned} \quad (12.12)$$

infinitesimale Drehungen: Diese bilden mit der Klammer $[\cdot, \cdot]$ die **Lie-Algebra** $\mathfrak{so}(3)$ von $\text{SO}(3)$. Wegen

$$\begin{aligned} R^T(t)R(t) = \mathbb{1} &\quad \Rightarrow \quad \Omega^T + \Omega = 0, \\ \Omega^T + \Omega = 0 &\quad \Rightarrow \quad (e^{\Omega t})^T (e^{\Omega t}) = e^{(\Omega^T + \Omega)t} = \mathbb{1} \end{aligned}$$

besteht $\mathfrak{so}(3)$ aus allen antisymmetrischen 3×3 -Matrizen. Jede solche Matrix ist von der Form

$$\Omega(\vec{\omega}) = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_3 & \omega_2 \\ \omega_3 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{pmatrix},$$

d.h.

$$\Omega(\vec{\omega})\vec{x} = \vec{\omega} \wedge \vec{x} \quad (12.13)$$

mit $\vec{\omega} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3) \in \mathbb{R}^3$. So ist $\dim_{\mathbb{R}} \mathfrak{so}(3) = 3$, z.B. mit Basisvektoren

$$\Omega_i := \Omega(\vec{e}_i), \quad (i = 1, 2, 3),$$

wobei $\{\vec{e}_i\}$ die Standardbasis für \mathbb{R}^3 ist. Für $\vec{\omega} = \omega e$, ($|e| = 1$) ist $e^{\Omega(\vec{\omega})t} = R(e, \omega t)$ die Drehung um Achse e und Winkel ωt . Es gilt:

$$R\Omega(\vec{\omega})R^{-1} = \Omega(R\vec{\omega}), \quad (R \in \text{SO}(3)),$$

also $[\Omega(\vec{\omega}_1), \Omega(\vec{\omega}_2)] = \Omega(\vec{\omega}_1 \wedge \vec{\omega}_2)$ und insbesondere

$$[\Omega_1, \Omega_2] = \Omega_3 \quad (\text{und zyklisch}). \quad (12.14)$$

Jeder unitären Darstellung (12.9) der $\text{SO}(3)$ auf \mathcal{H} entspricht nun eine Darstellung der $\mathfrak{so}(3)$:

$$U(\Omega) := \left. \frac{d}{dt} U(R(t)) \right|_{t=0} \quad (12.15)$$

mit Ω , $R(t)$ wie in (12.11). (1. Genau: falls $\dim \mathcal{H} < \infty$; ansonsten ist $U(\Omega)$ ein unbeschränkter Operator mit $\psi \in D(U(\Omega))$ genau dann, falls $U(R(t))\psi$ differenzierbar ist. 2. $U(\Omega)$ ist eindeutig durch Ω bestimmt, obschon es $R(t)$ in (12.11) nicht ist.) Die Abbildung $\Omega \mapsto U(\Omega)$ ist nämlich ein Homomorphismus der $\mathfrak{so}(3)$:

$$\begin{aligned} U(\alpha_1\Omega_1 + \alpha_2\Omega_2) &= \alpha_1 U(\Omega_1) + \alpha_2 U(\Omega_2), & (\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}), \\ U([\Omega_1, \Omega_2]) &= [U(\Omega_1), U(\Omega_2)], \end{aligned} \quad (12.16)$$

wobei letzteres aus

$$U(R\Omega R^{-1}) = U(R)U(\Omega)U(R)^{-1}, \quad (R \in \text{SO}(3))$$

folgt. Dass die Darstellung unitär ist, bedeutet nun

$$U(\Omega)^* = -U(\Omega).$$

Für jedes $\vec{\omega} \in \mathbb{R}^3$ definieren wir den selbstadjungierten **Drehimpulsoperator**

$$M(\vec{\omega}) := iU(\Omega(\vec{\omega})), \quad (12.17)$$

also

$$M(\vec{\omega}) = \sum_{i=1}^3 M_i \omega_i,$$

wobei die Vertauschungsrelationen der $M_i = M(\vec{e}_i)$

$$[M_1, M_2] = iM_3 \quad (\text{und zyklisch}) \quad (12.18)$$

lauten.

12.3 Irreduzible Darstellungen

Eine Darstellung auf \mathcal{H} heisst **irreduzibel**, falls $\{0\}$, \mathcal{H} ihre einzigen invarianten Teilräume sind. Jede Darstellung zerfällt in eine direkte Summe irreduzibler, sodass es genügt, letztere zu klassifizieren. Wir tun dies für $\mathfrak{so}(3)$, denn damit erfasst man wegen (12.15) auch die von $\mathrm{SO}(3)$. Ferner setzen wir $\dim \mathcal{H} < \infty$ voraus (was für die Anwendungen genügt), nicht aber, dass die Darstellung unitär ist ($M_i = M_i^*$, $i = 1, 2, 3$). Sei

$$M_{\pm} = M_1 \pm iM_2 ,$$

(**Auf- und Absteigeoperatoren**), sodann (12.18) gleichbedeutend ist mit

$$[M_3, M_{\pm}] = \pm M_{\pm} , \quad [M_+, M_-] = 2M_3 . \quad (12.19)$$

Sei ψ ein Eigenvektor von M_3 :

$$M_3\psi = z\psi$$

für ein $z \in \mathbb{C}$. Damit ist auch $z \pm 1$ ein Eigenwert, sofern $M_{\pm}\psi \neq 0$:

$$M_3M_{\pm}\psi = M_{\pm}M_3\psi + [M_3, M_{\pm}]\psi = (z \pm 1)M_{\pm}\psi .$$

Da $\dim \mathcal{H} < \infty$, kann dieses Argument nicht beliebig wiederholt werden: Es gibt einen Eigenwert $j \in \mathbb{C}$ mit Eigenvektor ψ_j , derart dass

$$M_3\psi_j = j\psi_j , \quad M_+\psi_j = 0 .$$

Wir setzen induktiv

$$M_-\psi_m =: \psi_{m-1} \quad (12.20)$$

für $m = j, j-1, \dots$; somit ist

$$M_3\psi_m = m\psi_m . \quad (12.21)$$

Auch diese Folge muss abbrechen, d.h. es gibt ein $k \in \mathbb{N}$, sodass

$$\psi_{j-k} \neq 0 , \quad M_-\psi_{j-k} = 0 . \quad (12.22)$$

Falls

$$M_+\psi_m = \mu_m\psi_{m+1} \quad (12.23)$$

(was für $m = j$ zutrifft mit $\mu_j = 0$), so gilt auch

$$\begin{aligned} M_+\psi_{m-1} &= M_+M_-\psi_m = [M_+, M_-]\psi_m + M_-M_+\psi_m \\ &= (2m + \mu_m)\psi_m \equiv \mu_{m-1}\psi_m . \end{aligned}$$

Es folgt induktiv

$$\mu_m = j(j+1) - m(m+1) = (j-m)(j+1+m) .$$

Die Bedingung (12.22) besagt $\mu_{j-k-1} = 0$, also $2j = k$:

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots . \quad (12.24)$$

Jeder irreduziblen Darstellung entspricht damit ein solches j . Umgekehrt verifiziert man, dass M_3, M_\pm , durch (12.20, 12.21, 12.23) auf Basisvektoren ψ_j, \dots, ψ_{-j} definiert, (12.19) erfüllen und somit eine Darstellung \mathcal{D}_j der $\mathfrak{so}(3)$ liefern. Darin ist

$$\vec{M}^2 = M_1^2 + M_2^2 + M_3^2 = M_\pm M_\mp + M_3(M_3 \mp 1)$$

ein Vielfaches der 1:

$$\vec{M}^2 \psi = j(j+1)\psi, \quad (\psi \in \mathcal{D}_j), \quad (12.25)$$

denn dies gilt für $\psi = \psi_j$ und \vec{M}^2 vertauscht mit M_i , ($i = 1, 2, 3, +, -$).

Satz. Die endlich dimensionalen irreduziblen Darstellungen \mathcal{D}_j , der $\mathfrak{so}(3)$, s. (12.14) sind parametrisiert durch (12.24) mit $\dim \mathcal{D}_j = 2j + 1$. Es gilt (12.25).

Ist die Darstellung unitär, d.h. $M_i = M_i^*$, ($i = 1, 2, 3$), und damit $M_\pm^* = M_\mp$, so ist eine orthonormierte Basis (**Normalbasis**)

$$\{|j, m\rangle\}_{m=-j}^j$$

für \mathcal{D}_j durch

$$|j, j\rangle := \frac{\psi_j}{\|\psi_j\|}, \quad \sqrt{\mu_m}|j, m\rangle := M_-|j, m+1\rangle$$

gegeben. Diesbezüglich ist

$$\begin{aligned} \vec{M}^2|j, m\rangle &= j(j+1)|j, m\rangle, \\ M_3|j, m\rangle &= m|j, m\rangle, \\ M_\pm|j, m\rangle &= \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}|j, m \pm 1\rangle. \end{aligned} \quad (12.26)$$

Führt man umgekehrt ein Skalarprodukt ein, indem man die Basis $\{|j, m\rangle\}_{m=-j}^j$ als orthonormiert erklärt, so ist die Darstellung \mathcal{D}_j unitär.

Beispiele. 1. Die 1-dim. Darstellung \mathcal{D}_0 ist **trivial**: $M_i = 0$.

2. Die **fundamentale** Darstellung ist auf $\mathcal{H} = \mathbb{R}^3$ (besser: \mathbb{C}^3) mit $U(R) = R$, bzw. $U(\Omega) = \Omega$. Sie ist irreduzibel, hat Dimension 3 und ist somit isomorph zu \mathcal{D}_1 . Dasselbe gilt für die **adjungierte** Darstellung auf $\mathcal{H} = \mathfrak{so}(3)$ (besser: die Komplexifizierung $\mathfrak{so}(3)_\mathbb{C}$) mit, s. (12.12, 12.15),

$$U(R)\Omega = R\Omega R^{-1}, \quad U(\Omega_1)\Omega_2 = [\Omega_1, \Omega_2].$$

Für späteren Gebrauch sei hier die Normalbasis $\{|1, m\rangle\}_{m=-1}^1$ der Darstellung \mathcal{D}_1 auf \mathbb{C}^3 angeben:

$$|1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_1 + ie_2), \quad |1, 0\rangle = -e_3, \quad |1, -1\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(e_1 - ie_2) (= -\overline{|1, 1\rangle}). \quad (12.27)$$

Es ist nämlich $M_i \vec{x} = ie_i \wedge \vec{x}$, also $M_\pm \vec{x} = i(e_1 \pm ie_2) \wedge \vec{x}$. Offenbar genügt der erste Vektor $\langle 1, 1|1, 1\rangle = 1$ und $M_+|1, 1\rangle = 0$, und die restlichen beiden folgen durch Anwendung von M_- . Damit ist (12.26) erfüllt.

3. Der Raum \mathcal{Y}_l der Kugelfunktionen zum Index $l = 0, 1, 2, \dots$ (s. Anhang B) trägt die Darstellung \mathcal{D}_l , da $\vec{M}^2 = l(l+1)$ und $\dim \mathcal{Y}_l = 2l + 1$.

Bemerkungen. 1. Für jede Darstellung \mathcal{D}_j , die aus $SO(3)$ stammt, ist j ganzzahlig, d.h. $j = 0, 1, 2, \dots$, denn wegen $U(R(e_3, \varphi)) = e^{-iM_3\varphi}$ und $R(e_3, 2\pi) = 1$ ist $|j, m\rangle = e^{-2\pi im}|j, m\rangle$, also $m \in \mathbb{Z}$.

2. Es gibt keine ∞ -dimensionale unitäre irreduzible Darstellungen der $so(3)$, wohl aber nicht unitäre.

12.4 Einschub: Zusammengesetzte Quantensysteme

Wie baut man zwei Teilsysteme zu einem Gesamtsystem zusammen? Beispiel: der Hilbertraum $L^2(\mathbb{R}^6)$ der 2-Teilchen-Wellenfunktionen $\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ wird aufgespannt durch die (Tensor)produkte:

$$\psi^{(1)}(\vec{x}_1)\psi^{(2)}(\vec{x}_2) = (\psi^{(1)} \otimes \psi^{(2)})(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$$

von 1-Teilchen Wellenfunktionen $\psi^{(i)} \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Allgemein: der Hilbertraum des Gesamtsystems ist das **Tensorprodukt** der Hilberträume der Teilsysteme:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}. \quad (12.28)$$

Die Definition davon ist durch folgenden Satz gegeben:

Satz. Das Tensorprodukt $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ zweier Vektorräume, $\mathcal{H}^{(i)}$, ($i = 1, 2$), und eine Abbildung $\otimes : \mathcal{H}^{(1)} \times \mathcal{H}^{(2)} \rightarrow \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$ sind (bis auf Isomorphie) durch folgende Eigenschaft bestimmt: Zu jeder Bilinearform $b : \mathcal{H}^{(1)} \times \mathcal{H}^{(2)} \rightarrow \mathbb{C}$ gibt es genau eine Linearform $l : \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)} \rightarrow \mathbb{C}$ mit

$$l(v^{(1)} \otimes v^{(2)}) = b(v^{(1)}, v^{(2)}), \quad (v^{(i)} \in \mathcal{H}^{(i)}), \quad \text{d.h.}$$

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{H}^{(1)} \times \mathcal{H}^{(2)} & \xrightarrow{b} & \mathbb{C} \\ \downarrow \otimes & \nearrow l & \\ \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)} & & \end{array}$$

Sind $\mathcal{H}^{(i)}$ Hilberträume, so auch $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$, und zwar mit Skalarprodukt bestimmt durch

$$(v^{(1)} \otimes v^{(2)}, w^{(1)} \otimes w^{(2)}) = (v^{(1)}, w^{(1)}) \cdot (v^{(2)}, w^{(2)}).$$

Die konkrete Herstellung des Tensorprodukts ist: Sind $\{e_m^{(i)}\}_{m=1}^{n_i}$, ($n_i = \dim \mathcal{H}^{(i)}$), Basen für $\mathcal{H}^{(i)}$, so ist die **Produktbasis**

$$\{e_{m_1}^{(1)} \otimes e_{m_2}^{(2)}\}_{m_1, m_2=1}^{n_1, n_2}$$

eine für $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$.

Eine Motivation des Postulats (12.28) ist: Der Raum der Zustände des zusammengesetzten Systems enthält solche die durch Angabe der Zustände der Teilsysteme gegeben sind, $\psi^{(1)} \otimes \psi^{(2)}$, sowie auch deren linearen Superpositionen. Man beachte den Unterschied zu klassischen Systemen, wo es beim kartesischen Produkt $\Omega_1 \times \Omega_2$ der Zustandsräume der Teilsysteme bleibt. Der Unterschied ist weniger eklatant, wenn auf der klassischen Seite nicht Zustände, sondern Wahrscheinlichkeitsverteilungen über diesen herangezogen

werden. Solche Verteilungen werden ebenfalls über das Tensorprodukt aus denjenigen der Teilsystemen erzeugt: $M(\Omega_1 \times \Omega_2) = M(\Omega_1) \otimes M(\Omega_2)$, wobei $M(\Omega)$ der Raum der Masse über Ω bezeichnet. (Diese Tatsache widerspiegelt sich in der Möglichkeit von Korrelationen zwischen den Teilsystemen.) In Anbetracht der probabilistischen Interpretation der Quantenmechanik ist letzterer Vergleich eher berechtigt.

12.5 Addition von Drehimpulsen

Drehungen eines zusammengesetzten Systems sind durch die **Tensorprodukt-darstellung**

$$U(R) = U^{(1)}(R) \otimes U^{(2)}(R), \quad (R \in \text{SO}(3)) \quad (12.29)$$

gegeben, wobei das Tensorprodukt von Operatoren $A^{(i)}$ auf $\mathcal{H}^{(i)}$, ($i = 1, 2$), erklärt ist durch

$$(A^{(1)} \otimes A^{(2)})(\psi^{(1)} \otimes \psi^{(2)}) = A^{(1)}\psi^{(1)} \otimes A^{(2)}\psi^{(2)}$$

auf $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$. Aus (12.15) folgt für die Drehimpulsoperatoren (12.17)

$$M_i = M_i^{(1)} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes M_i^{(2)}, \quad (i = 1, 2, 3), \quad (12.30)$$

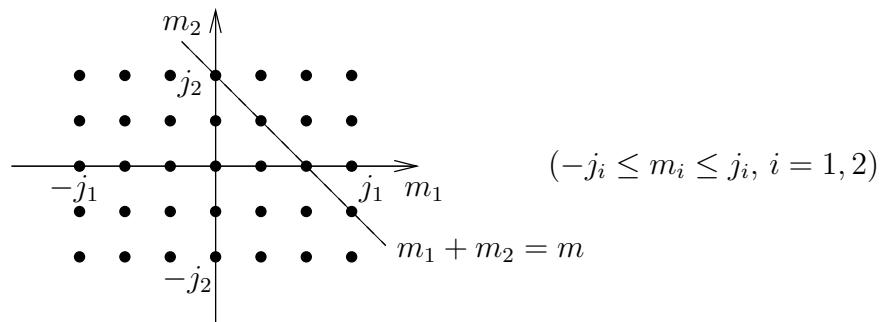
und dies soll auch die Definition des Produkts zweier Darstellungen der $\text{so}(3)$ sein, die nicht notwendigerweise von $\text{SO}(3)$ stammen.

Das Produkt von zwei irreduziblen Darstellungen \mathcal{D}_j zerfällt gemäss der **Clebsch-Gordan Reihe**

$$\mathcal{D}_{j_1} \otimes \mathcal{D}_{j_2} = \mathcal{D}_{j_1+j_2} \oplus \mathcal{D}_{j_1+j_2-1} \oplus \dots \oplus \mathcal{D}_{|j_1-j_2|}. \quad (12.31)$$

Beweis. Die Vektoren der Produktbasis sind Eigenvektoren von M_3 , vgl. (12.26, 12.30),

$$M_3|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = (m_1 + m_2)|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle.$$



Aus der Figur ersieht man: Die Vielfachheiten des Eigenwertes $m = m_1 + m_2$ ist

$$\begin{aligned} \text{für } m = j_1 + j_2 & : 1 \\ \text{für } m = j_1 + j_2 - 1 & : 2 \\ \vdots & \vdots \\ \text{für } m = |j_1 - j_2| & : 2 \min(j_1, j_2) + 1 \\ \text{für } m = |j_1 - j_2| - 1 & : 2 \min(j_1, j_2) + 1 \\ \vdots & \vdots \end{aligned}$$

falls $m \geq 0$ und gleich unter $m \rightarrow -m$. Daraus folgt: Keine irreduzible Darstellung \mathcal{D}_j mit $j > j_1 + j_2$ kommt in $\mathcal{D}_{j_1} \otimes \mathcal{D}_{j_2}$ vor; $\mathcal{D}_{j_1+j_2}$ kommt einmal vor und enthält je einen Eigenvektor mit Eigenwert mit $m = -j, \dots, j$. Der verbleibende Eigenvektor mit $m = j_1 + j_2 - 1$ bedingt eine Darstellung $\mathcal{D}_{j_1+j_2-1}$, und so weiter bis $\mathcal{D}_{|j_1-j_2|}$. \square

Bemerkung. Im Fall $j_1 = j_2 \equiv j$ kann man auf $\mathcal{D}_j \otimes \mathcal{D}_j$ die Vertauschung $P_{(12)} : \psi_1 \otimes \psi_2 \mapsto \psi_2 \otimes \psi_1$ definieren. Dann ist \mathcal{D}_{2j} in (12.31) symmetrisch unter Vertauschung ($P_{(12)}\psi = \psi$ für $\psi \in \mathcal{D}_{2j}$) und \mathcal{D}_{2j-1} antisymmetrisch; und so alternierend weiter. Dies folgt aus obigem Beweis, denn $|j, j\rangle \otimes |j, j\rangle \in \mathcal{D}_{2j}$ ist symmetrisch und dasselbe gilt für alle weiteren Vektoren in \mathcal{D}_{2j} , da $[P_{(12)}, M_-] = 0$. Für festes m zerlege man den Eigenraum $M_3\psi = m\psi$ in den symmetrischen und antisymmetrischen Unterraum. Die Figur zeigt: Bei $m \rightsquigarrow m - 1$ wachsen die Dimensionen der beiden Unterräume alternierend (bis zu $m = 0$). Die Behauptung folgt induktiv.

Beispiel. Es ist $\mathcal{D}_{\frac{1}{2}} \otimes \mathcal{D}_{\frac{1}{2}} \cong \mathcal{D}_1 \oplus \mathcal{D}_0$ mit Tensorproduktbasis $\{|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle\}$. Basisvektoren für die Teildarstellung \mathcal{D}_1 (**Tripletzustände**) sind $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \equiv |1, 1\rangle$, da $M_3|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = (\frac{1}{2} + \frac{1}{2})|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$, sowie die weiteren durch M_- erzeugten Vektoren:

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle), \\ |1, -1\rangle &= |-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle; \end{aligned} \tag{12.32}$$

für die Teildarstellung \mathcal{D}_0 (**Singlett**) einer zu (12.32) orthogonaler Vektor $|0, 0\rangle$ mit $M_3|0, 0\rangle = 0$:

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle). \tag{12.33}$$

Die Symmetrieeigenschaften von Triplet- und Singlettzuständen sind evident.

12.6 Die quantenmechanische Drehgruppe SU(2)

SU(2) ist die Gruppe der komplexen 2×2 -Matrizen V mit

$$V^*V = 1, \quad \det V = 1.$$

Infinitesimale Elemente

$$A = \left. \frac{dV(t)}{dt} \right|_{t=0} \tag{12.34}$$

($V(t)$ differenzierbar, $V(0) = 1$) sind komplexe Matrizen mit

$$A^* + A = 0, \quad \text{tr } A = 0,$$

(verwende $\log \det V(t) = \text{tr } \log V(t)$). Sie bilden die Lie-Algebra $\mathfrak{su}(2)$, versehen mit

$$[A_1, A_2] = A_1A_2 - A_2A_1,$$

vgl. (12.12). Wieder enthält sie nämlich mit A auch

$$A' = VAV^*, \quad (V \in \text{SU}(2)). \tag{12.35}$$

Die Elemente $A \in \mathfrak{su}(2)$ sind von der Form

$$A \equiv A(\vec{a}) = -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & -a_3 \end{pmatrix} = -\frac{i}{2} \sum_{j=1}^3 \sigma_j a_j \equiv -\frac{i}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{a}$$

($\vec{a} = (a_1, a_2, a_3) \in \mathbb{R}^3$) mit **Pauli-Matrizen**

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (12.36)$$

Insbesondere ist $\dim_{\mathbb{R}} \mathfrak{su}(2) = 3$ und eine Basis ist

$$A_j = -i \frac{\sigma_j}{2}, \quad (j = 1, 2, 3).$$

Die Matrizen (12.36) erfüllen

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbf{1} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k$$

($\varepsilon_{123} = +1$ und ε_{ijk} total antisymmetrisch), d.h.

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = (\vec{a} \cdot \vec{b}) \mathbf{1} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \wedge \vec{b}). \quad (12.37)$$

Damit ist

$$[A(\vec{a}), A(\vec{b})] = A(\vec{a} \wedge \vec{b}), \quad (12.38)$$

bzw.

$$[A_1, A_2] = A_3 \quad (\text{und zyklisch}).$$

Die Lie-Algebren $\mathfrak{su}(2)$ und $\mathfrak{so}(3)$, s. (12.14), sind isomorph über

$$R : \mathfrak{su}(2) \rightarrow \mathfrak{so}(3), \quad A(\vec{\omega}) \mapsto \Omega(\vec{\omega}), \quad (12.39)$$

d.h. $A_j \mapsto \Omega_j$, ($j = 1, 2, 3$). Die Abbildung $R : A \mapsto \Omega$ ist durch

$$[A, A(\vec{a})] = A(\Omega \vec{a}) \quad (12.40)$$

charakterisiert, wie man mit $A = A(\vec{\omega})$, $\Omega = \Omega(\vec{\omega})$ aus (12.13, 12.38) sieht. Die irreduziblen Darstellungen der $\mathfrak{su}(2)$ sind damit die \mathcal{D}_j aus dem Satz auf Seite 102.

Jede Darstellung $U(V)$ der $SU(2)$ liefert eine der $\mathfrak{su}(2)$ durch, vgl. (12.15, 12.16),

$$U(A) = \left. \frac{d}{dt} U(V(t)) \right|_{t=0} \quad (12.41)$$

mit $A, V(t)$ wie in (12.34). Diese bestimmt $U(V)$ wegen

$$U(e^{At}) = e^{U(A)t}.$$

Beispiele. 1. Die fundamentale Darstellung der $SU(2)$ ist auf $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ mit $U(V) = V$, bzw. $U(A) = A$. Sie ist irreduzibel, hat Dimension 2 und ist somit isomorph zu $\mathcal{D}_{\frac{1}{2}}$.

2. Die adjungierte Darstellung der $SU(2)$ auf $\mathcal{H} = \mathfrak{su}(2)$ (oder $\mathcal{H} = \mathfrak{su}(2)_{\mathbb{C}}$) ist, s. (12.35),

$$U(V)A = VAV^{-1}, \quad (V \in SU(2)).$$

Als Darstellung der $\mathfrak{su}(2)$, $U(A)B = [A, B]$, ist sie wegen (12.38) isomorph zur fundamentalen Darstellung \mathcal{D}_1 der $\mathfrak{so}(3)$. Insbesondere hat sie Dimension 3.

Im Unterschied zum Fall von $\mathrm{SO}(3)$ gilt hier auch die Umkehrung von (12.41):

Satz. Jeder Darstellung \mathcal{D}_j , ($j = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots$), der $\mathfrak{su}(2)$ entspricht eine, U_j , der $\mathrm{SU}(2)$. Dabei gilt

$$U_j(-V) = (-1)^{2j} U_j(V) . \quad (12.42)$$

Beweis: induktiv nach j . Die Behauptung gilt für $j = 0, \frac{1}{2}$. Gilt sie für j , so ist $U(V) := U_j(V) \otimes V$ eine Darstellung auf $\mathcal{D}_j \otimes \mathcal{D}_{\frac{1}{2}} = \mathcal{D}_{j-\frac{1}{2}} \oplus \mathcal{D}_{j+\frac{1}{2}}$, s. (12.31), mit $U(-V) = (-1)^{2j+1} U(V)$. Dies gilt auch für die irreduzible Teildarstellung $\mathcal{D}_{j+\frac{1}{2}}$. \square

Notation. Die entsprechenden Darstellungsmatrizen bzgl. der Normalbasis bezeichnen wir mit $U_{m'm}^{(j)}(V)$:

$$U(V)|jm\rangle = \sum_{m'=-j}^j U_{m'm}^{(j)}(V)|jm'\rangle , \quad (V \in \mathrm{SU}(2)) \quad (12.43)$$

(Normalform der Darstellung).

Nach dem Satz lässt sich die Darstellung (12.39) zu einer von $\mathrm{SU}(2)$ heben. So erscheint $\mathrm{SO}(3)$ als Darstellung der $\mathrm{SU}(2)$:

$$R : \mathrm{SU}(2) \rightarrow \mathrm{SO}(3) , \quad V \mapsto R = R(V) \quad (12.44)$$

mit

$$V = e^{A(\vec{a})t} \mapsto R = e^{\Omega(\vec{a})t} . \quad (12.45)$$

Die Abbildung ist charakterisiert durch

$$VA(\vec{a})V^{-1} = A(R\vec{a}) , \quad (12.46)$$

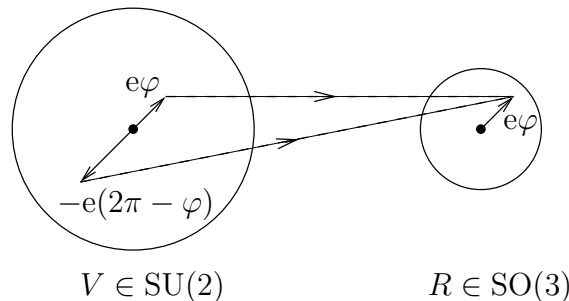
denn infinitesimal ist dies (12.40), vgl. Bsp. 2. Der Homomorphismus (12.44) ist surjektiv (da jedes $R \in \mathrm{SO}(3)$ von der Form (12.45) ist), nicht aber injektiv, da

$$R(V) = R(-V) , \quad (12.47)$$

s. (12.46); ja es ist $VAV^{-1} = A$ für alle $A \in \mathfrak{su}(2)$ genau dann, wenn $V = \pm 1$. Also:

$$\mathrm{SO}(3) \cong \mathrm{SU}(2)/\{\pm 1\} . \quad (12.48)$$

Die Zuordnung (12.44) kann anhand zweier Vollkugeln der Radien 2π und π veranschaulicht werden:



- Durch $R = R(e, \varphi) = e^{\Omega(e\varphi)}$ ist jede Drehung eindeutig durch einen Punkt $e\varphi$ der Vollkugel vom Radius π , $\{e\varphi \mid |e| = 1, 0 \leq \varphi \leq \pi\}$, gegeben, bis auf die Identifikation der Diametralpunkte $(\pm e, \pi)$ wegen

$$R(e, \varphi) = R(-e, 2\pi - \varphi)$$

für $\varphi = \pi$. Insbesondere ist $SO(3)$ nicht einfach zusammenhängend. Eine zweimal durchlaufene, nicht zusammenziehbare Schleife wird es aber. (Genauer: die 1. Homotopiegruppe ist $\pi_1(SO(3)) = \mathbb{Z} \bmod 2$.)

- Wegen $(\vec{\sigma} \cdot e)^2 = \mathbf{1}$ für $|e| = 1$ ist durch Summation der Exponentialreihe

$$e^{A(e\varphi)} = e^{-\frac{i}{2}(\vec{\sigma} \cdot e)\varphi} = \mathbf{1} \cos \frac{\varphi}{2} - i(\vec{\sigma} \cdot e) \sin \frac{\varphi}{2};$$

damit ist jedes $V = e^{A(\vec{a})} \in SU(2)$ eindeutig durch einen Punkt $e\varphi$ der Vollkugel vom Radius 2π gegeben, bis auf die Identifikation aller Punkte des Randes wegen $e^{A(2\pi e)} = -\mathbf{1}$. Insbesondere ist $SU(2)$ einfach zusammenhängend.

Bemerkung. Mit (12.47, 12.42) liefert jede Darstellung \mathcal{D}_j mit j halbzahlig, d.h. $j = 1/2, 3/2, \dots$, eine projektive Darstellung der $SO(3)$. Umgekehrt sind die \mathcal{D}_j 's alle solche Darstellungen der $SO(3)$, denn sie stiften ebensolche der $SU(2)$, also nach dem Satz auf Seite 98 Darstellungen im engeren Sinn.

12.7 Der Spin des Elektrons

In einer Theorie ohne Spin wäre ein Atom mit festem Kern (bei $\vec{x} = 0$) und N Elektronen in einem äusseren homogenen Magnetfeld (in 3-Richtung $\vec{B} = B\mathbf{e}_3$) beschrieben durch

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} (\vec{p}_i - (e/c)\vec{A}(\vec{x}_i))^2 + V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N), \quad \vec{A}(\vec{x}) = \frac{1}{2}(\vec{B} \wedge \vec{x}). \quad (12.49)$$

Hier ist m die Masse eines Elektrons und V das Coulomb-Potential der Wechselwirkung der Elektronen zum Kern sowie untereinander. Es ist rotationssymmetrisch:

$$V(R\vec{x}_1, \dots, R\vec{x}_N) = V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N), \quad (R \in SO(3)).$$

Behält man nur die in B linearen Glieder, so ist

$$(\vec{p} - (e/c)\vec{A})^2 = \vec{p}^2 - (e/c)(\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + (e/c)^2 \vec{A}^2 = \vec{p}^2 - (e/c)\vec{B} \cdot (\vec{x} \wedge \vec{p}) + O(B^2),$$

da $\vec{p} \cdot \vec{A} = (1/2)\varepsilon_{ijk}p_i B_j x_k = (1/2)\varepsilon_{ijk}B_j x_k p_i = \vec{A} \cdot \vec{p}$, und folglich

$$H = H_0 + \mu_B B M_3, \quad (\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc} = \text{Bohrsches Magneton}), \quad (12.50)$$

wobei H_0 das ungestörte Atom beschreibt und

$$\sum_{i=1}^N \vec{x}_i \wedge \vec{p}_i = \vec{L} =: \hbar \vec{M} \quad (12.51)$$

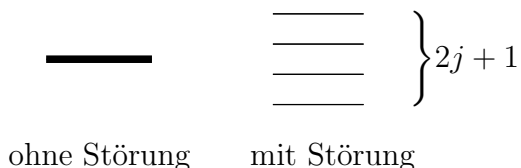
der Gesamtdrehimpuls ist. Im Unterschied zu H ist H_0 invariant unter Drehungen

$$(U_0(R)\psi)(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = \psi(R\vec{x}_1, \dots, R\vec{x}_N), \quad (R \in \text{SO}(3)).$$

Sei E_0 ein endlich entarteter Eigenwert von H_0 . Der zugehörige Eigenraum ist ebenfalls invariant unter U_0 und trägt somit eine Darstellung der $\text{SO}(3)$. In der Regel ist diese irreduzibel, denn die Wechselwirkungen zwischen den Elektronen heben allfällige Entartungen zwischen verschiedenen Darstellungen auf vgl. Abschnitt 11.1. Jeder solche "einfache Term" E_0 von H_0 trägt eine Drehimpulsquantenzahl $j = 0, 1, \dots$ und die natürliche Vielfachheit $2j + 1$. Diese Entartung kann erst durch eine nicht rotationssymmetrische Störung des Hamiltonoperators aufgehoben werden, wie z.B. jene in (12.50). In diesem Fall ist

$$H|j, m\rangle = (E_0 + \mu_B B m)|j, m\rangle, \quad (m = j, \dots, -j), \quad (12.52)$$

wobei $|j, m\rangle$ die durch \mathcal{D}_j gestiftete Basis des Eigenraums von E_0 ist. Demnach wäre die Aufspaltung $\Delta E_m = \mu_B B m$ proportional zu B und ansonsten universell, d.h. unabhängig von N und E_0 .



Aus der Beobachtung der Spektren (**Zeeman-Effekt**) findet man hingegen

- $2j + 1$ gerade, also j halbganz, für N ungerade;
- die Aufspaltung ist nicht universell.

Die theoretische Möglichkeit, dass die Drehimpulsquantenzahl j eines Systems halbzahlig ist, wird offenbar durch das Elektron verwirklicht. Zu ihrer Implementierung soll der Hilbertraum eines einzelnen Elektrons nicht $L^2(\mathbb{R}^3)$, sondern (Pauli 1927)

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$$

sein. Darauf wirkt $V \in \text{SU}(2)$ gemäss

$$U(V) = U_0(R(V)) \otimes V,$$

wobei $U_0(R)$ die Darstellung von $R \in \text{SO}(3)$, s. (12.10), in der Theorie ohne Spin ist und $R(V)$ der Abbildung (12.44) entspricht. Der Freiheitsgrad mit Hilbertraum \mathbb{C}^2 und Darstellung $\mathcal{D}_{\frac{1}{2}}$ heisst **Spin**

$$\vec{S} = \hbar \vec{M} \quad (12.53)$$

des Elektrons. In der (fundamentalen) Darstellung $\mathcal{D}_{\frac{1}{2}}$ ist $M_j = iU(A_j)$ gegeben durch

$$M_j = \frac{\sigma_j}{2}.$$

Damit ist

$$M_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad M_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

und die Basis (12.26) ist gerade die Standardbasis für \mathbb{C}^2 ,

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |e_3\rangle, \quad |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv | - e_3\rangle : \quad (12.54)$$

Spin nach oben, bzw. unten bezüglich der Quantisierungsrichtung e_3 . Eigenbasen für M_1 bzw. M_2 sind

$$\begin{aligned} M_1 : \quad |e_1\rangle &= \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, & | - e_1\rangle &= \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}; \\ M_2 : \quad |e_2\rangle &= \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, & | - e_2\rangle &= \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Der **Gesamtdrehimpuls** des Elektrons ist nun, vgl. (12.30),

$$\vec{J} = \vec{L} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \vec{S}, \quad (12.55)$$

wobei $\vec{L} = \vec{x} \wedge \vec{p}$ neu als Bahndrehimpuls bezeichnet wird.

Für die Zustände $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2$ gibt es verschiedene Schreibweisen. In der Spinorschreibweise wird $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}^2, \vec{x} \mapsto \psi(\vec{x})$ aufgefasst als 2-komponentige Wellenfunktion von \vec{x} mit dem Skalarprodukt

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int d^3x (\psi(\vec{x}), \varphi(\vec{x}))_{\mathbb{C}^2}.$$

In der Basis (12.54) wird man also $\psi(\vec{x})$ darstellen durch den Spaltenvektor

$$\psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \psi_{+1/2}(\vec{x}) \\ \psi_{-1/2}(\vec{x}) \end{pmatrix}, \quad \text{bzw.} \quad \psi(\vec{x}) = \psi_{+1/2}(\vec{x})|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \psi_{-1/2}(\vec{x})|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle,$$

auf den die Spinoperatoren in offensichtlicher Weise wirken. Alternativ lässt sich ψ auffassen als komplexe Funktion von zwei Variablen \vec{x}, s :

$$\psi : \mathbb{R}^3 \times \{-1/2, 1/2\} \rightarrow \mathbb{C}, \quad (\vec{x}, s) \mapsto \psi(\vec{x}, s), \quad (12.56)$$

mit dem Skalarprodukt

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \sum_{s=\pm 1/2} \int d^3x \overline{\psi(\vec{x}, s)} \varphi(\vec{x}, s).$$

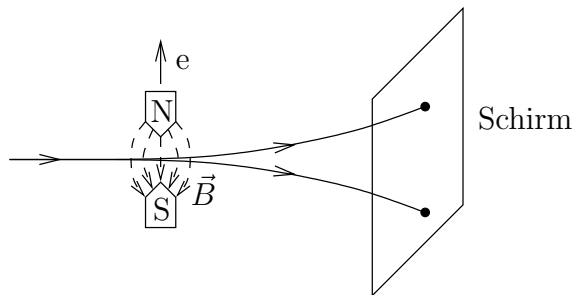
Der Zusammenhang mit der Spinorschreibweise ist $\psi(\vec{x}, s) = \psi_s(\vec{x})$, und die Bedeutung der Spinvariablen s erhellt aus

$$(S_3\psi)(\vec{x}, s) = \hbar s \psi(\vec{x}, s).$$

Zur Beschreibung der Zustände mehrerer Elektronen wird sich diese zweite Form besser eignen.

12.8 Einschub: Gemischte Zustände

Ein Stern-Gerlach Analysator lenkt durch ein inhomogenes Magnetfeld \vec{B} (neutrale) Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen je nach Wert von $\vec{S} \cdot \mathbf{e}$ unterschiedlich ab; er bildet zusammen mit dem Schirm die Messapparatur für diese Observable. Ihre Spektraldarstellung ist



$$\vec{S} \cdot \mathbf{e} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \mathbf{e} = \frac{\hbar}{2} P_+ - \frac{\hbar}{2} P_-$$

mit

$$P_{\pm} = |\pm e\rangle \langle \pm e| = P_{\pm}^* = P_{\pm}^2, \quad (12.57)$$

$$\vec{\sigma} \cdot \mathbf{e} |\pm e\rangle = \pm |\pm e\rangle. \quad (12.58)$$

Teilchen im Zustand $|\psi\rangle$ treten nach der Wahrscheinlichkeitsinterpretation auf Seite 75 an je einer den beiden Stellen des Schirms mit Wahrscheinlichkeiten

$$w_{\pm} = \langle \psi | P_{\pm} | \psi \rangle = |\langle \pm e | \psi \rangle|^2 \quad (12.59)$$

auf. Dasselbe Ergebnis (für dieses Experiment) würde ein Strahl liefern, in dem Teilchen mit Zuständen $|+e\rangle$ und $|-e\rangle$ in den Anteilen w_+ bzw. w_- vorhanden wären. Es wäre aber falsch, eine solche **statistische Mischung** mit irgend einem (reinen) Zustand $|\psi\rangle$ zu identifizieren, denn andere Experimente vermögen sie zu unterscheiden. Beispiel: Besteht die Mischung je zur Hälfte aus Zuständen $|+e_3\rangle$ und $|-e_3\rangle$, so betragen die beiden Wahrscheinlichkeiten

$$w_{\pm} = \frac{1}{2} |\langle \pm e | e_3 \rangle|^2 + \frac{1}{2} |\langle \pm e | -e_3 \rangle|^2 = \frac{1}{2} \langle \pm e | \pm e \rangle = \frac{1}{2},$$

unabhängig von der Richtung \mathbf{e} des Analysators. Für jeden reinen Zustand $|\psi\rangle$ ist aber (12.59) von \mathbf{e} abhängig.

Statistische Mischungen, die der klassischen Vorstellung von Wahrscheinlichkeit als unvollständige Information über den reinen Zustand des Einzelfalls entsprechen, gibt es offenbar auch in der Quantenmechanik (**gemischte Zustände**). Sie sind gegeben durch **Dichtematrizen**, d.h. durch Operatoren $P : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ mit

$$P = P^* \geq 0, \quad (12.60)$$

$$\text{tr } P = 1. \quad (12.61)$$

Bei derer Spektraldarstellung

$$P = \sum_k w_k |\varphi_k\rangle \langle \varphi_k|$$

gilt wegen (12.60, 12.61)

$$w_k \geq 0, \quad \sum_k w_k = 1,$$

was ihre Interpretation stiftet: P ist eine Mischung der reinen Zustände $|\varphi_k\rangle$ mit Wahrscheinlichkeiten w_k . Reine Zustände entsprechen dem Spezialfall, wo ein $w_k = 1$ ist und

die restlichen = 0 sind, d.h. wo $P = P^2$ ein Projektor ist (der wegen (12.61) 1-dimensional ist). Der Erwartungswert der Observablen A im gemischten Zustand P ist

$$\langle A \rangle = \text{tr} PA = \sum_k w_k \text{tr} (|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|A) = \sum_k w_k \langle\varphi_k|A|\varphi_k\rangle ,$$

d.h. gleich dem gewichteten Mittelwert der Erwartungswerte von A in den beteiligten reinen Zuständen $|\varphi_k\rangle$. Gemischte Zustände können “konvex kombiniert” werden: mit P_i , ($i = 1, 2$), ist

$$P = w_1 P_1 + w_2 P_2 \quad (12.62)$$

($w_i \geq 0, w_1 + w_2 = 1$) auch einer, vgl. (12.60, 12.61). Falls Systeme in den Zuständen P_i vorliegen, so präpariert man P dadurch, dass man zufällig mit Wahrscheinlichkeiten w_i eines aus der beiden Sorten wählt.

Sie nun $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, wie im Fall eines Spins $\frac{1}{2}$. Der reelle Vektorraum

$$\{\text{komplexe } 2 \times 2\text{-Matrizen } P \mid P = P^*\}$$

ist 4-dimensional. Eine bezüglich des Skalarprodukts

$$(P_1, P_2) = \frac{1}{2} \text{tr} (P_1 P_2)$$

orthonormierte Basis ist

$$\sigma_0 \equiv \mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} , \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Damit ist

$$P = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^3 p_i \sigma_i = \frac{1}{2} (p_0 \mathbf{1} + \vec{p} \cdot \vec{\sigma}) \quad (12.63)$$

mit

$$p_i = \text{tr} (\sigma_i P) . \quad (12.64)$$

Satz. Die Menge der gemischten Zustände P über $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ entspricht der Vollkugel $\{\vec{p} \in \mathbb{R}^3 \mid |\vec{p}| \leq 1\}$ (**Bloch-Kugel**) mittels

$$P = \frac{1}{2} (\mathbf{1} + \vec{p} \cdot \vec{\sigma}) . \quad (12.65)$$

Dabei gilt

- Der konvexen Kombination (12.62) entspricht

$$\vec{p} = w_1 \vec{p}_1 + w_2 \vec{p}_2 . \quad (12.66)$$

- Die reinen Zustände $P = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ bilden die Kugel­fläche $\{\vec{p} \mid |\vec{p}| = 1\}$.
- Zwei reine Zustände $|\varphi_i\rangle$, ($i = 1, 2$), sind orthogonal genau dann, falls \vec{p}_1, \vec{p}_2 Diagonalpunkte sind.

Beweis. Wegen $(\vec{p} \cdot \vec{\sigma})^2 = \vec{p}^2$, s. (12.37), und $\text{tr}(\vec{p} \cdot \vec{\sigma}) = 0$ sind die beiden Eigenwerte von $\vec{p} \cdot \vec{\sigma}$ gleich $\pm|\vec{p}|$, die von P also $\frac{1}{2}(p_0 \pm |\vec{p}|)$. Die Bedingungen (12.60, 12.61) bedeuten somit $p_0 = 1$ und $\frac{1}{2}(1 \pm |\vec{p}|) \geq 0$, d.h. (12.65) mit $|\vec{p}| \leq 1$. Gleichung (12.66) ist klar. Rein ist der Zustand, falls $\frac{1}{2}(1 \pm |\vec{p}|) = 0, 1$, d.h. falls $|\vec{p}| = 1$. Falls zwei davon orthogonal sind, so bilden sie eine orthonormierte Basis:

$$\mathbf{1} = |\varphi_1\rangle\langle\varphi_1| + |\varphi_2\rangle\langle\varphi_2| = P_1 + P_2 .$$

Mit $\text{tr} \sigma_i = 0$, ($i = 1, 2, 3$), und (12.64) folgt $0 = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$. □

Bemerkung. Im Fall eines Spins $\frac{1}{2}$ sind die Zustände $|\pm e\rangle$, wo der Spin bzgl. e nach oben bzw. unten zeigt, vgl. (12.58), identisch mit den reinen Zuständen (12.65) mit $\vec{p} = \pm e$:

$$|\pm e\rangle\langle\pm e| = \frac{1}{2}(1 \pm e \cdot \vec{\sigma}) . \tag{12.67}$$

Beide Seiten sind nämlich gleich den spektralen Projektoren P_{\pm} , s. (12.57), von $\vec{\sigma} \cdot e$.

13 Zurück zu den Grundlagen

13.1 Das EPR-Paradoxon

(Einstein, Podolsky, Rosen, Phys. Rev. **47** (1935), 77)

Die Quantenmechanik liefert nur ausnahmsweise sichere Aussagen (d.h. solche mit Wahrscheinlichkeit 1) für das Eintreffen eines Ereignisses, wie z.B. einen bestimmten Messwert einer Observablen. Ist dies überwindbar?

In dieser Stossrichtung formulierten EPR die Frage: “Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?” Im Folgenden ist (i, ii) ihre Präzisierung der Frage, (iii) die Antwort (nein) und (iv) die Begründung:

- (i) Ein (hinreichendes) Kriterium für ein **Element physikalischer Wirklichkeit** ist: “If, without in any way disturbing a system, we can predict with certainty (i.e., with probability equal to unity) the value of a physical quantity, then there exists an **element of physical reality** corresponding to this physical quantity.” Der Begriff ist unabhängig von einer bestimmten Theorie und die Voraussage kann z.B. durch Erfahrung geschehen.
- (ii) Ein (notwendiges) Kriterium, damit eine physikalische Theorie **vollständig** (complete) ist, lautet: “Every element of physical reality must have a counterpart in the physical theory.”
- (iii) “While we have thus shown that the wave function **does not provide** a complete description of the physical reality, we left open the question of whether or not such a description exists. We believe, however, that such a theory is possible.”
- (iv) (Variante von Bohm) Zwei Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen, (1) und (2), befinden sich zusammen im Spin 0-Zustand

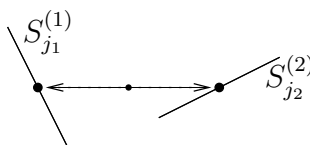
$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_3, -e_3\rangle - | -e_3, e_3\rangle), \tag{13.1}$$

der sich nach (12.33) bzgl. aller Quantisierungsrichtungen gleich schreibt (**EPR--Paar**). (Ein solcher Zustand ist eine der Zerfallsmöglichkeiten des Pions, $\pi \rightarrow e^- e^+$, in ein Elektron und ein Positron.) Die Teilchen laufen danach frei auseinander, was ihren Spinzustand (13.1) nicht ändert. Je eine Spinkomponente $S_j^{(i)}$, ($j = 1, 2, 3$), der beiden Teilchen, ($i = 1, 2$), wird dann gemessen. Die beiden Messungen seien raumartig getrennte Ereignisse, sodass nach der SRT eine kausale Beeinflussung ausgeschlossen ist. Die Messung von $S_j^{(1)}$ und $S_j^{(2)}$ (gleiche Richtung j) ergibt entweder $(\hbar/2, -\hbar/2)$ oder $(-\hbar/2, \hbar/2)$, je mit Wahrscheinlichkeit 1/2. Also **kann** $S_1^{(1)}$

vorher:



nachher:



vorausgesagt werden, ohne das Teilchen (1) zu stören, nämlich durch Messung von $S_1^{(2)}$. Nach (i, ii) hat $S_1^{(1)}$ einen bestimmten Wert, der zwar ohne Messung von $S_1^{(2)}$ niemandem bekannt ist. Ebenso für $S_2^{(1)}$ und $S_3^{(1)}$. Nach der QM hat eine Observable im Zustand $|\psi\rangle$ nur dann einen bestimmten Wert, wenn $|\psi\rangle$ ein Eigenvektor davon ist, vgl. (9.23). Ein gemeinsamer Eigenvektor für $S_j^{(1)}$, ($j = 1, 2, 3$), ist aber wegen $[S_1^{(1)}, S_2^{(1)}] = i\hbar S_3^{(1)}$ unmöglich!

Bohr (Phys. Rev. **48** (1935) 696) räumt zwar ein, dass “there is no question of a mechanical disturbance of the system under investigation”. Jede der drei Spinkomponenten $S_j^{(1)}$ kann nicht, sondern **könnte** bloss vorausgesagt werden. Die blosse Möglichkeit (i) einer Vorhersage reicht ihm zur Begründung eines Elements physikalischer Wirklichkeit nicht aus: “There is essentially the question of an influence on the very conditions which define the possible types of predictions regarding the future behavior of the system. Since these conditions constitute an inherent element of the description of any phenomenon to which the term “physical reality” can be properly attached, we see that the argumentation of the mentioned authors does not justify their conclusion that quantum-mechanical description is essentially incomplete.” Einstein liess sich umgekehrt davon nicht überzeugen.

Eine im Sinne von EPR vollständige (und erhoffte) Theorie würde sich rechtfertigen, falls ihre Voraussagen

- (a) die der QM reproduzieren, oder
- (b) sofern sie von denen der QM abweichen, durch das Experiment bestätigt werden.

In den nächsten beiden Abschnitten werden wir sehen, dass beides im Wesentlichen nicht zutrifft.

13.2 Verborgene Variablen

Eine Theorie “verborgener Variablen” ist eine, wo in jedem Zustand des Systems (reiner Zustand) die Werte aller Observablen festgelegt sind; es ist aber zulässig, dass der einzelne Zustand nicht bekannt ist (oder es gar nicht sein kann), sondern bloss eine Wahrscheinlichkeitsverteilung (gemischter Zustand). Die QM ist keine solche Theorie, da der Zustand $|\psi\rangle$ nur die Verteilung der Werte einer Observablen bei Messung bestimmt. Kann die QM durch eine Theorie verborgener Variablen reproduziert werden? Diese Frage kann auf mindestens zwei Arten präzisiert werden. Zunächst die schwächere Auslegung:

(V-) Es gibt einen Raum Ω (Wahrscheinlichkeitsraum; $\omega \in \Omega$ ist die verborgene Variable) und zwei Abbildungen:

$$\text{Zustände } \psi \quad \mapsto \quad \text{Wahrscheinlichkeitsverteilungen } d\rho_\psi(\omega) \text{ auf } \Omega, \quad (13.2)$$

$$\text{Observablen } A = A^* \quad \mapsto \quad \text{Funktionen } A(\omega) \text{ auf } \Omega \quad (13.3)$$

($A(\omega)$ ist der Wert von A in ω), sodass die quantenmechanischen Wahrscheinlichkeiten für die Messwerte wiedergegeben werden: Ist $A = \sum_i a_i P_i$ ihre Spektralzerlegung, so gilt

$$\langle \psi | P_i | \psi \rangle = \rho_\psi(\{\omega \in \Omega \mid A(\omega) = a_i\}). \quad (13.4)$$

Insbesondere ist der Erwartungswert von A

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \int_{\Omega} A(\omega) d\rho_{\psi}(\omega) . \quad (13.5)$$

Beispiel. (Bell 1964) Verborgene Variablen für ein Spin $\frac{1}{2}$, $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$:

$$\begin{aligned} \Omega &= \{ \omega = (|\psi\rangle, \lambda) \mid \psi \in \mathbb{C}^2, \|\psi\| = 1, \lambda \in [-1, 1] \} , \\ d\rho_{\psi}(\omega) &= \frac{d\lambda}{2} \quad \text{auf } \omega = (|\psi\rangle, \lambda) . \end{aligned}$$

Für die Observablen $\vec{\sigma} \cdot \mathbf{e}$, ($|\mathbf{e}| = 1$), sei

$$(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{e})(\omega) = \begin{cases} 1 , & \text{falls } \lambda \in [-\langle \psi | \vec{\sigma} \cdot \mathbf{e} | \psi \rangle, 1] , \\ -1 , & \text{falls } \lambda \in [-1, -\langle \psi | \vec{\sigma} \cdot \mathbf{e} | \psi \rangle] . \end{cases} \quad (13.6)$$

Damit ist

$$\rho_{\psi}(\{ \omega \in \Omega \mid (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{e})(\omega) = \pm 1 \}) = \frac{1 \pm \langle \psi | \vec{\sigma} \cdot \mathbf{e} | \psi \rangle}{2} ,$$

in Übereinstimmung mit $\langle \psi | P_{\pm} | \psi \rangle$, s. (12.67). (Ähnliche Beispiele gibt es auch für $\dim \mathcal{H} > 2$.) In Zuständen $\omega = (|\psi\rangle, \lambda)$ mit

$$\lambda \geq \max(-\langle \psi | \vec{\sigma} \cdot \mathbf{e} | \psi \rangle, -\langle \psi | \vec{\sigma} \cdot (-\mathbf{e}) | \psi \rangle) = |\langle \psi | \vec{\sigma} \cdot \mathbf{e} | \psi \rangle|$$

gilt sowohl $(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{e})(\omega) = +1$ wie auch $(\vec{\sigma} \cdot (-\mathbf{e}))(\omega) = +1$. Dies ist unbefriedigend, denn letzteres ist physikalisch dasselbe wie $(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{e})(\omega) = -1$, was mit ersterem inkompatibel ist. Anders gesagt: Der Stern-Gerlach Analysator auf Seite 111 bestimmt nicht nur den Wert der Observablen $\vec{\sigma} \cdot \mathbf{e}$, sondern auch der Ereignisse $P_{\pm} = |\pm \mathbf{e}\rangle \langle \pm \mathbf{e}|$, ja nach (9.13) jeder Observablen, die bzgl. $|\pm \mathbf{e}\rangle$ diagonal ist. Wir verschärfen deshalb (V-) zu

(V+) Sei Ω und (13.2) wie vorher. Statt (13.3) sei eine Abbildung

$$\text{Projektoren } P = P^2 = P^* \quad \mapsto \quad \text{Teilmengen } P \subset \Omega \quad (13.7)$$

gegeben, sodass

$$\langle \psi | P | \psi \rangle = \rho_{\psi}(P) , \quad (13.8)$$

$$\sum_i P_i = \mathbf{1} \quad \implies \quad \{P_i\} \text{ ist eine Partition von } \Omega . \quad (13.9)$$

Bemerkungen. 1. Dies impliziert (V-): Falls $A = \sum_i a_i P_i$ (Spektralzerlegung), folgen (13.4, 13.5) mit

$$A(\omega) = \sum_i a_i \chi_{P_i}(\omega) \quad (13.10)$$

(χ_P : charakteristische Funktion von $P \subset \Omega$).

2. Mit $f(A) = \sum_i f(a_i)P_i$ folgt aus (13.10)

$$f(A)(\omega) = f(A(\omega)) . \quad (13.11)$$

3. Gilt $[A_1, A_2] = 0$, so folgt

$$(A_1A_2)(\omega) = A_1(\omega)A_2(\omega) . \quad (13.12)$$

Dies, weil A_1, A_2 bzgl. einer selben orthonormierten Basis diagonal sind, und damit von der Form $A_i = f_i(A)$, ($i = 1, 2$), für einen geeigneten Operator $A = A^*$ mit derselben Eigenschaft.

Beispiel (Fortsetzung). Sei \tilde{S} eine ‘‘Kugelhälfte’’, d.h. für jedes e , ($|e| = 1$), sei entweder $e \in \tilde{S}$ oder $-e \in \tilde{S}$. Die Abbildung (13.7) sei $0 \mapsto \emptyset$, $\mathbf{1} \mapsto \Omega$ und, für 1-dimensionale Projektoren $P = P(e) = (1 + \vec{\sigma} \cdot e)/2$, vgl. (13.6),

$$P = \begin{cases} [-\langle \psi | \vec{\sigma} \cdot e | \psi \rangle, 1] , & (e \in \tilde{S}) , \\ [-1, \langle \psi | \vec{\sigma} \cdot e | \psi \rangle) , & (-e \in \tilde{S}) . \end{cases}$$

Gleichung (13.8) ist erfüllt. Die nicht trivialen Zerlegungen $\sum_i P_i = \mathbf{1}$ sind die in zwei 1-dimensionalen Projektoren, $P(e) + P(-e) = \mathbf{1}$, ($e \in \tilde{S}$). Die entsprechenden Intervalle $[-\langle \psi | \vec{\sigma} \cdot e | \psi \rangle, 1]$, $[-1, \langle \psi | \vec{\sigma} \cdot (-e) | \psi \rangle)$ erfüllen (13.9). Somit ist (V+) für ein Spin $\frac{1}{2}$ möglich.

Das letzte Argument beruht darauf, dass es für $\dim \mathcal{H} = 2$ zu jeder Richtung nur **eine** orthogonale gibt.

Satz. (Kochen, Specker 1967) Sei $\dim \mathcal{H} \geq 3$. Dann ist (V+) nicht möglich. (Es genügt, die Abbildung (13.7) für endlich viele, geeignete P 's zu postulieren.)

Beweis. (nach Mermin 1990, für $\dim \mathcal{H} = 8$ und somit auch für $\dim \mathcal{H} \geq 8$). Sei $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ der Hilbertraum dreier Spin $\frac{1}{2}$. Betrachte die selbstadjungierten Operatoren

$$\sigma_i^{(1)} = \sigma_i \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} , \quad \sigma_i^{(2)} = \mathbf{1} \otimes \sigma_i \otimes \mathbf{1} , \quad \sigma_i^{(3)} = \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \sigma_i , \quad (i = 1, 2, 3) ,$$

die Produkte

$$Q_1 = \sigma_1^{(1)} \sigma_2^{(2)} \sigma_2^{(3)} , \quad Q_2 = \sigma_2^{(1)} \sigma_1^{(2)} \sigma_2^{(3)} , \quad Q_3 = \sigma_2^{(1)} \sigma_2^{(2)} \sigma_1^{(3)} , \quad (13.13)$$

sowie das Produkt davon

$$Q_1 Q_2 Q_3 = -\sigma_1^{(1)} \sigma_1^{(2)} \sigma_1^{(3)} . \quad (13.14)$$

Es gilt

$$[\sigma_a^{(i)}, \sigma_b^{(j)}] = 0 , \quad (i \neq j) , \quad (13.15)$$

$$[Q_i, Q_j] = 0 ; \quad (13.16)$$

so ist z.B. $Q_1 Q_2 = \sigma_1^{(1)} \sigma_2^{(1)} \sigma_2^{(2)} \sigma_1^{(2)} (\sigma_2^{(3)})^2 = (-1)^2 \sigma_2^{(1)} \sigma_1^{(1)} \sigma_1^{(2)} \sigma_2^{(2)} = Q_2 Q_1$, woraus auch (13.14) folgt. Was folgt daraus für die verborgenen Variablen? Da die Faktoren in (13.13) kommutieren, ist nach (13.12)

$$Q_1(\omega) = \sigma_1^{(1)}(\omega) \sigma_2^{(2)}(\omega) \sigma_2^{(3)}(\omega) , \quad (13.17)$$

usw.; da die in $Q_1Q_2Q_3$ ebenfalls, folgt

$$(Q_1Q_2Q_3)(\omega) = Q_1(\omega)Q_2(\omega)Q_3(\omega) = \sigma_1^{(1)}(\omega)\sigma_1^{(2)}(\omega)\sigma_1^{(3)}(\omega) = (\sigma_1^{(1)}\sigma_1^{(2)}\sigma_1^{(3)})(\omega) , \quad (13.18)$$

wobei $(\sigma_2^{(i)}(\omega))^2 = (\sigma_2^{(i)})^2(\omega) = \mathbb{1}(\omega) = 1$, s. (13.11, 13.8), verwendet wurde. Da $Q_1Q_2Q_3 \neq 0$ gibt es Zustände $|\psi\rangle$ mit $\langle\psi|Q_1Q_2Q_3|\psi\rangle \neq 0$. Nach (13.14) ist

$$\langle\psi|Q_1Q_2Q_3|\psi\rangle = -\langle\psi|\sigma_1^{(1)}\sigma_1^{(2)}\sigma_1^{(3)}|\psi\rangle , \quad (13.19)$$

nach (13.5, 13.18) aber auch

$$\langle\psi|Q_1Q_2Q_3|\psi\rangle = +\langle\psi|\sigma_1^{(1)}\sigma_1^{(2)}\sigma_1^{(3)}|\psi\rangle :$$

Widerspruch! □

In der QM kommutieren Observablen A, B , die verschiedenen Teilsystemen entsprechen, womit AB auch selbstadjungiert ist: $(AB)^* = B^*A^* = BA = AB$. Im Rahmen von (V-) stellen wir für solche Fälle die Lokalitätshypothese:

(L) Gehören die Observablen auch noch zu raumartig getrennten Messungen, so ist

$$(AB)(\omega) = A(\omega)B(\omega) . \quad (13.20)$$

Bemerkungen. 1. Im Rahmen von (V+) ist (L) wegen (13.12) von selbst erfüllt.

2. (L) ist naheliegend, wenn der Zustand ω eines zusammengesetzten Systems durch die seiner Teile gegeben sein soll, $\omega = (\omega_1, \omega_2)$.

Satz. (Bell 1964) Die QM ist unvereinbar mit (V-, L).

Beweis. Wir betrachten drei Teilchen im Spinzustand

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_3\rangle \otimes |e_3\rangle \otimes |e_3\rangle - | - e_3\rangle \otimes | - e_3\rangle \otimes | - e_3\rangle) .$$

die anfänglich räumlich zusammen, später aber entfernt sind, wie bei EPR. Die Messungen je einer Spinkomponente der 3 Teilchen können dann raumartig getrennt sein. Es ist:

$$Q_i|\psi\rangle = |\psi\rangle , \quad (i = 1, 2, 3) , \quad (13.21)$$

denn wegen $\sigma_1|\pm e_3\rangle = |\mp e_3\rangle, \sigma_2|\pm e_3\rangle = \pm i|\mp e_3\rangle$ ist z.B.

$$Q_1|\pm e_3\rangle \otimes |\pm e_3\rangle \otimes |\pm e_3\rangle = (\pm i)^2|\mp e_3\rangle \otimes |\mp e_3\rangle \otimes |\mp e_3\rangle .$$

Auf der Seite der verborgenen Variablen gilt weiterhin (13.17), nun wegen (L). Nach (13.4) ist $\sigma_i(\omega) = \pm 1$, (ρ_ψ -fast sicher), also gilt anstelle von (13.18) immerhin noch

$$Q_1(\omega)Q_2(\omega)Q_3(\omega) = (\sigma_1^{(1)}\sigma_1^{(2)}\sigma_1^{(3)})(\omega) .$$

Aus (13.21, 13.4) folgt $Q_i(\omega) = 1$ fast sicher. Damit ist $\langle\psi|\sigma_1^{(1)}\sigma_1^{(2)}\sigma_1^{(3)}|\psi\rangle = 1$ nach (13.5), aber auch $= -1$: Widerspruch. □

13.3 Die Bellsche Ungleichung

Die Bellsche Ungleichung bezieht sich nicht auf die QM, sondern gilt für beliebige **lokale** Theorien verborgener Variablen: Zustände (bzw. Observablen) sind Wahrscheinlichkeitsmasse $d\rho(\cdot)$ (bzw. Funktionen $A(\cdot)$) auf $\Omega \ni \omega$; Erwartungswerte sind durch

$$\langle A \rangle_\rho = \int_\Omega A(\omega) d\rho(\omega)$$

gegeben. (Übereinstimmung mit der QM, s. (13.5), wird hier nicht verlangt). Ferner soll Lokalität gelten: entsprechen A, B raumartig getrennten Messungen, so soll für AB (“zuerst B , dann A messen”) (13.20) gelten.

Satz. (Bell 1964, Clauser et al. 1969) Seien A, A' von B wie von B' raumartig getrennt, alle mit Werten ± 1 . Dann gilt

$$|\langle AB \rangle + \langle A'B \rangle + \langle AB' \rangle - \langle A'B' \rangle| \leq 2. \quad (13.22)$$

Beweis. Es ist

$$-2 \leq (A(\omega) + A'(\omega))B(\omega) + (A(\omega) - A'(\omega))B'(\omega) \leq 2,$$

und zwar ist der Ausdruck $= \pm 2$; denn

$$\begin{aligned} A(\omega) = A'(\omega) &\implies A(\omega) + A'(\omega) = \pm 2, & A(\omega) - A'(\omega) = 0, \\ A(\omega) = -A'(\omega) &\implies A(\omega) + A'(\omega) = 0, & A(\omega) - A'(\omega) = \pm 2. \end{aligned}$$

Bildung des Mittelwerts liefert (13.22) □

Die Messung der Spinkomponente $S_{\vec{n}} \equiv \frac{\hbar}{2} \sigma_{\vec{n}}$ in Richtung \vec{n} , ($|\vec{n}| = 1$), eines Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchens ergibt stets

$$\sigma_{\vec{n}}(\omega) = \pm 1.$$

Bei zwei Teilchen, 1,2, sollen, raumartig getrennt, die Komponenten

$$A = \sigma_{\vec{n}_1}^{(1)}, \quad A' = \sigma_{\vec{n}'_1}^{(1)}, \quad B = \sigma_{\vec{n}_2}^{(2)}, \quad B' = \sigma_{\vec{n}'_2}^{(2)}$$

gemessen werden (vgl. Fig. Seite 114). Bezeichnen wir die **Korrelationen** mit

$$\mathcal{C}(\vec{n}_1, \vec{n}_2) := \langle \sigma_{\vec{n}_1}^{(1)} \cdot \sigma_{\vec{n}_2}^{(2)} \rangle,$$

so folgt aus (13.22)

$$|\mathcal{C}(\vec{n}_1, \vec{n}_2) + \mathcal{C}(\vec{n}'_1, \vec{n}_2) + \mathcal{C}(\vec{n}_1, \vec{n}'_2) - \mathcal{C}(\vec{n}'_1, \vec{n}'_2)| \leq 2. \quad (13.23)$$

Diese Vorhersage soll nun mit der QM verglichen werden, wo $\sigma_{\vec{n}}^{(i)} = \vec{\sigma}^{(i)} \cdot \vec{n}$. Der Zustand $|\psi\rangle$ sei das EPR Paar (13.1), für welches

$$(\vec{\sigma}^{(1)} + \vec{\sigma}^{(2)}) \cdot \vec{v} |\psi\rangle = 0, \quad \langle \psi | \vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{v} | \psi \rangle = 0, \quad (\vec{v} \in \mathbb{R}^3)$$

gelten. Damit ist

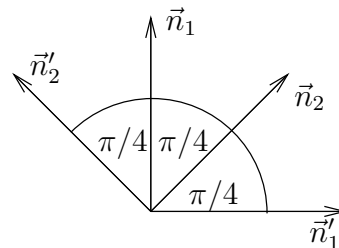
$$\mathcal{C}(\vec{n}_1, \vec{n}_2) = \langle \psi | (\vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{n}_1) (\vec{\sigma}^{(2)} \cdot \vec{n}_2) | \psi \rangle = - \langle \psi | \underbrace{(\vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{n}_1) (\vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{n}_2)}_{\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2 \mathbf{1} + i \vec{\sigma}^{(1)} \cdot (\vec{n}_1 \wedge \vec{n}_2)} | \psi \rangle = -\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2.$$

Die Ungleichung (13.23), die nun

$$|\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2 + \vec{n}'_1 \cdot \vec{n}_2 + \vec{n}_1 \cdot \vec{n}'_2 - \vec{n}'_1 \cdot \vec{n}'_2| \leq 2 \quad (13.24)$$

(alle $|\vec{n}_i| = |\vec{n}'_i| = 1$) lautet, ist aber **verletzt**: Für die Vektoren der Figur ist

$$\begin{aligned} \vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2 &= \vec{n}'_1 \cdot \vec{n}_2 = \vec{n}_1 \cdot \vec{n}'_2 = \cos \frac{\pi}{4} = \frac{\sqrt{2}}{2}, \\ \vec{n}'_1 \cdot \vec{n}'_2 &= \cos \frac{3\pi}{4} = -\frac{\sqrt{2}}{2}, \end{aligned}$$



die linke Seite in (13.24) also $= 2\sqrt{2} > 2$.

Dies beweist nocheinmal den Satz auf Seite 118: die QM kann nicht durch eine lokale Theorie verborgener Variablen reproduziert werden.

Das Experiment von Aspect et al. (1982, anhand von Photonen statt Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen) bestätigt die Verletzung der Bellschen Ungleichung (13.23).

13.4 Quanten Teleportation

(Bennet et al. 1993)

Auf Seite 75 wurden die Wahrscheinlichkeiten verschiedener Ergebnisse einer Messung gemäss QM angegeben. Was aber ist der Zustand **nach** der Messung? Dazu das (umstrittene) Postulat der “Reduktion des Wellenpakets” (s. Übungen): Infolge einer Messung mit Zerlegung $\mathbf{1} = \sum_i P_i$ geht der Zustand $|\psi\rangle = \sum_i P_i |\psi\rangle$ über in $P_i |\psi\rangle / \|P_i |\psi\rangle\|$ mit Wahrscheinlichkeit $\langle \psi | P_i | \psi \rangle$.

Alice und Bob besitzen je ein Spin $\frac{1}{2}$ -Teilchen eines EPR Paares (Teilchen 1 und 2)

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_3, -e_3\rangle - |-e_3, e_3\rangle). \quad (13.25)$$

Alice soll den unbekanntem Zustand $|\varphi\rangle$ eines weiteren Spins (Teilchen 0) an Bob übermitteln, und zwar unter Verwendung bloss klassischer Information, d.h. endlich vieler Bits. Dies ist (scheinbar) unmöglich: (a) Der Transport des Teilchens würde die Übertragung des Zustands $|\varphi\rangle$ (QM Information) beinhalten. (b) Alice ist es nicht möglich, $|\varphi\rangle$ zu messen, sondern nur, ob das Teilchen $|+e\rangle$ oder $|-e\rangle$ ist. Das Erfassen dieser klassischer Information würde $|\varphi\rangle$ zerstören.

Mit Hilfe von (13.25) können Alice und Bob den Zustand des Teilchens 0 auf das Teilchen 2 übertragen (**Teleportation**). Der Zustand aller drei Teilchen ist

$$|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi, e_3\rangle \otimes |-e_3\rangle - |\varphi, -e_3\rangle \otimes |e_3\rangle).$$

Alice kann Messungen an ihren Teilchen 0 und 1 vornehmen, wie z.B. die mit Zerlegung

$$\mathbf{1} = \sum_{i=1}^4 P_i \equiv \sum_{i=1}^4 P_i \otimes \mathbf{1},$$

wobei $P_i = |\chi_i\rangle\langle\chi_i|$ die Projektoren auf die orthonormierten Zustände

$$\begin{aligned} |\chi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_3, -e_3\rangle - | -e_3, e_3\rangle) , \\ |\chi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_3, -e_3\rangle + | -e_3, e_3\rangle) , \\ |\chi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_3, e_3\rangle - | -e_3, -e_3\rangle) , \\ |\chi_4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_3, e_3\rangle + | -e_3, -e_3\rangle) \end{aligned}$$

sind. Die Zustände nach der Messung entnimmt man aus

$$\begin{aligned} P_1|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle &= \frac{1}{2}|\chi_1\rangle \otimes (-| -e_3\rangle\langle -e_3|\varphi\rangle - |e_3\rangle\langle e_3|\varphi\rangle) , \\ P_2|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle &= \frac{1}{2}|\chi_2\rangle \otimes (| -e_3\rangle\langle -e_3|\varphi\rangle - |e_3\rangle\langle e_3|\varphi\rangle) , \\ P_3|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle &= \frac{1}{2}|\chi_3\rangle \otimes (| -e_3\rangle\langle e_3|\varphi\rangle + |e_3\rangle\langle -e_3|\varphi\rangle) , \\ P_4|\varphi\rangle \otimes |\psi\rangle &= \frac{1}{2}|\chi_4\rangle \otimes (| -e_3\rangle\langle e_3|\varphi\rangle - |e_3\rangle\langle -e_3|\varphi\rangle) . \end{aligned}$$

Alice übermittelt das Ergebnis $i = 1, 2, 3, 4$ (2 Bits) an Bob. Je nach Ergebnis wendet er folgende unitäre Operatoren auf sein Teilchen 2 an (realisierbar durch Spinpräzession, vgl. Übungen) und erhält dessen Zustand:

Alices Ergebnis	Bobs Operation	Zustand
1	$\mathbb{1}_2$	$- \varphi\rangle$
2	σ_3	$- \varphi\rangle$
3	σ_1	$ \varphi\rangle$
4	σ_2	$-i \varphi\rangle$

In allen Fällen ist der Zustand $|\varphi\rangle$ (Phase ohne Bedeutung) wiederhergestellt!

Quanten Teleportation ist mit Photonen experimentell realisiert worden (Zeilinger et al. 1997).

Formelsammlung zur Vektoranalysis

(\vec{v} : Vektorfeld; v : Skalarfeld)

- Vektoridentitäten:

$$\operatorname{rot} \vec{\nabla} v = 0$$

$$\operatorname{div} \operatorname{rot} \vec{v} = 0$$

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \vec{v} = \vec{\nabla}(\operatorname{div} \vec{v}) - \Delta \vec{v}$$

$$(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} = \nabla(v^2/2) - \vec{v} \wedge \operatorname{rot} \vec{v}$$

- Produktregeln:

$$\operatorname{div}(\rho \vec{v}) = \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \rho + \rho \operatorname{div} \vec{v}$$

$$\operatorname{rot}(\rho \vec{v}) = \vec{\nabla} \rho \wedge \vec{v} + \rho \operatorname{rot} \vec{v}$$

$$\vec{\nabla}(\vec{v} \cdot \vec{w}) = (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{w} + (\vec{w} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} + \vec{v} \wedge \operatorname{rot} \vec{w} + \vec{w} \wedge \operatorname{rot} \vec{v}$$

$$\operatorname{div}(\vec{v} \wedge \vec{w}) = \vec{w} \cdot \operatorname{rot} \vec{v} - \vec{v} \cdot \operatorname{rot} \vec{w}$$

$$\operatorname{rot}(\vec{v} \wedge \vec{w}) = (\operatorname{div} \vec{w}) \vec{v} - (\operatorname{div} \vec{v}) \vec{w} + (\vec{w} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} - (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{w}$$

- Sätze:

$$\int_V \operatorname{div} \vec{v} d^3x = \int_{\partial V} \vec{v} \cdot d\vec{\sigma} \quad (\text{Gauss})$$

$$\int_S \operatorname{rot} \vec{v} \cdot d\vec{\sigma} = \int_{\partial S} \vec{v} \cdot d\vec{s} \quad (\text{Stokes})$$

- Korollare:

$$\int_V \vec{\nabla} v d^3x = \int_{\partial V} v d\vec{\sigma}$$

$$\int_V \operatorname{rot} \vec{v} d^3x = \int_{\partial V} d\vec{\sigma} \wedge \vec{v}$$

$$\int_V (u \Delta v + \vec{\nabla} u \cdot \vec{\nabla} v) d^3x = \int_{\partial V} u \vec{\nabla} v \cdot d\vec{\sigma}$$

$$\int_V (u \Delta v - v \Delta u) d^3x = \int_{\partial V} (u \vec{\nabla} v - v \vec{\nabla} u) \cdot d\vec{\sigma}$$

$$\int_S d\vec{\sigma} \wedge \vec{\nabla} u = \int_{\partial S} u d\vec{s}$$

- Kettenregeln:

$$(\vec{P} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3; \quad \tau : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R})$$

$$\operatorname{div} \vec{P}(\tau(\vec{x})) = \dot{\vec{P}}(\tau(\vec{x})) \cdot \vec{\nabla} \tau(\vec{x})$$

$$\operatorname{rot} \vec{P}(\tau(\vec{x})) = \vec{\nabla} \tau(\vec{x}) \wedge \dot{\vec{P}}(\tau(\vec{x}))$$

$$(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{P}(\tau(\vec{x})) = (\vec{u} \cdot \vec{\nabla} \tau(\vec{x})) \cdot \dot{\vec{P}}(\tau(\vec{x}))$$

A Anhang: Distributionen

Sei $\mathcal{D} = C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ der Raum der beliebig oft differenzierbaren (komplexwertigen) Funktionen auf \mathbb{R}^d mit kompaktem Träger. $\varphi \in \mathcal{D}$ heisst **Testfunktion**.

Definition (Konvergenz in \mathcal{D}). Seien $\varphi_n, (n = 1, 2, \dots), \varphi \in \mathcal{D}$. $\varphi_n \xrightarrow{\mathcal{D}} \varphi$ bedeutet: es gibt eine kompakte Menge $K \subset \mathbb{R}^d$ mit $\text{supp } \varphi_n, \text{supp } \varphi \subset K$, sodass

$$\sup_x |\partial_1^{m_1} \partial_2^{m_2} \cdots \partial_d^{m_d} (\varphi_n(x) - \varphi(x))| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

für jede Wahl von m_1, \dots, m_d .

Bemerkung. \mathcal{D} ist vollständig, d.h. jede Cauchy-Folge in \mathcal{D} hat einen Grenzwert in \mathcal{D} .

Definition. Eine **Distribution** (oder verallgemeinerte Funktion) F ist ein stetiges lineares Funktional über \mathcal{D}

$$\begin{aligned} F : \mathcal{D} &\longrightarrow \mathbb{C}, & \varphi &\longmapsto F(\varphi), \\ F(\lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2) &= \lambda_1 F(\varphi_1) + \lambda_2 F(\varphi_2), & (\lambda_i \in \mathbb{C}, \varphi_i \in \mathcal{D}), \\ F(\varphi_n) &\longrightarrow F(\varphi), & \text{falls } \varphi_n \xrightarrow{\mathcal{D}} \varphi. \end{aligned}$$

$\mathcal{D}' := \{F \mid F \text{ ist eine Distribution}\}$ ist der topologische Dualraum von \mathcal{D} .

Definition (Konvergenz in \mathcal{D}').

$$F_n \xrightarrow{\mathcal{D}'} F,$$

falls $F_n(\varphi) \rightarrow F(\varphi)$ für jedes $\varphi \in \mathcal{D}$.

Bemerkung. \mathcal{D}' ist vollständig.

Beispiele:

- 1) Sei $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ lokal integrierbar. Zugehörige Distribution:

$$F_f(\varphi) = \int dx f(x) \varphi(x).$$

$F_f \in \mathcal{D}'$, denn

$$|F_f(\varphi)| \leq \left(\int_K dx |f(x)| \right) \sup_x |\varphi(x)|,$$

falls $\text{supp } \varphi \in K$.

- 2) (Delta-Distribution)

$$\delta(\varphi) := \varphi(0).$$

$\delta \in \mathcal{D}'$, denn $|\delta(\varphi)| \leq \sup_x |\varphi(x)|$. Es gibt aber keine (lokal integrierbare) Funktion f , so dass $\delta = F_f$. Ansonsten, wähle $r > 0$ beliebig klein und $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ mit $|\psi| \leq 1$, $\psi(0) = 1$ und $\text{supp } \psi \subset B_r = \{x \mid |x| \leq r\}$. Setze dann

$$\varphi(x) = \underbrace{\psi(x)\varphi(x)}_{=: \varphi_1(x)} + \underbrace{(1 - \psi(x))\varphi(x)}_{=: \varphi_2(x)},$$

sodass $\text{supp } \varphi_1 \subset B_r$ und $\varphi_2(0) = 0$. Dann wäre $\delta(\varphi) = \delta(\varphi_1) + \delta(\varphi_2)$ mit $\delta(\varphi_2) = 0$ und

$$|\delta(\varphi_1)| = |F_f(\varphi_1)| \leq \underbrace{\left(\int_{B_r} dx |f(x)| \right)}_{\xrightarrow{r \downarrow 0} 0} \sup_x |\varphi(x)| ,$$

also $\delta = 0$, was aber nicht zutrifft. Trotzdem schreibt man

$$\delta(\varphi) = \int \delta(x) \varphi(x) dx ,$$

im Wissen, dass es $\delta(x)$ als Funktion gar nicht gibt.

- 3) Sei f_n lokal integrierbar mit $\int f_n(x) dx = 1$, $\int |f_n(x)| dx \leq C$, $\text{supp } f_n \subset B_{1/n}$. Dann ist

$$F_{f_n} \xrightarrow{\mathcal{D}'} \delta .$$

Für jedes $\varphi \in \mathcal{D}$ ist nämlich

$$\begin{aligned} F_{f_n}(\varphi) - \delta(\varphi) &= \int dx f_n(x) \varphi(x) - \varphi(0) = \int dx f_n(x) (\varphi(x) - \varphi(0)) , \\ |F_{f_n}(\varphi) - \delta(\varphi)| &\leq \underbrace{\left(\int dx |f_n(x)| \right)}_{\leq C} \underbrace{\sup_{x \in B_{1/n}} |\varphi(x) - \varphi(0)|}_{\rightarrow 0} . \end{aligned}$$

- 4) Sei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ stetig differenzierbar. Zu $\partial_i f$ gehört die Distribution

$$F_{\partial_i f}(\varphi) = \int dx (\partial_i f(x)) \varphi(x) = - \int dx f(x) \partial_i \varphi(x) = -F_f(\partial_i \varphi)$$

nach partieller Integration in x_i . Dies veranlasst uns zur

Definition (Ableitung einer Distribution). Für $F \in \mathcal{D}'$ ist $\partial_i F$ erklärt durch

$$(\partial_i F)(\varphi) := -F(\partial_i \varphi) .$$

Bemerkung. $\partial_i F \in \mathcal{D}'$, denn trivialerweise

$$\varphi_n \xrightarrow{\mathcal{D}} \varphi \implies \partial_i \varphi_n \xrightarrow{\mathcal{D}} \partial_i \varphi .$$

F hat Ableitungen aller Ordnungen.

- 4) (nochmals): $\partial_i F_f = F_{\partial_i f}$. Deshalb werden f und F_f identifiziert.

- 5) $(\partial_i \delta)(\varphi) = -\delta(\partial_i \varphi) = -(\partial_i \varphi)(0)$.

6) ($d = 1$) Die Heaviside-Funktion ist definiert als

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & (x \geq 0), \\ 0, & (x < 0) \end{cases}$$

und es entspricht ihr die Distribution $\theta(\varphi) = \int_0^\infty dx \varphi(x)$. Es gilt

$$\theta' = \delta,$$

denn $\theta'(\varphi) = -\theta(\varphi') = -\int_0^\infty dx \varphi'(x) = \varphi(0) = \delta(\varphi)$.

7) ($d = 3$)

$$\Delta \frac{1}{4\pi|\vec{x}|} = -\delta(\vec{x})$$

(s. (1.11)) und als Übung das \vec{E} -Feld eines Dipols:

$$\frac{1}{4\pi} \vec{\nabla} \left(\vec{p} \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{|\vec{x}|} \right) = \underbrace{\frac{3(\vec{p} \cdot \vec{x})\vec{x} - \vec{x}^2 \vec{p}}{4\pi|\vec{x}|^5}}_{\vec{f}(\vec{x})} - \frac{1}{3} \delta(\vec{x}) \vec{p},$$

wobei \vec{f} als die Distribution

$$\vec{F}(\varphi) = \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int_{|\vec{x}| \geq \epsilon} \vec{f}(\vec{x}) \varphi(\vec{x}) d^3x$$

aufzufassen ist.

Für weitergehende Fragen (Fouriertransformation, Faltung, usw.) sind z.T. andere Testfunktionenräume, bzw. Distributionenräume besser geeignet (z.B. die Schwartzschen Räume \mathcal{S} , bzw. \mathcal{S}'). Wir verweisen auf die

Literatur

- L. Schwartz, Théorie des distributions I, II
- M. Reed, B. Simon, Methods of modern mathematical physics I, II
- R.O. Richtmyer, Principles of advanced mathematical physics I

B Anhang: Tensorkalkül

Vektoren

V reeller Vektorraum mit $\dim V = n$. In einer Basis e_1, \dots, e_n für V hat jeder Vektor $a \in V$ die Entwicklung

$$a = a^\mu e_\mu, \quad (\text{B.1})$$

(Summenkonvention: über jeden oben und unten stehenden gleichen Index wird von 1 bis n summiert). Bei einer Basistransformation

$$\bar{e}_\mu = \Lambda_\mu^\nu e_\nu \quad (\text{B.2})$$

transformieren Vektorkomponenten linear:

$$\bar{a}^\mu = \Lambda^\mu_\nu a^\nu,$$

wobei wegen

$$\bar{a}^\mu \bar{e}_\mu = \Lambda^\mu_\nu \Lambda_\mu^\sigma a^\nu e_\sigma = a^\nu e_\nu$$

gelten muss

$$\Lambda^\mu_\nu \Lambda_\mu^\sigma = \delta_\nu^\sigma, \quad (\text{B.3})$$

d.h. die Matrix (Λ_μ^ν) ist die transponierte Inverse der Matrix (Λ^μ_ν) , was wir allein durch die verschiedene Stellung der Indizes zum Ausdruck bringen.

Linearformen

V^* = Dualraum von V : seine Elemente sind reelle lineare Funktionen $f : V \rightarrow \mathbb{R}$, $a \mapsto f(a)$ (Linearformen). Wir schreiben

$$f(a) =: \langle f, a \rangle \quad (\text{B.4})$$

und bemerken, dass diese Klammer bilinear in $f \in V^*$ und $a \in V$ ist. Aus (B.1) folgt

$$\langle f, a \rangle = \underbrace{\langle f, e_\mu \rangle}_{=: f_\mu} a^\mu. \quad (\text{B.5})$$

Die zu e_1, \dots, e_n duale Basis e^1, \dots, e^n für V^* ist erklärt durch

$$\langle e^\mu, a \rangle = a^\mu. \quad (\text{B.6})$$

Dann ist

$$f = f_\mu e^\mu,$$

denn es ist

$$\langle f_\mu e^\mu, a \rangle = f_\mu a^\mu = \langle f, a \rangle.$$

Speziell gilt

$$\langle e^\mu, e_\nu \rangle = \delta^\mu_\nu.$$

Bei einer Basistransformation (B.2) gilt nach (B.5, B.6)

$$\bar{f}_\mu = \Lambda_\mu^\nu f_\nu, \quad \bar{e}^\mu = \Lambda^\mu_\nu e^\nu. \quad (\text{B.7})$$

Die Elemente von V , bzw. V^* nennt man auch **kontravariante**, bzw. **kovariante** Vektoren (im Vergleich zum Transformationsgesetz (B.2)). Wegen (B.4) ist $V \cong V^{**}$ mittels $a \mapsto \langle \cdot, a \rangle$.

Tensoren

Ein Tensor T vom Typ $\binom{q}{p}$, $T \in \otimes_p^q V$, ist eine Multilinearform in q Variablen aus V^* und p Variablen aus V . Zum Beispiel ist $T \in \otimes_1^1 V$ eine Bilinearform $T(f, a)$ der Variablen $f \in V^*$ und $a \in V$.

In einer Basis ist

$$T(f, a) = T(f_\mu e^\mu, a^\nu e_\nu) = \underbrace{T(e^\mu, e_\nu)}_{=: T^\mu{}_\nu} f_\mu a^\nu \quad (\text{B.8})$$

und daraus folgt mit (B.2, B.7) das für Tensorkomponenten charakteristische Transformationsgesetz

$$\bar{T}^\mu{}_\nu = T^\alpha{}_\beta \Lambda^\mu{}_\alpha \Lambda_\nu{}^\beta \quad (\text{B.9})$$

kontravariant im ersten Index und kovariant im zweiten. Speziell hat der Tensor (B.4) in jeder Basis die Komponenten $\delta^\mu{}_\nu$: (B.9) reduziert sich in diesem Fall auf (B.3). Wir bemerken: $\otimes_0^0 V = \mathbb{R}$, $\otimes_1^0 V = V^*$, $\otimes_0^1 V = V^{**} = V$.

Operationen auf Tensoren:

i) **Produkt:** Für $T \in \otimes_{p_1}^{q_1} V$, $S \in \otimes_{p_2}^{q_2} V$ ist das Tensorprodukt $T \otimes S \in \otimes_{p_1+p_2}^{q_1+q_2} V$ definiert durch

$$\begin{aligned} (T \otimes S)(f_{(1)}, \dots, f_{(q_1+q_2)}; a_{(1)}, \dots, a_{(p_1+p_2)}) \\ = T(f_{(1)}, \dots, f_{(q_1)}; a_{(1)}, \dots, a_{(p_1)}) S(f_{(q_1+1)}, \dots, f_{(q_1+q_2)}; a_{(p_1+1)}, \dots, a_{(p_1+p_2)}) . \end{aligned}$$

- Beispiel: Für $T \in \otimes_1^1 V$, $S \in \otimes_1^0 V = V^*$, $R = T \otimes S$ ist

$$R(f, a, b) = T(f, a)S(b) = \underbrace{T^\mu{}_\nu S_\sigma}_{R^\mu{}_\nu{}^\sigma} f_\mu a^\nu b^\sigma . \quad (\text{B.10})$$

- Beispiel: In $\otimes_1^1 V$ ist eine Basis gegeben durch $e_\mu \otimes e^\nu$. Aus (B.8) und $(e_\mu \otimes e^\nu)(f, a) = f_\mu a^\nu$ folgt nämlich

$$T = T^\mu{}_\nu e_\mu \otimes e^\nu .$$

Damit ist $\otimes_1^1 V = V \otimes V^* := \{\text{Linearkombinationen von Tensorprodukten aus } V \text{ und } V^*\}$.

Allgemein:

$$\otimes_p^q V = \underbrace{V \otimes \dots \otimes V}_{q\text{-mal}} \otimes \underbrace{V^* \otimes \dots \otimes V^*}_{p\text{-mal}} . \quad (\text{B.11})$$

ii) **Spur:** Für Tensoren vom Typ $\binom{1}{1}$ ist die Spur von T

$$\text{tr } T := T(e^\mu, e_\mu) = T^\mu{}_\mu ,$$

wobei e_μ, e^μ ein beliebiges duales Basispaar ist. Beliebiger ist es, weil

$$\bar{T}^\mu{}_\nu = T^\alpha{}_\beta \underbrace{\Lambda^\mu{}_\alpha \Lambda_\nu{}^\beta}_{\delta_\alpha^\beta} = T^\alpha{}_\alpha .$$

Allgemein definiert man

$$\text{tr} : \otimes_p^q V \longrightarrow \otimes_{p-1}^{q-1} V ,$$

indem tr wie oben auf den je letzten Faktor V , bzw. V^* in (B.11) wirkt.

- Beispiel: $S = \text{tr} T$, $T \in \otimes_1^2 V$ hat die Komponenten

$$S^\mu = T^{\mu\nu}{}_\nu .$$

- Beispiel: Jeder Tensor $T^\mu{}_\nu$ definiert durch

$$b^\mu = T^\mu{}_\nu a^\nu$$

(Spur eines Tensorprodukts) eine lineare Abbildung $T : V \rightarrow V, a \mapsto b$, und umgekehrt: Jede solche Abbildung T definiert einen Tensor

$$T(f, a) = \langle f, Ta \rangle = T^\mu{}_\nu f_\mu a^\nu$$

mit den Komponenten $T^\mu{}_\nu = \langle e^\mu, Te_\nu \rangle$. Analog kann man z.B. einen Tensor $T_{\mu\nu}$ auffassen als lineare Abbildung

$$b_\mu = T_{\mu\nu} a^\nu$$

von V nach V^* .

Antisymmetrische Tensoren

Eine spezielle Rolle spielen die antisymmetrischen Tensoren aus $\otimes_p^0 V = \underbrace{V^* \otimes \dots \otimes V^*}_{p\text{-mal}}$:

$$T(a_{(\pi(1))}, \dots, a_{(\pi(p))}) = \text{sgn } \pi \cdot T(a_{(1)}, \dots, a_{(p)})$$

für jede Permutation π von $\{1, \dots, p\} : \pi \in S_p$. Dabei ist $\text{sgn } \pi$ ihre Parität. Man schreibt $\bigwedge^p V^*$ für den Unterraum solcher Tensoren.

Jeder Tensor vom Typ $\binom{0}{p}$ kann antisymmetrisiert werden durch die Operation \mathcal{A} :

$$(\mathcal{A}T)(a_{(1)}, \dots, a_{(p)}) := \frac{1}{p!} \sum_{\pi \in S_p} \text{sgn } \pi T(a_{(\pi(1))}, \dots, a_{(\pi(p))}) .$$

Es gilt $\mathcal{A}^2 = \mathcal{A}$.

iii) **Äusseres Produkt:** für $T \in \bigwedge^{p_1} V^*$, $S \in \bigwedge^{p_2} V^*$ ist $T \wedge S \in \bigwedge^{p_1+p_2} V^*$ definiert durch

$$T \wedge S = \frac{(p_1 + p_2)!}{p_1! p_2!} \mathcal{A}(T \otimes S) .$$

Eigenschaften:

$$T \wedge S = (-1)^{p_1 p_2} S \wedge T ,$$

$$T \wedge (S \wedge R) = (T \wedge S) \wedge R = \frac{(p_1 + p_2 + p_3)!}{p_1! p_2! p_3!} \mathcal{A}(T \otimes S \otimes R)$$

Komponenten: Für $T \in \bigwedge^p V^*$ ist bezüglich einer Basis e^μ von V^*

$$\begin{aligned} T &= T_{\mu_1 \dots \mu_p} e^{\mu_1} \otimes \dots \otimes e^{\mu_p} = \mathcal{A}T \\ &= T_{\mu_1 \dots \mu_p} \mathcal{A}(e^{\mu_1} \otimes \dots \otimes e^{\mu_p}) \\ &= T_{\mu_1 \dots \mu_p} \frac{1}{p!} e^{\mu_1} \wedge \dots \wedge e^{\mu_p} \\ &= T_{\mu_1 \dots \mu_p} e^{\mu_1} \wedge \dots \wedge e^{\mu_p} \quad \left(\begin{array}{l} \text{bei Beschränkung der Summe} \\ \text{auf } \mu_1 < \dots < \mu_p \end{array} \right) . \end{aligned}$$

Damit ist

$$\dim \bigwedge^p V^* = \binom{n}{p} = \frac{n!}{p!(n-p)!}$$

und insbesondere = 0 für $p > n$.

Metrik

Wir rüsten V mit einem Skalarprodukt aus

(a, b) : symmetrische, nicht ausgeartete Bilinearform auf V .

Nicht ausgeartet heisst, dass nur der Nullvektor auf allen Vektoren orthogonal steht:

$$(a, b) = 0 , \quad \forall b \in V \quad \implies \quad a = 0 .$$

In Komponenten schreiben wir für diesen metrischen Tensor

$$\begin{aligned} (a, b) &= g_{\mu\nu} a^\mu b^\nu , \\ g_{\mu\nu} &= g_{\nu\mu} , \quad \det(g_{\mu\nu}) \neq 0 . \end{aligned}$$

iv) **Rauf- und Runterziehen der Indizes:** Durch das Skalarprodukt definiert jeder Vektor $a \in V$ eine Linearform $ga \in V^*$:

$$\langle ga, b \rangle := (a, b) , \quad \forall b \in V$$

Die Abbildung $g : V \rightarrow V^*$, $a \mapsto ga$ ist ein Isomorphismus, denn aus $ga = 0$ folgt $(a, b) = 0$ für alle $b \in V$, also $a = 0$. In Komponenten ist

$$(ga)_\mu b^\mu = g_{\mu\nu} a^\nu b^\mu$$

also

$$(ga)_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu \tag{B.12}$$

(Runterziehen des Index). Für $g^{-1} : V^* \rightarrow V$ gilt umgekehrt

$$\begin{aligned}(g^{-1}f, b) &= \langle f, b \rangle, \\ (g^{-1}f)^\mu &= g^{\mu\nu} f_\nu\end{aligned}$$

(Raufziehen des Index), wenn wir mit $(g^{\mu\nu})$ die (ebenfalls symmetrische) Inverse der Matrix $(g_{\mu\nu})$ bezeichnen. Diese Isomorphismen lassen sich auf Tensoren übertragen, so das Runterziehen:

$$\begin{aligned}g : \otimes_p^q V &\longrightarrow \otimes_{p+1}^{q-1} V, & T &\longmapsto gT, \\ (gT)(f_{(1)}, \dots, f_{(q-1)}; a_{(1)}, \dots, a_{(p+1)}) &= T(f_{(1)}, \dots, f_{(q-1)}, ga_{(1)}; a_{(2)}, \dots, a_{(p+1)}), \\ (gT)^{\mu_1 \dots \mu_{q-1}}_{\nu_1 \dots \nu_{p+1}} &= g_{\nu_1 \alpha} T^{\mu_1 \dots \mu_{q-1} \alpha}_{\nu_2 \dots \nu_{p+1}}.\end{aligned}\tag{B.13}$$

Wir identifizieren nun V^* mit V , indem wir $ga \equiv a$ setzen und einfach von ‘Vektoren’ sprechen. So lautet (B.12)

$$a_\mu = g_{\mu\nu} a^\nu$$

und wir nennen a^μ bzw. a_μ die kontravarianten bzw. kovarianten Komponenten von a . Es ist dann

$$a = a^\mu e_\mu = a_\mu e^\mu,$$

wobei die duale Basis $\{e^\mu\}$ zu $\{e_\mu\}$ bestimmt ist durch

$$(e^\mu, e_\nu) = \delta^\mu_\nu.$$

Analog identifiziert man alle $\otimes_p^q V$ mit dem selben $p + q$. Beispiel: $p + q = 3$.

$$T(a, b, c) = T_{\mu\nu\sigma} a^\mu b^\nu c^\sigma = T^\mu_{\nu\sigma} a_\mu b^\nu c^\sigma = T^{\mu\nu\sigma} a_\mu b_\nu c_\sigma.$$

Insbesondere folgt aus (B.13), dass

$$g_\mu^\nu = g^\nu_\mu = \delta_\mu^\nu$$

in jeder Basis. Hingegen kann man die Basis kartesisch wählen, d.h.

$$g_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu},$$

nur im Fall einer positiv-definiten Metrik. Dann entfällt der Unterschied zwischen kovarianten und kontravarianten Komponenten und man kann alle Indizes unten schreiben.

Volumenelement

Die Metrik auf $V = V^*$ überträgt sich auf $\otimes_p^0 V$ mittels

$$(a_{(1)} \otimes \dots \otimes a_{(p)}, b_{(1)} \otimes \dots \otimes b_{(p)})_p := \frac{1}{p!} \prod_{i=1}^p (a_{(i)}, b_{(i)})\tag{B.14}$$

und Bilinearität. Sie bleibt dabei nicht ausgeartet. Insbesondere ist sie auf $\bigwedge^p V^*$ definiert. Wegen $\dim \bigwedge^n V^* = 1$ gibt es bis auf das Vorzeichen genau ein $\Omega \in \bigwedge^n V^*$ mit

$$(\Omega, \Omega)_n = \text{Signatur von } (\cdot, \cdot)_n \text{ auf } \bigwedge^n V^* = \pm 1.$$

Ω heisst das Volumenelement zur Metrik g . Bezüglich einer Basis e^μ für V^* ist

$$\Omega = \pm |g|^{1/2} e^1 \wedge \cdots \wedge e^n ,$$

wobei

$$g = \det (g_{\mu\nu}) , \quad g_{\mu\nu} = (e_\mu, e_\nu) .$$

In der Tat ist

$$\begin{aligned} (\Omega, \Omega)_n &= |g| (e^1 \wedge \cdots \wedge e^n, e^1 \wedge \cdots \wedge e^n)_n \\ &= |g| \sum_{\pi \in S_p} \operatorname{sgn} \pi \prod_{i=1}^n (e^i, e^{\pi(i)}) = |g| \underbrace{\det (g^{\mu\nu})}_{g^{-1}} = \operatorname{sgn} g . \end{aligned}$$

In Komponenten:

$$\Omega_{\mu_1 \dots \mu_n} = \pm |g|^{1/2} \varepsilon_{\mu_1 \dots \mu_n} ,$$

wobei

$$\varepsilon_{\mu_1 \dots \mu_n} = \operatorname{sgn} \begin{pmatrix} 1 \dots n \\ \mu_1 \dots \mu_n \end{pmatrix} .$$

v) **Hodge'sche *-Operation:** Eine Abbildung

$$* : \bigwedge^p V^* \longrightarrow \bigwedge^{n-p} V^* , \quad T \longmapsto *T$$

ist definiert durch

$$(*T, S)_{n-p} = (T \wedge S, \Omega)_n$$

für alle $S \in \bigwedge^{n-p} V^*$.

Eigenschaften: (ohne Beweis)

$$\begin{aligned} (*T, S)_{n-p} &= (-1)^{p(n-p)} (T, *S)_p , \\ **T &= \operatorname{sgn} g \cdot (-1)^{p(n-p)} T , \\ (*T_1, *T_2)_{n-p} &= \operatorname{sgn} g \cdot (T_1, T_2)_p . \end{aligned}$$

Einen expliziten Ausdruck für $*T$ bekommen wir aus

$$(*T, S)_{n-p} = \frac{n!}{p!(n-p)!} (T \otimes S, \Omega)_n = \frac{1}{p!} \left(\operatorname{tr}^{(p)} ((g^{-1(p)} T) \otimes \Omega), S \right)_{n-p} ,$$

wobei (p) für 'p-fach' steht. Dies folgt aus der Normierung (B.14) und aus $(a, b) = \langle g^{-1}a, b \rangle = \operatorname{tr}(g^{-1}a \otimes b)$. Also ist

$$*T = \frac{1}{p!} \operatorname{tr}^{(p)} ((g^{-1(p)} T) \otimes \Omega)$$

und in Komponenten

$$(*T)_{\mu_{p+1} \dots \mu_n} = \frac{1}{p!} T^{\mu_1 \dots \mu_p} \Omega_{\mu_1 \dots \mu_n} .$$

Tensorfelder im \mathbb{R}^n

In \mathbb{R}^n benützen wir affine Koordinaten $x = (x^1, \dots, x^n)$ bestimmt bis auf linear inhomogene Transformationen

$$\bar{x} = \Lambda x + a, \quad \bar{x}^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu + a^\mu. \quad (\text{B.15})$$

Ein Tensorfeld ist gegeben durch seine Komponenten, z.B. $T^\mu_\nu(x^1, \dots, x^n)$ falls vom Typ $\binom{1}{1}$, mit dem Transformationsgesetz

$$\bar{T}^\mu_\nu(\bar{x}) = T^\alpha_\beta(x) \Lambda^\mu_\alpha \Lambda_\nu^\beta = T^\alpha_\beta(\Lambda^{-1}(\bar{x} - a)) \Lambda^\mu_\alpha \Lambda_\nu^\beta. \quad (\text{B.16})$$

Algebraische Operationen (i-v) sind punktweise auf Tensorfeldern ausführbar.

vi) **Differentiation:** Aus $T^\mu_\nu(x)$ entsteht durch

$$T^\mu_{\nu,\sigma}(x) := \frac{\partial}{\partial x^\sigma} T^\mu_\nu(x) \quad (\text{B.17})$$

ein neues Tensorfeld. Zum Beweis bemerken wir, dass nach (B.15)

$$\frac{\partial \bar{x}^\mu}{\partial x^\nu} = \Lambda^\mu_\nu, \quad \frac{\partial x^\nu}{\partial \bar{x}^\sigma} = \Lambda_\sigma^\nu,$$

wobei die zweite Beziehung durch Vergleich von

$$\frac{\partial \bar{x}^\mu}{\partial x^\nu} \frac{\partial x^\nu}{\partial \bar{x}^\sigma} = \delta^\mu_\sigma \quad \text{mit} \quad \Lambda^\mu_\nu \Lambda_\sigma^\nu = \delta^\mu_\sigma$$

folgt. Somit transformieren die Differentialoperatoren

$$\partial_\mu := \frac{\partial}{\partial x^\mu}$$

wie kovariante Vektorkomponenten

$$\bar{\partial}_\mu = \frac{\partial}{\partial \bar{x}^\mu} = \frac{\partial x^\nu}{\partial \bar{x}^\mu} \frac{\partial}{\partial x^\nu} = \Lambda_\mu^\nu \partial_\nu.$$

Daraus folgt das Transformationsverhalten von (B.17)

$$\bar{T}^\mu_{\nu,\sigma}(\bar{x}) = \Lambda_\sigma^\gamma \partial_\gamma (T^\alpha_\beta(x) \Lambda^\mu_\alpha \Lambda_\nu^\beta) = T^\alpha_{\beta,\gamma}(x) \Lambda^\mu_\alpha \Lambda_\nu^\beta \Lambda_\sigma^\gamma.$$

(Ersichtlich ist auch, dass $T^\mu_{\nu,\sigma}$ bezüglich nicht affinen Koordinatentransformationen *kein* Tensor ist.)

- Beispiel: $f_{,\mu} = \text{Gradient eines Skalarfeldes (kovariantes Vektorfeld)}$ und $j^\mu_{,\mu} = \text{Divergenz eines kontravarianten Vektorfeldes (Spur des Tensorfeldes } j^\mu_{,\nu})$.

Eine ortsunabhängige Metrik im \mathbb{R}^n ist gegeben durch den metrischen Tensor $g_{\mu\nu}$ (unabhängig von x). Dann kommutiert ∂_μ mit dem Rauf- und Runterziehen der Indizes. Wir setzen noch

$$\partial^\mu := \frac{\partial}{\partial x_\mu} = g^{\mu\nu} \partial_\nu.$$

Invariant ist der Laplace–Operator (bzgl. der Metrik $g_{\mu\nu}$):

$$\Delta = \partial^\mu \partial_\mu = g^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu .$$

Bemerkung. Ein koordinaterfreier Zugang zu Tensorfeldern ist über den Begriff eines **affinen Raumes** \mathbb{E} (über V) möglich. Dies ist eine Menge versehen mit einer Abbildung $\mathbb{E} \times \mathbb{E} \rightarrow V$, $(r, r') \mapsto r' - r$, welche folgende Eigenschaften genießt: (i) $(r'' - r') + (r' - r) = r'' - r$; (ii) zu gegebenen $r \in \mathbb{E}$, $v \in V$ gibt es genau ein $r' \in \mathbb{E}$ mit $r' - r = v$ (notiert als $r' = r + v$).

Ein Koordinatensystem K in \mathbb{E} ist gegeben durch Auszeichnung eines Punkts $o \in \mathbb{E}$ (Ursprung) und einer Basis $\{e_\mu\}$ für V . Über $r = o + x^\mu e_\mu$ ist eine Koordinatenabbildung $\mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}^n$, $r \mapsto x = (x^1, \dots, x^n)$ erklärt. Bei Wechsel des Koordinatensystem, bestimmt durch (B.2) und $o - \bar{o} = a^\mu \bar{e}_\mu$, transformieren die Koordinaten gemäss (B.15).

Ein Tensorfeld auf \mathbb{E} ist eine Abbildung $T : \mathbb{E} \rightarrow \otimes_p^q V$, $r \mapsto T_r$. Bzgl. K sind ihm (z.B. für $p = q = 1$) die Komponenten $T^\mu{}_\nu(x) := T_r(e^\mu, e_\nu)$ zugeordnet. Deren Transformationsverhalten ist (B.16). Die Ableitung ∂T ist ein Tensorfeld vom Typ $\binom{q}{p+1}$ koordinatenfrei definiert (im Bsp.) durch

$$(\partial T)_r(f, a, b) = \left. \frac{d}{d\lambda} T_{r+\lambda b}(f, a) \right|_{\lambda=0} ,$$

d.h. (B.17) in Komponenten. Die Überprüfung ihres Transformationsverhaltens erübrigt sich nun aber.

C Anhang: Selbstadjungierte Operatoren

1. Grundlagen

- Hilbertraum \mathcal{H} über \mathbb{C} mit Skalarprodukt (\cdot, \cdot) ; Norm $\|u\| := (u, u)^{1/2}$.

Konvergenzbegriffe in \mathcal{H} :

— Normkonvergenz:

$$u_n \rightarrow u, \quad \text{d.h.} \quad \|u_n - u\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

— schwache Konvergenz:

$$u_n \xrightarrow{w} u, \quad \text{d.h.} \quad (v, u_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} (v, u), \quad (\forall v \in \mathcal{H}).$$

Es gilt:

$$u_n \xrightarrow{w} u, \quad \|u_n\| \rightarrow \|u\| \quad \Rightarrow \quad u_n \rightarrow u. \quad (\text{C.1})$$

- Beschränkte Operatoren, $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$:

$$B : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad u \mapsto Bu, \quad \text{linear}$$

mit $\|Bu\| \leq C\|u\|$ für ein $C \geq 0$; $\|B\| :=$ kleinstes solches C .

Konvergenzbegriffe in $\mathcal{L}(\mathcal{H})$:

— Normkonvergenz:

$$B_n \rightarrow B, \quad \text{d.h.} \quad \|B_n - B\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

— starke Konvergenz:

$$B_n \xrightarrow{s} B, \quad \text{d.h.} \quad B_n u \rightarrow Bu, \quad (\forall u \in \mathcal{H}).$$

— schwache Konvergenz:

$$B_n \xrightarrow{w} B, \quad \text{d.h.} \quad B_n u \xrightarrow{w} Bu, \quad (\forall u \in \mathcal{H}).$$

Es gilt, s. (C.1):

$$B_n \xrightarrow{w} B, \quad \|B_n u\| \rightarrow \|Bu\| \quad (\forall u \in \mathcal{H}) \quad \Rightarrow \quad B_n \xrightarrow{s} B. \quad (\text{C.2})$$

- Satz von Riesz: Sei $D \subset \mathcal{H}$ ein dichter Teilraum, d.h. $\overline{D} = \mathcal{H}$ (\overline{D} : Normabschluss von D). Zu jeder beschränkten Linearform l auf D ,

$$l : D \rightarrow \mathbb{C}, \quad v \mapsto l(v), \quad \text{linear} \\ |l(v)| \leq C\|v\|,$$

gehört ein eindeutiges $u \in \mathcal{H}$, sodass

$$l(v) = (u, v). \quad (\text{C.3})$$

Anwendung: Ebenso gehört zu jeder Sesquilinearform b auf D ,

$$b : D \times D \rightarrow \mathbb{C}, \quad (u, v) \mapsto b(u, v), \quad \begin{array}{l} \text{linear in } v \\ \text{antilinear in } u \end{array} \\ |b(u, v)| \leq C\|u\|\|v\|,$$

ein eindeutiges $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, sodass

$$b(u, v) = (u, Bv) . \quad (\text{C.4})$$

Bemerkungen. 1) b , und somit B , ist durch $b(u, u)$ über die Polarisationsidentität bestimmt:

$$b(u, v) = \frac{1}{4} \sum_{k=0}^3 i^{-k} b(u + i^k v, u + i^k v) . \quad (\text{C.5})$$

2) Ist $b(u, u) \geq 0$, ($\forall u \in \mathcal{H}$), so gilt die Cauchy Ungleichung

$$|b(u, v)|^2 \leq b(u, u) \cdot b(v, v) .$$

2. Unbeschränkte Operatoren

Definition. Ein Operator A auf \mathcal{H} ist eine lineare Abbildung

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{H} \supset D(A) & \longrightarrow & R(A) \subset \mathcal{H} , \quad u \mapsto Au \\ \uparrow & & \uparrow \\ \text{Teilraum} & & \text{Teilraum} \\ \text{Definitionsbereich} & & \text{Wertebereich} \\ \text{von } A \text{ (domain)} & & \text{von } A \text{ (range)} \end{array}$$

Regeln.

$$\begin{aligned} A = B & : D(A) = D(B) \text{ und } Au = Bu, (\forall u \in D(A)) \\ A \subset B & : D(A) \subset D(B) \quad \text{''} \quad \text{''} \quad \text{''} \\ & (B \text{ heisst Fortsetzung von } A) \\ D(A + B) & = D(A) \cap D(B) \text{ und } (A + B)u = Au + Bu \\ D(AB) & = \{u \in D(B) \mid Bu \in D(A)\} \text{ und } (AB)u = A(Bu) \\ A^{-1} \text{ existiert} & : A \text{ ist injektiv, } D(A^{-1}) = R(A), R(A^{-1}) = D(A) \end{aligned}$$

Der Nullraum von A ist $N(A) = \{u \in D(A) \mid Au = 0\}$.

$$A \text{ injektiv} \Leftrightarrow N(A) = \{0\} .$$

Definition. Sei A ein Operator. Falls

$$\left. \begin{array}{l} u_n \in D(A) \\ u_n \rightarrow 0 \\ Au_n \rightarrow v \end{array} \right\} \Rightarrow v = 0 , \quad (\text{C.6})$$

so heisst A **abschliessbar**; dann ist der **Abschluss** \bar{A} ($\supset A$) definiert durch

$$\left. \begin{array}{l} u_n \in D(A) \\ u_n \rightarrow u \\ Au_n \rightarrow v \end{array} \right\} \Rightarrow: u \in D(\bar{A}) , \quad \bar{A}u = v , \quad (\text{C.7})$$

wobei (C.6) die Eindeutigkeit von v in (C.7) sichert. A heisst **abgeschlossen**, falls $\overline{A} = A$, d.h. falls die linke Seite von (C.7) $u \in D(A)$, $Au = v$ impliziert.

Lemma 1. Sei $A^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ (d.h. $A : D(A) \rightarrow \mathcal{H}$ ist injektiv und surjektiv, ferner A^{-1} beschränkt). Dann ist $A = \overline{A}$.

Beweis. Aus $u_n \in D(A)$, $u_n \rightarrow u$, $Au_n \rightarrow v$ folgt $u_n \rightarrow A^{-1}v = u$. □

Definition. Die **Resolventenmenge** $\rho(A)$ von A ist

$$\rho(A) := \{z \in \mathbb{C} \mid (z - A)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})\}, \quad (\text{C.8})$$

d.h. $z \in \rho(A)$ gdf $N(z - A) = \{0\}$, $R(z - A) = \mathcal{H}$ und die **Resolvente** $(z - A)^{-1}$ beschränkt ist.

Falls es **ein** solches z gibt, ist nach dem Lemma $z - A$ und somit auch A **abgeschlossen**.

Das **Spektrum** von A ist

$$\sigma(A) = \mathbb{C} \setminus \rho(A). \quad (\text{C.9})$$

$\rho(A)$ ist eine offene Menge (ohne Beweis), $\sigma(A)$ also eine abgeschlossene.

Für $z_1, z_2 \in \mathbb{C}$ ist

$$(z_1 - A)^{-1} - (z_2 - A)^{-1} = (z_2 - z_1)(z_1 - A)^{-1}(z_2 - A)^{-1},$$

insbesondere kommutieren die Resolventen von A .

Definition. Sei A ein **dicht definierter** Operator, d.h. $\overline{D(A)} = \mathcal{H}$. Die **Adjungierte** A^* von A ist dann wie folgt definiert: $u \in D(A^*)$, falls

$$|(u, Av)| \leq C\|v\|, \quad (\forall v \in D(A));$$

dann ist die Linearform $v \mapsto (u, Av)$ auf $D(A)$ beschränkt, nach (C.3) also

$$(u, Av) = (w, v)$$

für ein durch u eindeutig bestimmtes $w \in \mathcal{H}$:

$$A^*u := w.$$

Offensichtlich ist A^* ein linearer Operator auf \mathcal{H} .

Bemerkung. Für $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ gilt: $A^* \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ mit $\|A^*\| = \|A\|$; $(\lambda A)^* = \bar{\lambda}A^*$, $(\lambda \in \mathbb{C})$; $(A + B)^* = A^* + B^*$; $(AB)^* = B^*A^*$; $A^{**} = A$.

Allgemein gilt für ein dicht definierter Operator A :

Lemma 2. *i) A^* ist abgeschlossen.*

ii) A^ ist dicht definiert gdf A abschliessbar ist; dann ist $A^{**} = \overline{A}$.*

iii) $N(A^) = R(A)^\perp$.*

iv) Falls $A^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, so auch $(A^)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ mit $(A^*)^{-1} = (A^{-1})^*$.*

v) Ist A abgeschlossen, so gilt $\rho(A^) = \overline{\rho(A)}$ (komplexe Konjugation).*

Beweis. Nur iii): Für $u \in D(A^*)$ ist

$$(u, Av) = (A^*u, v), \quad (\forall v \in D(A)). \quad (\text{C.10})$$

Dies verschwindet, falls $u \in N(A^*)$, also $u \in R(A)^\perp$. Umgekehrt folgt daraus $u \in D(A^*)$, dann $u \in N(A^*)$ aus (C.10). \square

Definition. Sei A dicht definiert.

a) A heisst **symmetrisch**, falls

$$(u, Av) = (Au, v), \quad (\forall u, v \in D(A)),$$

oder, je gleichbedeutend,

$$(u, Au) \in \mathbb{R}, \quad (\forall u \in D(A)), \quad (\text{C.11})$$

s. (C.5), bzw.

$$A \subset A^*. \quad (\text{C.12})$$

b) A heisst **selbstadjungiert**, falls

$$A = A^*.$$

Die Unterscheidung zwischen a), b) entfällt für beschränkte Operatoren (also überhaupt, falls $\dim \mathcal{H} < \infty$), ist aber für $\dim \mathcal{H} = \infty$ echt, selbst für abgeschlossene A .

Als Vorbereitung für ein Beispiel benötigen wir:

Lemma 3. Für $\psi \in L^2[0, 1]$ sei $d\psi/dx$ als Distribution definiert,

$$\frac{d\psi}{dx}[v] = -\psi\left[\frac{dv}{dx}\right], \quad (\forall v \in C_0^\infty(0, 1)).$$

Falls $d\psi/dx \in L^2[0, 1]$, so ist $\psi(x)$ stetig (d.h. ψ kann dann als stetige Funktion gewählt werden). Gilt auch $d\varphi/dx \in L^2[0, 1]$, so

$$\int_0^1 \left(\frac{d\psi}{dx} \varphi(x) + \psi(x) \frac{d\varphi}{dx} \right) dx = \psi(x) \varphi(x) \Big|_0^1.$$

Beweisskizze. i) Ist $d\psi/dx = 0$, so ist $\psi(x)$ konstant.

ii) $\tilde{\psi}(x) := \int_0^x \frac{d\psi}{dx'} dx'$ ist wohldefiniert (da $\int_0^x |\frac{d\psi}{dx'}| dx' \leq (\int_0^x |\frac{d\psi}{dx'}|^2 dx')^{1/2} (\int_0^x 1 dx')^{1/2}$) und stetig; ferner als Distribution $d\tilde{\psi}/dx = d\psi/dx$.

i), ii) zusammen: $\psi = \tilde{\psi} + \text{konst.}$ \square

Beispiel. Sei $\mathcal{H} = L^2[0, 1]$.

a) Die Operatoren \tilde{p} , p sind dicht definiert als

$$\begin{aligned} D(\tilde{p}) &= \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \frac{d\psi}{dx} \in L^2[0, 1] \right\}, & \tilde{p}\psi &= -i \frac{d\psi}{dx}, \\ D(p) &= \left\{ \psi \in D(\tilde{p}) \mid \psi(0) = 0 = \psi(1) \right\}, & p\psi &= \tilde{p}\psi. \end{aligned}$$

Offenbar ist

$$p \subsetneq \tilde{p}.$$

Behauptung. i) \tilde{p} ist abgeschlossen; ii) $\tilde{p}^* = p$. Also ist p abgeschlossen (s. Lemma 2i)) und symmetrisch, da

$$p \subset \tilde{p} = \bar{\tilde{p}} = p^*$$

(s. Lemma 2ii)), nicht aber selbstadjungiert.

Beweis. i) aus $\psi_n \in D(\tilde{p})$, $\psi_n \rightarrow \psi$, $\tilde{p}\psi_n \rightarrow \varphi$ folgt für jede Testfunktion $v \in C_0^\infty(0, 1)$

$$(v, \varphi) = \lim_n -i \underbrace{\left(v, \frac{d\psi_n}{dx}\right)}_{\frac{d\psi_n}{dx}[v] = -\psi_n\left[\frac{d\bar{v}}{dx}\right]} = \lim_n i \underbrace{\left(\frac{dv}{dx}, \psi_n\right)}_{-\frac{d\psi}{dx}[v]} = i \underbrace{\left(\frac{dv}{dx}, \psi\right)}_{-\frac{d\psi}{dx}[v]},$$

also $-id\psi/dx = \varphi \in L^2[0, 1]$ und damit $\psi \in D(\tilde{p})$, $\tilde{p}\psi = \varphi$.

ii) $\varphi \in D(\tilde{p}^*)$ bedeutet

$$|(\tilde{p}\psi, \varphi)| \leq C\|\psi\|, \quad (\forall \psi \in D(\tilde{p})) \quad (\text{C.13})$$

und insbesondere

$$\left|\frac{d\varphi}{dx}[v]\right| \leq C\|v\|, \quad (\forall v \in C_0^\infty(0, 1)), \quad (\text{C.14})$$

also $d\varphi/dx \in L^2(0, 1)$, s. (C.3), d.h. $\varphi \in D(\tilde{p})$. Zudem ist für $\psi \in D(\tilde{p})$

$$\begin{aligned} (\tilde{p}\psi, \varphi) - (\psi, \tilde{p}\varphi) &= i \int_0^1 \left(\frac{d\bar{\psi}}{dx} \varphi(x) + \bar{\psi}(x) \frac{d\varphi}{dx} \right) dx \\ &= \bar{\psi}(1)\varphi(1) - \bar{\psi}(0)\varphi(0). \end{aligned}$$

Hier ist $|(\psi, \tilde{p}\varphi)|/\|\psi\|$ ($\leq \|\tilde{p}\varphi\|$) beschränkt, nicht aber $\psi(0)/\|\psi\|$, $\psi(1)/\|\psi\|$, die unabhängig voneinander durch Wahl von ψ gross gemacht werden können. Also gilt (C.13) gdf $\varphi(0) = 0 = \varphi(1)$, d.h. falls $\varphi \in D(p)$; dann ist auch $\tilde{p}^*\varphi = \tilde{p}\varphi = p\varphi$.

b) Sei $\alpha \in \mathbb{C}$ mit $|\alpha| = 1$ fest gewählt und p_α dicht definiert durch

$$D(p_\alpha) = \{\psi \in D(\tilde{p}) \mid \psi(1) = \alpha\psi(0)\}, \quad p_\alpha\psi = \tilde{p}\psi.$$

Ebenfalls ist $p_\alpha \subset \tilde{p}$.

Behauptung. $p_\alpha^* = p_\alpha$.

Beweis. $\varphi \in D(p_\alpha^*)$ impliziert wie in (C.14) $\varphi \in D(\tilde{p})$, ferner für $\psi \in D(p_\alpha)$

$$(p_\alpha\psi, \varphi) - (\psi, \tilde{p}\varphi) = \bar{\psi}(0)(\bar{\alpha}\varphi(1) - \varphi(0)) = \bar{\alpha}\bar{\psi}(0)(\varphi(1) - \alpha\varphi(0)).$$

Nun ist $\varphi \in D(p_\alpha^*)$ äquivalent zu $\varphi \in D(\tilde{p})$, $\varphi(1) = \alpha\varphi(0)$, also zu $\varphi \in D(p_\alpha)$; dann ist auch $p_\alpha^*\varphi = \tilde{p}\varphi = p_\alpha\varphi$.

Satz 3. Sei A ein symmetrischer Operator. Dann sind äquivalent:

- a) $A^* = A$
- b) $\sigma(A)$ ist reell

- c) $R(z - A) = \mathcal{H}$ für alle z mit $\text{Im } z \neq 0$ (oder, äquivalent, für $z = \pm i$)
d) A ist abgeschlossen und $N(z - A^*) = \{0\}$ für alle z mit $\text{Im } z \neq 0$ (oder $z = \pm i$).

Beweis. Wegen (C.11) ist für $u \in D(A)$

$$|\text{Im } z| \|u\|^2 = |\text{Im } (u, (z - A)u)| \leq \|u\| \|(z - A)u\| ,$$

also

$$\|(z - A)u\| \geq |\text{Im } z| \|u\| , \quad (\forall u \in D(A)) . \quad (\text{C.15})$$

Insbesondere ist $N(z - A) = \{0\}$ für $\text{Im } z \neq 0$.

i) Wäre $R(z - A) = \mathcal{H}$ für ein $\text{Im } z \neq 0$, so wäre nach (C.15) $z \in \rho(A)$; nach Lemma 1 $z - A$ und damit A abgeschlossen.

ii) Wäre A abgeschlossen, so wäre es $R(z - A)$, ($\text{Im } z \neq 0$), auch. Denn: $(z - A)u_n \rightarrow v$ mit $u_n \in D(A)$ impliziert nach (C.15), dass u_n Cauchy ist, also $u_n \rightarrow u$, und wir schliessen $u \in D(A)$, $(z - A)u = v$.

Daraus, aus Lemma 2iii) und aus $M^{\perp\perp} = \overline{M}$ folgt (c) \Leftrightarrow (d). Die restlichen Äquivalenzen beweisen wir über (a) \Rightarrow (c/d, "alle") \Rightarrow (b) \Rightarrow (c/d, " $\pm i$ ") \Rightarrow (a). Die Implikation (c) \Rightarrow (b) folgt aus (i), (b) \Rightarrow (c) aus der Definition von $\sigma(A)$.

(a) \Rightarrow (d): A ist abgeschlossen nach Lemma 2i). Zudem ist $N(z - A^*) = N(z - A) = \{0\}$, ($\text{Im } z \neq 0$) nach (C.15).

(c und d) \Rightarrow (a): Wegen (C.12) genügt es, $D(A^*) \subset D(A)$ zu zeigen. Sei $u \in D(A^*)$. Wegen (c) gibt es $v \in D(A)$, sodass $(i - A^*)u = (i - A)v = (i - A^*)v$, also $(i - A^*)(u - v) = 0$; wegen (d) ist $u = v \in D(A)$. \square

3. Projektionswertige Masse

Definition. Ein **projektionswertiges Mass** (P -Mass) E auf \mathbb{R} ist ein $*$ -Homomorphismus $C_0^\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$, $f \mapsto E(f)$, d.h.

$$E(\alpha f + \beta g) = \alpha E(f) + \beta E(g) , \quad (\alpha, \beta \in \mathbb{C}) , \quad (\text{C.16})$$

$$E(fg) = E(f)E(g) , \quad (\text{C.17})$$

$$E(f)^* = E(\bar{f}) . \quad (\text{C.18})$$

Ist zudem

$$\{E(f)u \mid f \in C_0^\infty(\mathbb{R}), u \in \mathcal{H}\} \quad (\text{C.19})$$

dicht in \mathcal{H} , so ist E ein **Spektralmaß**.

Wir werden E auf sukzessiv grössere Funktionenklassen fortsetzen, die schliesslich die charakteristischen Funktionen χ_M gewisser Mengen $M \subset \mathbb{R}$ umfassen. Dann wird $E_M := E(\chi_M)$ ein orthogonaler Projektor, vgl. (C.17, C.18), sein mit

$$E_{M_1}E_{M_2} = 0 , \quad E_{M_1 \cup M_2} = E_{M_1} + E_{M_2} , \quad (M_1 \cap M_2 = \emptyset) . \quad (\text{C.20})$$

Dies erklärt den Namen " P -Mass". Da die Fortsetzungen eindeutig sein werden, nennen wir sie immer noch E .

Sei

$$C_\infty(\mathbb{R}) = \{f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \mid f \text{ stetig mit } \lim_{|x| \rightarrow \infty} f(x) = 0\}.$$

Beachte, dass $C_\infty(\mathbb{R})$ der Abschluss von $C_0^\infty(\mathbb{R})$ in der Norm

$$\|f\|_\infty = \sup\{|f(x)| \mid x \in \mathbb{R}\}$$

ist.

Lemma 4. Sei $E : C_0^\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ ein P -Mass. Dann gilt

$$\|E(f)\| \leq \|f\|_\infty. \quad (\text{C.21})$$

Es hat deshalb eine eindeutige, stetige Fortsetzung zu $E : C_\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$. Diese erfüllt wieder (C.16–C.18, C.21), sowie

$$E(f) \geq 0, \quad (f \geq 0). \quad (\text{C.22})$$

Beweis. (C.21): Wegen $E(\alpha f) = \alpha E(f)$ genügt es zu zeigen, dass $\|E(f)\| \leq 1$ für $\|f\|_\infty < 1$. Dann ist $g = f\sqrt{1 - |f|^2} \in C_0^\infty(\mathbb{R})$, also

$$\begin{aligned} 0 &\leq E(g)^*E(g) = E(|g|^2) = E(|f|^2) - E(|f|^4), \\ E(|f|^2) &\geq E(|f|^4) = E(|f|^2)^*E(|f|^2) \geq 0. \end{aligned}$$

Mit $\|B\| = \sup_{\|u\|=1}(u, Bu)$ für $B \geq 0$ folgt

$$\|E(|f|^2)\| \geq \|E(|f|^4)\|, \quad (\text{C.23})$$

und mit $\|B^*B\| = \|B\|^2$ auch noch

$$\begin{aligned} \|E(|f|^2)\| &= \|E(f)^*E(f)\| = \|E(f)\|^2, \\ \|E(|f|^4)\| &= \|E(|f|^2)\|^2 = \|E(f)\|^4, \end{aligned}$$

sodass $\|E(f)\| \leq 1$ nach (C.23).

(C.22): Für $f \geq 0$, $f \in C_\infty(\mathbb{R})$ ist auch $\sqrt{f} \in C_\infty(\mathbb{R})$, also $E(f) = E(\sqrt{f})^*E(\sqrt{f}) \geq 0$. \square

Borel-Funktionen auf \mathbb{R} . Für beliebige Funktionen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ schreiben wir

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x) = f(x) \quad (\text{C.24})$$

für den punktweisen Limes. Falls f_n beschränkte Funktionen sind mit $\sup_n \|f_n\| \leq C < \infty$, so schreiben wir statt (C.24) auch

$$\text{p-}\lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x) = f(x),$$

(dann ist $\|f\|_\infty \leq C$).

Definition. Die Klasse $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ der Borel-Funktionen auf \mathbb{R} ist die kleinste Funktionenklasse \mathcal{F} mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad &C_\infty(\mathbb{R}) \subset \mathcal{F}, \\ \text{(b)} \quad &\text{Aus } f_n \in \mathcal{F} \text{ und } f_n \rightarrow f \text{ folgt } f \in \mathcal{F}. \end{aligned} \quad (\text{C.25})$$

Ersetzt man $f_n \rightarrow f$ durch $f_n \xrightarrow{p} f$, so erhält man die Klasse der beschränkten Borel-Funktionen $\mathcal{B}^\infty(\mathbb{R}) = \{f \in \mathcal{B}(\mathbb{R}) \mid \|f\|_\infty < \infty\}$.

Lemma 5. *Jede konstante Funktion $f(x) = c$ gehört zu $\mathcal{B} = \mathcal{B}(\mathbb{R})$, $\mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$. Mit f, g sind auch $f + g$, fg und \bar{f} in \mathcal{B} : \mathcal{B} ist eine Funktionenalgebra mit Einselement und komplexer Konjugation.*

Beweis. Nur $fg \in \mathcal{B}$: Sei $g \in C_\infty(\mathbb{R})$ fest. Die Klasse \mathcal{F} aller f mit $fg \in \mathcal{B}$ erfüllt (C.25), umfasst also \mathcal{B} . Nun sei $f \in \mathcal{B}$ fest. Die Klasse \mathcal{F} aller g mit $fg \in \mathcal{B}$ erfüllt wieder (C.25), also ist $fg \in \mathcal{B}$ für $f, g \in \mathcal{B}$.

Definition. $M \subset \mathbb{R}$ heisst **Borel-Menge**, falls $\chi_M \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$.

Lemma 6. *Borel-Mengen sind*

- das Komplement jeder Borel-Menge.
 - die Vereinigung und der Durchschnitt abzählbar vieler Borelmengen.
 - jede offene und jede abgeschlossene Menge.
- (ohne Beweis).

Integrale. Ein **Integral** auf \mathbb{R} ist ein positives lineares Funktional $C_\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C}$:

$$I(f) \geq 0, \quad (f \geq 0).$$

Satz 7. *Jedes Integral I mit*

$$I(f) \leq \|f\|_\infty \tag{C.26}$$

hat eindeutige (lineare, positive) Fortsetzungen auf

(i) $I : \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C}$ mit der Eigenschaft (C.26) und

$$I(f_n) \rightarrow I(f), \quad (f_n \xrightarrow{p} f), \tag{C.27}$$

sowie weitergehend auf

- (ii) • alle $g \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$, $g \geq 0$, wobei $0 \leq I(g) \leq \infty$,*
• alle $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ mit $I(|f|) < \infty$, wobei $I(f) \in \mathbb{C}$ mit der Eigenschaft (dominierte Konvergenz)

$$I(f_n) \rightarrow I(f), \tag{C.28}$$

falls $f_n \rightarrow f$ mit $|f_n| \leq g$, $I(g) < \infty$.

Dies ist der Satz von Riesz-Markov. Man schreibt auch

$$I(f) = \int f(\lambda) d\mu(\lambda), \tag{C.29}$$

wobei μ das entsprechende Borel-Mass ist: $\mu(M) = I(\chi_M)$, (M Borel-Menge).

Satz 8. *Jedes P -Mass $E : C_\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ hat eine eindeutige Fortsetzung $E : \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ mit (C.16–C.18, C.21, C.22) und*

$$E(f_n) \xrightarrow{s} E(f), \quad (f_n \xrightarrow{p} f). \tag{C.30}$$

Beweis. Eindeutigkeit: Seien E_1, E_2 solche Fortsetzungen mit $\mathcal{F} = \{f \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R}) \mid E_1(f) = E_2(f)\}$. Da \mathcal{F} (C.25) erfüllt, ist $\mathcal{F} = \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$.

Existenz: Für jedes $u \in \mathcal{H}$ ist

$$I_u(f) := (u, E(f)u) \quad (\text{C.31})$$

ein Integral mit $|I_u(f)| \leq \|u\|^2 \|f\|_\infty$, das nach Satz 7 eine Fortsetzung auf $f \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$ hat. Die Sesquilinearform

$$b_f(u, v) = \frac{1}{4} \sum_{k=0}^3 i^{-k} I_{u+i^k v}(f), \quad (f \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})), \quad (\text{C.32})$$

erfüllt $b_f(u, v) = (u, E(f)v)$ für $f \in C_\infty(\mathbb{R})$, s. (C.5). Die Klasse aller $f \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$, für welche b_f eine beschränkte Sesquilinearform (mit Norm $\|f\|_\infty$) ist, erfüllt (C.25) wegen (C.27). Somit ist $E(f) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ durch $(u, E(f)v) = b_f(u, v)$ definiert für alle $f \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$, vgl. (C.4). Ferner ist nach (C.27)

$$(u, E(f_n)v) \rightarrow (u, E(f)v), \quad (f_n \xrightarrow{p} f), \quad (\text{C.33})$$

d.h. $E(f_n) \xrightarrow{w} E(f)$. Damit zeigt man die Eigenschaften (C.16–C.18), etwa (C.17) nach dem Muster des Beweises von Lemma 5. Aus (C.33) folgt deshalb

$$\|E(f_n)v\|^2 = (v, E(|f_n|^2)v) \rightarrow (v, E(|f|^2)v) = \|E(f)v\|^2,$$

mit (C.2), also $E(f_n) \xrightarrow{s} E(f)$. □

Korollar. Durch $E_M = E(\chi_M)$ ist für jede Borel-Menge $M \subset \mathbb{R}$ ein Projektor $E_M = E_M^2 = E_M^*$ erklärt mit den Eigenschaften (C.20). Ausserdem gilt für jede Folge M_n von Borel-Mengen

$$\begin{aligned} E_{M_1 \cap M_2 \cap \dots} &= s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} E_{M_1 \cap M_2 \dots \cap M_n}, \\ E_{M_1 \cup M_2 \cup \dots} &= s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} E_{M_1 \cup M_2 \dots \cup M_n}. \end{aligned} \quad (\text{C.34})$$

Bemerkung. In der Schreibweise (C.29) lautet (C.31) $I_u(f) = \int f(\lambda) d\mu_u(\lambda)$ mit $\mu_u(M) = (u, E_M u)$. Man schreibt deshalb auch

$$E(f) := \int f(\lambda) dE(\lambda). \quad (\text{C.35})$$

Definition. Der **Träger** $\text{supp } E$ eines P -Masses E ist

$$x \in \text{supp } E :\Leftrightarrow E_M \neq 0 \text{ für jede offene Menge } M \ni x.$$

Lemma 9. $\text{supp } E$ ist abgeschlossen und

$$E_{\mathbb{R} \setminus \text{supp } E} = 0. \quad (\text{C.36})$$

Für jede stetige, beschränkte Funktion f ist

$$\|E(f)\| = \sup_{x \in \text{supp } E} |f(x)|. \quad (\text{C.37})$$

Beweis. $x \notin \text{supp } E$ gdf $E_M = 0$ für eine offene Umgebung $M \ni x$. Damit ist $\mathbb{R} \setminus \text{supp } E$ offen und $E_K = 0$ für jede kompakte Menge $K \subset \mathbb{R} \setminus \text{supp } E$. Wegen $\mathbb{R} \setminus \text{supp } E = \bigcup_{n=1}^{\infty} K_n$ mit $K_n = \{x \in \mathbb{R} \mid |x| \leq n, \text{dist}(x, \text{supp } E) \geq 1/n\}$ folgt (C.36) aus (C.34).

Sei $\chi = \chi_{\text{supp } E}$. Nach (C.36) ist $E(1 - \chi) = 0$, also

$$\|E(f)\| = \|E(\chi f)\| \leq \sup_{x \in \mathbb{R}} |\chi(x)f(x)| = \sup_{x \in \text{supp } E} |f(x)| \quad (\text{C.38})$$

für alle $f \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$, s. (C.21). Ist f stetig und $c < \sup_{x \in \text{supp } E} |f(x)|$, so enthält $M = \{x \mid |f(x)| > c\}$ auch ein $\lambda \in \text{supp } E$. Da M offen ist, ist $E_M \neq 0$, also gibt es ein $u \in \mathcal{H}$, ($\|u\| = 1$), mit $u = E_M u$. Für dieses ist

$$\|E(f)u\|^2 = (u, E(|f|^2 \chi_M)u) \geq c^2 (u, E(\chi_M)u) = c^2 \|u\|^2,$$

also $c \leq \|E(f)\|$, womit die zu (C.38) umgekehrte Ungleichung auch gilt. \square

Im Anschluss an Satz 8 erlaubt die Zusatzeigenschaft (C.19) eines Spektralmasses eine weitere Formulierung:

Lemma 10. *Der Teilraum (C.19) ist dicht in \mathcal{H} genau dann, falls $E(1) = \mathbf{1}$, (d.h. $E_{\mathbb{R}} = \mathbf{1}$).*

Beweis. Wegen $E(f)u = E(1)E(f)u$ ist der Teilraum nicht dicht, falls $E(1) \neq \mathbf{1}$. Sei umgekehrt $E(1) = \mathbf{1}$. Da die Funktion $f \equiv 1$ der p -Limes einer Folge $f_n \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ ist, folgt aus (C.30), dass $u = E(1)u = \lim_n E(f_n)u$, für alle $u \in \mathcal{H}$. \square

Schliesslich erweitern wir ein P -Mass auf unbeschränkte Funktionen f , um den Preis, dass $E(f)$ es auch sein darf.

Satz 11. *Jedes P -Mass E hat eine eindeutige Fortsetzung*

$$E : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \rightarrow \{\text{dicht definierte, abgeschlossene Operatoren auf } \mathcal{H}\}$$

mit

$$D_f := D(E(f)) \supset D_g, \quad (|f| \leq g)$$

und

$$E(f_n)u \rightarrow E(f)u, \quad (u \in D_g), \quad (\text{C.39})$$

falls $f_n \rightarrow f$, $|f_n| \leq g$. Diese erfüllt

$$E(\alpha f + \beta g) \supset \alpha E(f) + \beta E(g)$$

(mit =, falls f oder $g \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$),

$$E(fg) \supset E(f)E(g) \quad (\text{C.40})$$

(mit =, falls $g \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$), sowie (C.18, C.22).

Beweis. (nur Konstruktion von $E(f)$). Für festes $u \in \mathcal{H}$ ist

$$I_u(f) = (u, E(f)u)$$

ein Integral für $f \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$ im Sinn von Satz 7, Teil (i). Es gilt

$$I_u(|f|^2) = (u, E(f)^* E(f)u) = \|E(f)u\|^2, \quad (\text{C.41})$$

nach der Dreiecksungleichung für $\|E(f)u\|$ also

$$I_{\alpha u + \beta v}(|f|^2)^{1/2} \leq |\alpha| I_u(|f|^2)^{1/2} + |\beta| I_v(|f|^2)^{1/2}, \quad (\alpha, \beta \in \mathbb{C}). \quad (\text{C.42})$$

Auch ist

$$I_{u-E(1)u}(|f|^2) = \|E(f)(u - E(1)u)\|^2 = 0. \quad (\text{C.43})$$

Für $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ setzen wir dann mit Teil (ii) des Satzes

$$D_f := \{u \in \mathcal{H} \mid I_u(|f|^2) < \infty\}$$

und behaupten: D_f ist (a) ein Teilraum, der (b) dicht in \mathcal{H} liegt. Sei dazu $f_n := f\chi_{\Omega_n}$, $\Omega_n = \{x \mid |f(x)| \leq n\}$, also $f_n \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$. Wegen $f_n \rightarrow f$, $|f_n| \leq |f|$ folgt mit (C.28)

$$I_u(|f_n|^2) \rightarrow I_u(|f|^2), \quad (\text{C.44})$$

sodass (C.42, C.43) auch für $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ gelten. Insbesondere ist (a) gezeigt. Zum Beweis von (b): für $n \geq m$ ist $f_n\chi_{\Omega_m} = f_m$; damit ist

$$I_{E_{\Omega_m}u}(|f_n|^2) = \|E(f_n)E(\chi_{\Omega_m})u\|^2 = \|E(f_m)u\|^2$$

unabhängig von n , nach (C.44) also $E_{\Omega_m}u \in D_f$. Da $E_{\Omega_m}u \xrightarrow{m \rightarrow \infty} E(1)u$ und da $u - E(1)u \in D_f$, s. (C.43), folgt (b). Nun können wir eine Sesquilinearform $b_f(u, v)$ wie in (C.32) definieren, diesmal für $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ und $u, v \in D_f$. Für $f \in \mathcal{B}^\infty(\mathbb{R})$ ist

$$b_f(u, v) = (u, E(f)v) \quad (\text{C.45})$$

mit, s. (C.41),

$$|b_f(u, v)| \leq \|u\| \|E(f)v\| = \|u\| I_v(|f|^2)^{1/2}. \quad (\text{C.46})$$

Wegen (C.28) mit $|f_n| \leq 1 + |f|^2$ ist $I_{u+i^k v}(f_n) \rightarrow I_{u+i^k v}(f)$ und damit $b_{f_n}(u, v) \rightarrow b_f(u, v)$, sodass (C.46) auch für $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$, $u, v \in D_f$ gilt. Nach (C.3) definiert dann (C.32) $E(f)v$ für $v \in D_f \equiv D(E(f))$. \square

4. Selbstadjungierte Operatoren, Spektralmasse und 1-parametrische unitäre Gruppen

Satz (von Neumann, 1930). *Für jedes Spektralmaß E auf \mathbb{R} ist*

$$A = E(\text{id}), \quad (\text{id} : \lambda \mapsto \lambda), \quad (\text{C.47})$$

d.h. in der Notation (C.35)

$$A = \int \lambda dE_\lambda,$$

selbstadjungiert. Umgekehrt hat jeder Operator $A = A^*$ eine Spektraldarstellung (C.47), wobei das Spektralmaß E durch A eindeutig bestimmt ist.

Korollar. $\text{supp } E = \sigma(A)$.

Bemerkung. Für $A = A^*$ stimmt somit (9.9) mit der allgemeinen Definition (C.9) des Spektrums überein, vgl. auch (9.22).

Wichtig für den unten dargelegten Beweis des Spektralsatzes ist

Definition. Eine 1-parametrische unitäre Gruppe ist eine Abbildung

$$U : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}), \quad t \mapsto U(t)$$

mit den Eigenschaften

$$U(t)^{-1} = U(t)^*, \tag{C.48}$$

$$U(0) = \mathbb{1}, \tag{C.49}$$

$$U(t+s) = U(t)U(s), \tag{C.50}$$

$$\text{s-lim}_{t \rightarrow 0} U(t) = \mathbb{1}. \tag{C.51}$$

Bemerkung. Es folgt

$$\text{s-lim}_{t \rightarrow t_0} U(t) = U(t_0), \quad U(-t) = U(t)^{-1}.$$

Definition. Die **Erzeugende** A von U ist

$$Av := -i \frac{d}{dt} U(t)v \Big|_{t=0} = -i \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (U(t) - \mathbb{1})v, \tag{C.52}$$

wobei $v \in D(A)$, falls der Limes existiert.

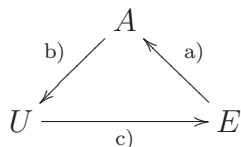
Es ist evident, dass A mindestens symmetrisch ist:

$$0 = i \frac{d}{dt} (U(t)u, U(t)v) \Big|_{t=0} = (Au, v) - (u, Av), \quad (u, v \in D(A)). \tag{C.53}$$

Es gilt aber mehr:

Satz 12. Die Erzeugende A einer 1-parametrischen unitären Gruppe U ist selbstadjungiert. Umgekehrt ist jeder Operator $A = A^*$ eine Erzeugende (C.52), wobei U durch A eindeutig bestimmt ist.

Zum Beweis der Sätze betrachten wir die beiden Zuordnungen in je nur einer Richtung, sowie eine weitere zwischen 1-parametrischen unitären Gruppen und Spektralmasse:



Lemma 13.

- a) Sei E ein Spektralmaß und $E \mapsto A$ durch (C.47) gegeben. Dann ist $A = A^*$.
- b) Sei $A = A^*$. Dann ist A die Erzeugende (C.52) einer eindeutig bestimmten 1-parametrischen unitären Gruppe, notiert $A \mapsto U$.
- c) Sei U eine 1-parametrische unitäre Gruppe. Dann gibt es ein eindeutig bestimmtes Spektralmaß E (notiert $U \mapsto E$) mit

$$U(t) = E(e^{it\lambda}) . \quad (\text{C.54})$$

Die drei Abbildungen sind injektiv.

Beweis der Sätze. Es genügt zu zeigen, dass die Zusammensetzung der Abbildungen (a, b, c) die Identität ergibt. Da sie injektiv sind, reicht es, bei einem beliebigen Vertex, z.B. A , zu beginnen. Nach Konstruktion von (b, c) ist

$$Av = -i \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (E(e^{it\lambda}) - \mathbf{1})v = -i \lim_{t \rightarrow 0} E\left(\frac{e^{it\lambda} - 1}{t}\right)v$$

mit $v \in D(A)$ gdw der Limes existiert. Für $v \in D(E(\lambda)) (= D(E(|\lambda|)))$ folgt mit (C.39) wegen

$$\frac{e^{it\lambda} - 1}{t} \xrightarrow{t \rightarrow 0} \lambda, \quad \left| \frac{e^{it\lambda} - 1}{t} \right| \leq |\lambda| ,$$

dass die rechte Seite gleich $E(\lambda)v$ ist, also $A \supset E(\lambda)$. Zusammen mit der adjungierten Beziehung, $A = A^* \subset E(\lambda)^* = E(\lambda)$, folgt $A = E(\lambda)$. \square

Beweis von a). Sei $A := E(\lambda)$.

$A^* = A$: folgt aus $E(f)^* = E(\bar{f})$ für $f \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$, s. Satz 11. $E \mapsto A$ injektiv: Aus $(z - \lambda)(z - \lambda)^{-1} = 1$, ($\text{Im } z \neq 0, \lambda \in \mathbb{R}$) folgt mit (C.40) und Lemma 10

$$\begin{aligned} (z - E(\lambda))E((z - \lambda)^{-1}) &= E(z - \lambda)E((z - \lambda)^{-1}) = \mathbf{1} , \\ E((z - \lambda)^{-1})(z - E(\lambda)) &\subset \mathbf{1} , \end{aligned}$$

also

$$(z - A)^{-1} = E((z - \lambda)^{-1}) . \quad (\text{C.55})$$

Wegen (C.16, C.17) ist dann $E(f)$ für alle f der Form

$$f(\lambda) = \sum_{i=1}^n a_i (z_i - \lambda)^{-n_i} , \quad (\text{Im } z_i \neq 0, a_i \in \mathbb{C}, n_i = 1, 2, \dots) ,$$

durch A bestimmt. Diese f 's liegen nach dem Satz von Weierstrass dicht in $C_\infty(\mathbb{R})$ bzgl. der $\|f\|_\infty$ -Norm. Damit ist das Spektralmaß E durch A bestimmt. \square

Beweis des Korollars. Nach (C.55, C.37) ist

$$\|(z - A)^{-1}\| = \sup_{x \in \text{supp } E} |z - x|^{-1} , \quad (\text{Im } z \neq 0) .$$

Diese Norm divergiert genau dann, wenn $\text{dist}(z, \sigma(A)) \rightarrow 0$, die rechte Seite, wenn $\text{dist}(z, \text{supp } E) \rightarrow 0$. \square

Beweis von b). Nach Definition (C.52) ist A durch U bestimmt, d.h. $A \mapsto U$ injektiv. Die Konstruktion von U bei gegebenem $A = A^*$ besteht aus folgenden Schritten.

- i) Approximation von A durch $A_n^\pm \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$.
- ii) Definition: $U(\pm t) = s\text{-}\lim_n e^{\pm iA_n^\pm t}$ für $t \geq 0$.
- iii) $U(t)$ ist eine 1-parametrische unitäre Gruppe.
- iv) Die Erzeugende von $U(t)$ ist A .

i) Wir setzen, s. Satz 3,

$$A_n^+ = inA(A + in)^{-1} = in + n^2(A + in)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \quad (\text{C.56})$$

und behaupten

$$\lim_{n \rightarrow \infty} A_n^+ v = Av, \quad (\forall v \in D(A)). \quad (\text{C.57})$$

Wegen $A_n^+ v = in(A + in)^{-1} Av$ genügt es, dass

$$\lim_{n \rightarrow \infty} in(A + in)^{-1} u = u, \quad (\forall u \in \mathcal{H}).$$

Wegen $\|in(A + in)^{-1}\| \leq 1$ genügt es, dies für $u \in D(A)$ zu zeigen:

$$u = (A + in)^{-1}(A + in)u = in(A + in)^{-1}u + (A + in)^{-1}Au,$$

wobei der letzte Term für $n \rightarrow \infty$ verschwindet.

ii)
$$e^{iA_n^+ t} := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (iA_n^+ t)^k$$

ist analytisch in t mit

$$\frac{d}{dt} e^{iA_n^+ t} = iA_n^+ e^{iA_n^+ t}.$$

Für $t \geq 0$ erfüllt

$$U_n^+(t) := e^{iA_n^+ t} = e^{itn^2(A+in)^{-1}} e^{-tn}$$

(C.49–C.51) sowie

$$\|U_n^+(t)\| \leq e^{t\|n^2(A+in)^{-1}\|} e^{-tn} \leq e^{tn} e^{-tn} = 1. \quad (\text{C.58})$$

Da die A_n 's miteinander kommutieren, ist

$$\begin{aligned} U_m^+(t) - U_n^+(t) &= \int_0^t ds \frac{d}{ds} (U_n^+(t-s)U_m^+(s)) \\ &= i \int_0^t ds U_n^+(t-s)U_m^+(s)(A_m - A_n) \end{aligned}$$

und somit

$$\|(U_m^+(t) - U_n^+(t))v\| \leq |t| \|(A_m - A_n)v\|.$$

Mit (C.57) ist $U_n^+(t)v$ Cauchy, also existiert

$$U(t)v := \lim_{n \rightarrow \infty} U_n^+(t)v, \quad (t \geq 0), \quad (\text{C.59})$$

zunächst für $v \in D(A)$, gleichmässig in beschränkten t -Intervallen. Da $D(A)$ dicht ist und wegen (C.58) gilt dasselbe für $v \in \mathcal{H}$. Analog definieren wir A_n^- durch Ersetzung $i \rightarrow -i$ in (C.56) und

$$U_n(-t) := e^{-iA_n^- t}, \quad U(-t) := s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} U_n^-(-t)$$

für $t \geq 0$. Damit ist $U(t) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, ($t \in \mathbb{R}$) mit $\|U(t)\| \leq 1$.

iii) Eigenschaften (C.49–C.51) gehen von $U_n^\pm(t)$ auf $U(t)$ über, (C.50) allerdings nur für t, s mit selbem Vorzeichen. Ist ihr Vorzeichen verschieden, so genügt der Spezialfall $t = -s$,

$$U(t)U(-t) = U(-t)U(t) = \mathbf{1} : \quad (\text{C.60})$$

Sei nämlich z.B. $s \geq t \geq 0$. Dann folgt aus $U(s) = U(s-t)U(t) = U(t)U(s-t)$, dass

$$U(s)U(-t) = U(s-t), \quad U(-t)U(s) = U(s-t).$$

Gl. (C.60) folgt aus

$$\begin{aligned} U_n^+(t)U_n^-(-t) - 1 &= i \int_0^t ds U_n^+(s)U_n^-(-s)(A_n^+ - A_n^-) \\ \|(U_n^+(t)U_n^-(-t) - 1)v\| &\leq |t| \|(A_n^+ - A_n^-)v\| \end{aligned}$$

und (C.57). Wegen (C.60) existiert $U(t)^{-1}$ und $\|U(t)v\| \leq \|v\| \leq \|U(t)v\|$. Damit ist $U(t)$ unitär.

iv) Es ist

$$U_n^+(t)v - v = i \int_0^t ds U_n^+(s)A_n v, \quad (t \geq 0).$$

Daraus, aus (C.57, C.59) und aus analogen Gleichungen für $t \leq 0$ folgt

$$U(t)v - v = i \int_0^t ds U(s)A v, \quad (t \in \mathbb{R})$$

für $v \in D(A)$. Damit existiert

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t}(U(t) - 1)v = iAv, \quad (v \in D(A)),$$

also $A \subset B$, wobei B die Erzeugende von U ist. Nach (C.53) ist $B \subset B^*$, also auch $A \supset B$, d.h. $B = A$. \square

Beweis von c). Wieder bestimmt (C.54) U eindeutig aus E . Konstruktion von E :

i) Definition von $E(f)$ für $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$.

ii) Eigenschaften (C.16–C.19).

iii) Gl. (C.54).

$$i) \quad E(f) := \int dt \hat{f}(t) U(t), \quad (f \in C_0^\infty(\mathbb{R})), \quad (\text{C.61})$$

wobei die Fouriertransformierte

$$\hat{f}(t) := (2\pi)^{-1} \int dx f(x) e^{-itx}$$

für $|t| \rightarrow \infty$ rascher als jede Inverse Potenz von t abfällt. Damit ist (C.61) als starker Limes von Riemann-Summen wohldefiniert und $E(f) \in \mathcal{H}$.

ii) Evident sind (C.16, C.18), letzteres wegen $U(t)^* = U(-t)$.

$$(C.17): \quad f(x)g(x) = \int dt ds \hat{f}(t) \hat{g}(s) e^{i(t+s)x} = \int dt e^{itx} \int ds \hat{f}(t-s) \hat{g}(s),$$

also

$$\begin{aligned} E(fg) &= \int dt \left(\int ds \hat{f}(t-s) \hat{g}(s) \right) U(t) \\ &= \int dt ds \hat{f}(t) \hat{g}(s) U(t+s) = E(f)E(g) \end{aligned}$$

wegen (C.50).

(C.19): Zu zeigen ist $w = 0$, falls $w \perp E(f)u$ für alle $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$, $u \in \mathcal{H}$. Insbesondere ist dann

$$0 = (w, E(f)w) = \int dt \hat{f}(t) (w, U(t)w).$$

Da $(w, U(t)w)$ stetig in t ist, folgt $(w, U(t)w) = 0$ für alle $t \in \mathbb{R}$, also auch für $t = 0$: $\|w\|^2 = 0$.

iii) Für $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ ist

$$e^{itx} f(x) = \int ds \hat{f}(s) e^{i(t+s)x} = \int ds \hat{f}(s-t) e^{isx},$$

also für alle $u \in \mathcal{H}$

$$\begin{aligned} E(e^{itx})E(f)u &= \int ds \hat{f}(s-t) U(s)u \\ &= U(t) \int ds \hat{f}(s) U(s)u = U(t)E(f)u. \end{aligned}$$

Wegen (C.19) folgt nun (C.54). □

Beispiel. Auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ ist die Translation um t definiert als

$$(U(t)\psi)(x) = \psi(x-t). \quad (C.62)$$

$U(t)$ ist eine 1-parametrische unitäre Gruppe mit Erzeugenden $-p$, wobei

$$D(p) = \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \frac{d\psi}{dx} \in L^2(\mathbb{R}) \right\}, \quad p\psi = -i \frac{d\psi}{dx}.$$

Wir vergleichen dies mit Bsp. a) auf S. 137. Dass dort p, \tilde{p} nicht selbstadjungiert sind, steht nun im Zusammenhang damit, dass $x \mapsto x-t$ das Intervall $[0, 1] \ni x$ nicht bewahrt, also (C.62) keine 1-parametrische unitäre Gruppe mehr definiert. Dies ist wieder der Fall, falls $[0, 1]$ "zum Kreis geschlossen" wird: Sei $\alpha \in \mathbb{C}$ mit $|\alpha| = 1$ und

$$(U_\alpha(t)\psi)(x) = \alpha^{[x-t]} \psi((x-t)), \quad (t \in \mathbb{R}),$$

wobei $\lambda = [\lambda] + (\lambda)$ in ganzer Teil und Rest zerlegt wurde. Für $0 < t < 1$ und $\psi(x)$ stetig ist es $(U_\alpha(t)\psi)(x)$ auch, ausser allenfalls bei $x = t$:

$$(U_\alpha(t)\psi)(t-) = \alpha^{-1}\psi(1) , \quad (U_\alpha(t)\psi)(t+) = \psi(0) .$$

Insbesondere ist $U_\alpha(t)\psi \in D(\tilde{p})$ gdf $\psi \in D(\tilde{p})$ und $\psi(1) = \alpha\psi(0)$, also $\psi \in D(p_\alpha)$ aus Bsp. b), S. 138. Man schliesst, dass $-p_\alpha$ die Erzeugende von U_α ist.

D Anhang: Kugelfunktionen

Gesucht ist ein “natürliches” vollständiges Funktionensystem auf der Einheitskugel $S^2 = \{\vec{e} \in \mathbb{R}^3 \mid |\vec{e}| = 1\}$.

Motivation. Die analoge Frage für den Einheitskreis $S^1 = \{\vec{e} \in \mathbb{R}^2 \mid |\vec{e}| = 1\} = \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \mid x_1 + ix_2 = e^{i\theta}, \theta \in \mathbb{R} \bmod 2\pi\}$ hat eine von den Fourierreihen her wohlbekannte Antwort:

$$f_n(\vec{e}) = e^{in\theta} \quad (n \in \mathbb{Z}).$$

Die Funktionen f_n sind die Einschränkung auf S^1 folgender Polynome auf \mathbb{R}^2

$$u_n(x_1, x_2) = \begin{cases} (x_1 + ix_2)^n & , \quad n > 0 \\ 1 & , \quad n = 0 \\ (x_1 - ix_2)^{-n} & , \quad n < 0. \end{cases}$$

Beachte, dass u_n ein homogenes, harmonisches Polynom vom Grad $|n|$ ist, und dass

$$u_n(r\vec{e}) = r^{|n|} f_n(\vec{e}).$$

Im Falle der Einheitskugel $\Omega \equiv S^2$ setzen wir deshalb:

Definition. $Y_l : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ ist eine Kugelfunktion zum Index $l = 0, 1, 2, \dots$, falls Y_l die Einschränkung auf Ω eines homogenen, harmonischen ($\Delta u_l = 0$) Polynoms $u_l : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ ist:

$$u_l(r\vec{e}) = r^l Y_l(\vec{e}). \quad (\text{D.1})$$

Satz.

- $\vec{M}^2 Y_l = l(l+1)Y_l$.
- $(Y_l, Y_{l'}) = 0$ für $l \neq l'$.
- Die Y_l (zu festem l) bilden einen $(2l+1)$ -dimensionalen Unterraum $\mathcal{Y}_l \subset L^2(\Omega)$.
- Diese Unterräume spannen $L^2(\Omega)$ auf:

$$L^2(\Omega) = \bigoplus_{l=0}^{\infty} \mathcal{Y}_l.$$

Beweis. a) Aus

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \vec{M}^2,$$

vgl. (10.7), folgt mit (D.1)

$$0 = \Delta u_l = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{r^2} \vec{M}^2 \right) r^l Y_l = r^{l-2} (l(l+1) - \vec{M}^2) Y_l.$$

b) Eigenvektoren selbstadjungierter Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal: $l(l+1)(Y_l, Y_{l'}) = (\vec{M}^2 Y_l, Y_{l'}) = (Y_l, \vec{M}^2 Y_{l'}) = l'(l'+1)(Y_l, Y_{l'})$.

c) Sei H_l der Raum aller homogenen Polynome

$$P_l(\vec{x}) = \sum_{\substack{m_i \in \mathbb{N} \\ m_1 + m_2 + m_3 = l}} c_{m_1 m_2 m_3} x_1^{m_1} x_2^{m_2} x_3^{m_3}$$

vom Grad l . Die Anzahl der Koeffizienten ist

$$\dim H_l = (l+1) + l + (l-1) + \dots + 1.$$

Offenbar $\Delta : H_l \rightarrow H_{l-2}$. Der Raum K_l der homogenen, harmonischen Polynome von Grad l , d.h. $K_l = \text{Ker } \Delta$, hat also die Dimension

$$\dim K_l \geq \dim H_l - \dim H_{l-2} = (l+1) + l = 2l + 1. \quad (\text{D.2})$$

Andererseits ist nach (b) und $r^l = (\vec{x}^2)^k r^{l-2k}$

$$H_l \supset r^l (\mathcal{Y}_l \oplus \mathcal{Y}_{l-2} \oplus \dots) \quad (\text{D.3})$$

mit Dimensionen

$$\begin{aligned} \dim H_l &\geq \dim K_l + \dim K_{l-2} + \dots \\ &\geq (l+1) + l + (l-1) + \dots + 1 = \dim H_l. \end{aligned}$$

Es folgt, dass in (D.2, D.3) Gleichheit gilt.

d) Nach (D.3) (mit $=$) sind die endlichen Linearkombinationen von Kugelfunktionen identisch mit den Einschränkungen von Polynomen auf Ω . Nach dem Weierstrassschen Approximationssatz approximieren diese die stetigen Funktionen auf Ω gleichmässig. Letztere sind dicht in $L^2(\Omega)$. \square

Der Raum \mathcal{Y}_l trägt nach Beispiel 3 auf S. 102 eine irreduzible Darstellung \mathcal{D}_l . Er kann somit mit einer orthonormierten Basis $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle \theta, \varphi | l, m \rangle$, ($m = -l, \dots, l$) ausgerüstet werden, die die Gleichungen (12.26), und insbesondere

$$M_3 Y_{lm} = m Y_{lm}, \quad (\text{D.4})$$

erfüllt; durch diese ist die Basis bis auf eine Phase bestimmt. Da $Y_{l0}(0, 0) \neq 0$, kann diese konventionsweise durch

$$Y_{l0}(0, 0) > 0 \quad (\text{D.5})$$

festgelegt werden. Aus (D.4) und $M_3 = -i\partial/\partial\varphi$ folgt, dass $Y_{l0}(\theta, \varphi)$ (bis auf Vielfache) die einzige Funktion in \mathcal{Y}_l ist, die invariant unter Drehungen um die 3-Achse, d.h. unabhängig von φ , ist.

Die expliziten Ausdrücke der $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ benötigen wir nicht. Im Folgenden erläutert ist der Bezug zu den Legendre-Polynomen.

Definition. Die Legendre-Polynome

$$P_l(u), \quad (u \in [-1, 1]),$$

($l = 0, 1, 2, \dots$) sind definiert durch die erzeugende Funktion

$$g(t, u) := \frac{1}{\sqrt{1 - 2tu + t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} t^l P_l(u), \quad (|t| \leq 1), \quad (\text{D.6})$$

d.h.

$$P_l(u) = \frac{1}{l!} \left(\frac{\partial}{\partial t} \right)^l \frac{1}{\sqrt{1 - 2tu + t^2}} \Big|_{t=0}.$$

Bemerkungen: 1. $P_l(u)$ ist ein (reelles) Polynom in u , da Radikand = 1 bei $t = 0$.

2. Aus $g(-t, -u) = g(t, u)$ folgt

$$P_l(-u) = (-1)^l P_l(u). \quad (\text{D.7})$$

3. Aus $g(t, 1) = (1 - t)^{-1} = \sum_{l=0}^{\infty} t^l$ folgt

$$P_l(1) = 1. \quad (\text{D.8})$$

• Bezug auf Y_{l0} :

$$P_l(\cos \theta) = c_l Y_{l0}(\theta, \varphi) \quad (\text{D.9})$$

mit

$$c_l = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}. \quad (\text{D.10})$$

Denn: Nach (D.7) enthält P_l für l gerade (ungerade) nur Monome gerader (ungerader) Ordnung. Damit ist

$$r^l P_l\left(\frac{x_3}{r}\right), \quad (r^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \quad (\text{D.11})$$

ein Polynom in (x_1, x_2, x_3) und zwar offensichtlich ein homogenes vom Grad l . Harmonisch ist es auch, denn

$$\sum_{l=0}^{\infty} t^l r^l P_l\left(\frac{x_3}{r}\right) = \frac{1}{\sqrt{1 - 2tx_3 + t^2 r^2}} = \frac{1}{|t\vec{x} - \vec{e}_3|}$$

ist es für $|\vec{x}| < 1$ bei $|t| \leq 1$. Schliesslich ist (D.11) invariant unter Drehungen um die 3-Achse. Zusammen: Die Einschränkung $P_l(\cos \theta)$ auf $r = 1$ erfüllt (D.9) aufgrund der Definition von Y_{l0} , wobei c_l noch zu bestimmen bleibt.

• Orthogonalität:

$$\int_{-1}^1 P_{l'}(u) P_l(u) du = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}. \quad (\text{D.12})$$

Denn: Für $l' \neq l$ folgt dies mit $u = \cos \theta$ aus

$$\int_{-1}^1 \overline{P_{l'}(u)} P_l(u) du = c_l c_{l'} \int_0^\pi \overline{Y_{l'0}(\theta, \varphi)} Y_{l0}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta = \frac{c_l c_{l'}}{2\pi} \int_{\Omega} \overline{Y_{l'0}(\vec{e})} Y_{l0}(\vec{e}) d^2 e \quad (\text{D.13})$$

und aus (b) des Satzes. Für $l' = l$: Einerseits ist

$$\begin{aligned} t \int_{-1}^1 g(t, u)^2 du &= \int_{-1}^1 \frac{t}{1 - 2tu + t^2} du = -\frac{1}{2} \log(1 - 2tu + t^2) \Big|_{u=-1}^{u=1} \\ &= -\frac{1}{2} \log \frac{(1-t)^2}{(1+t)^2} = \log \frac{1+t}{1-t}; \end{aligned}$$

andererseits

$$t \int_{-1}^1 g(t, u)^2 du = \sum_{l=0}^{\infty} t^{2l+1} \int_{-1}^1 P_l(u)^2 du .$$

Vergleich und Ableitung nach t liefern

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)t^{2l} \int_{-1}^1 P_l(u)^2 du = \frac{d}{dt} \log \frac{1+t}{1-t} = \frac{2}{1-t^2} = 2 \sum_{l=0}^{\infty} t^{2l}$$

und so (D.12). Nun folgt Gl. (D.10) aus (D.12, D.13) und aus (D.5, D.8).

• Expliziter Ausdruck:

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{du^l} (u^2 - 1)^l .$$

Denn: Für kleine t und $|u| \leq 1$ liegen die Nullstellen z_1 und z_2 von $z \mapsto z^2 + z + (2ut - t^2)/4$ in der Nähe von $z = 0$, bzw. $z = -1$. So kann die erzeugende Funktion als

$$g(t, u) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|z|=\frac{1}{2}} \frac{dz}{z^2 + z + (2ut - t^2)/4} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|z|=\frac{1}{2}} \frac{dz}{(z - z_1)(z - z_2)}$$

geschrieben werden: Die Contour umschliesst nur z_1 , und der Ausdruck ist gleich

$$\frac{1}{z_1 - z_2} = \frac{1}{\sqrt{1 - 2tu + t^2}} .$$

Mit der Variablensubstitution $z = -wt/2$ wird

$$g(t, u) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|w|=\frac{1}{t}} \frac{dw}{w - u + (t/2)(1 - w^2)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|w|=\frac{1}{t}} \frac{dw}{w - u} \frac{1}{1 - \frac{t}{2} \frac{(w^2 - 1)}{(w - u)}} .$$

Für kleine t und $|u| \leq 1$ ist der Betrag des letzten Terms nahe $|tw/2| = 1/2$, also

$$g(t, u) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|w|=\frac{1}{t}} \frac{dw}{w - u} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(t/2)^l (w^2 - 1)^l}{(w - u)^l} .$$

Der l -te Term entspricht einem Pol bei $w = u$ der Ordnung $l + 1$, also

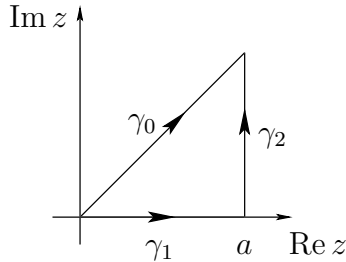
$$g(t, u) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} \left(\frac{t}{2}\right)^l \frac{d^l}{dw^l} (w^2 - 1)^l \Big|_{w=u} = \sum_{l=0}^{\infty} t^l \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{du^l} (u^2 - 1)^l .$$

E Anhang: Die Methode der stationären Phase

Als Vorbereitung liefern wir die Berechnung des Fresnel-Integrals (9.39)

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\pm i\tau^2} d\tau = \sqrt{\pi} e^{\pm i\pi/4}. \quad (\text{E.1})$$

Beweis.



$$\begin{aligned} \gamma_0 : \tau \in (0, \sqrt{2}a) &\mapsto z = e^{i\frac{\pi}{4}} \tau, \\ \gamma_1 : x \in (0, a) &\mapsto z = x, \\ \gamma_2 : t \in (0, 1) &\mapsto z = a(1 + it). \end{aligned}$$

Einerseits ist

$$\int_{\gamma_0} e^{-z^2} dz = e^{i\frac{\pi}{4}} \int_0^{\sqrt{2}a} e^{-i\tau^2} d\tau,$$

andererseits, da e^{-z^2} innerhalb von $\gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_0$ analytisch ist,

$$\int_{\gamma_0} e^{-z^2} dz = \int_{\gamma_1 + \gamma_2} e^{-z^2} dz = \underbrace{\int_0^a e^{-x^2} dx}_{\xrightarrow{a \rightarrow \infty} \sqrt{\pi}/2} + i \int_0^1 dt \underbrace{a e^{-a^2(1-t^2) + 2ita^2}}_{f(a;t)},$$

wobei

$$|f(a;t)| = \begin{cases} \leq C(1-t^2)^{-1/2}, \\ \xrightarrow{a \rightarrow \infty} 0 \text{ punktweise.} \end{cases}$$

Das letzte Integral verschwindet für $a \rightarrow \infty$ (dominierte Konvergenz). Also

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\tau^2} d\tau = 2 \int_0^{\infty} e^{-i\tau^2} d\tau = \sqrt{\pi} e^{-i\pi/4}.$$

□

Wir untersuchen nun die Asymptotik von Integralen des Typs

$$f(t) = \int_{x_1}^{x_2} dx g(x) e^{ith(x)}$$

für $t \rightarrow \infty$. Zuerst sei $h'(x) \neq 0$ im ganzen Intervall $x_1 \leq x \leq x_2$. Dann erhält man durch partielle Integration:

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{1}{it} \int_{x_1}^{x_2} dx \frac{g(x)}{h'(x)} \frac{d}{dx} e^{ith(x)} \\ &= \frac{1}{it} \frac{g(x)}{h'(x)} e^{ith(x)} \Big|_{x_1}^{x_2} - \frac{1}{it} \int_{x_1}^{x_2} dx \left(\frac{d}{dx} \frac{g(x)}{h'(x)} \right) e^{ith(x)} = O(t^{-1}). \end{aligned}$$

Nehmen wir an, $h'(x)$ besitze eine einzige, einfache Nullstelle im Integrationsgebiet:

$$h'(x_0) = 0 ; \quad h''(x_0) \neq 0$$

mit $x_0 \in (x_1, x_2)$. Nach dem oben Gesagten ist nun

$$f(t) = \int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} dx g(x) e^{ith(x)} + O(t^{-1})$$

für beliebiges $\varepsilon > 0$. Im so verkleinerten Integrationsgebiet setzen wir $s = x - x_0$ und entwickeln

$$g(x) = g(x_0) + sg'(x_0) + \dots , \quad h(x) = h(x_0) + \frac{s^2}{2}h''(x_0) + \dots$$

und finden:

$$f(t) = e^{ith(x_0)} g(x_0) \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} ds e^{it\frac{s^2}{2}h''(x_0)} + e^{ith(x_0)} g'(x_0) \underbrace{\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} ds s e^{it\frac{s^2}{2}h''(x_0)}}_{=0} + O(t^{-1}) . \quad (\text{E.2})$$

Im ersten Term benützen wir $\tau = s(t|h''(x_0)|/2)^{1/2}$ als neue Integrationsvariable. Für $t \rightarrow \infty$ gehen dann die Grenzen $\rightarrow \pm\infty$ und es entsteht das Fresnel-Integral (E.1) mit $\pm = \text{sgn } h''(x_0)$. Resultat: für $t \rightarrow \infty$ ist

$$f(t) = \left(\frac{2\pi}{t|h''(x_0)|} \right)^{1/2} e^{i\frac{\pi}{4}\text{sgn } h''(x_0)} \cdot g(x_0) e^{ith(x_0)} + O(t^{-3/2}) .$$

(Eine Abschätzung des Fehlerterms zeigt, dass er relativ zum führenden klein ist, sofern $t \gg (|g''||h''| + |g'||h'''|)|h''|^{-2}|g|^{-1}$ mit Auswertung bei $x = x_0$). Analoge, n -dimensionale Integrale

$$f(t) = \int_G d^n x g(x) e^{ith(x)}$$

behandelt man ebenfalls, indem man die Phase um jeden stationären Punkt x_0 , $\partial h / \partial x_i(x_0) = 0$, quadratisch approximiert:

$$h(x) = h(x_0) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n s_i s_j \frac{\partial^2 h}{\partial x_i \partial x_j}(x_0) + \dots .$$

Die symmetrische Matrix $\partial^2 h(x_0) = (\partial^2 h / \partial x_i \partial x_j)(x_0)$ kann auf Hauptachsenform gebracht werden und das (E.2) entsprechende Integral faktorisiert. Resultat:

$$f(t) = \left(\frac{2\pi}{t} \right)^{n/2} |\det \partial^2 h(x_0)|^{-1/2} e^{i\frac{\pi}{4}\text{sgn } \partial^2 h(x_0)} \cdot g(x_0) e^{ith(x_0)} + O(t^{-(n/2+1)}) , \quad (\text{E.3})$$

wobei $\text{sgn } A = (\# \text{ positive} - \# \text{ negative})$ Eigenwerte von A .

F Anhang: Symmetrien in der Quantenmechanik

Es soll hier der Satz von Wigner auf S. 96 wiederholt und bewiesen werden.

Satz. Sei $\Pi(\mathcal{H})$ die Menge der 1-dimensionalen orthogonale Projektoren. Jede Abbildung $S : \Pi(\mathcal{H}) \rightarrow \Pi(\mathcal{H}')$ mit

$$\text{tr}(\Pi_1 \Pi_2) = \text{tr}(\Pi'_1 \Pi'_2) . \quad (\text{F.1})$$

ist dargestellt als

$$S(\Pi) = U \Pi U^* \quad (\text{F.2})$$

mit U einer linearen oder antilinearen Isometrie $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}'$. Die Alternative ist eindeutig und U selbst ist es bis auf Multiplikation mit einer Phase $c \in \mathbb{C}$, $|c| = 1$.

Als Vorbemerkung zum Beweis sei bemerkt, dass eine Isometrie von selbst linear oder antilinear ist. Besser: falls $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}'$, $a \mapsto a' = U(a)$

$$(a', b') = \begin{cases} (a, b) \\ (b, a) , \end{cases} \quad (\text{F.3})$$

erfüllt, so gilt

$$(a + b)' = a' + b' , \quad (\lambda a)' = \begin{cases} \lambda a' \\ \bar{\lambda} a' . \end{cases} \quad (\text{F.4})$$

Dann ist nämlich für alle $\phi' = U(\phi)$, a_1, a_2

$$\begin{aligned} (\phi', (a_1 + a_2)') &= \begin{cases} (\phi_1, a_1 + a_2) = (\phi_1, a_1) + (\phi_1, a_2) \\ (a_1 + a_2, \phi) = (a_1, \phi) + (a_2, \phi) \end{cases} \\ &= (\phi', a'_1) + (\phi', a'_2) = (\phi', a'_1 + a'_2) \end{aligned}$$

und somit auch für ϕ' in der abgeschlossenen linearen Hülle von $\{U(\phi) | \phi \in \mathcal{H}\}$. Es folgt die erste Gleichung (F.4). Die zweite folgt analog.

Der folgende Beweis (Hunziker) des Satzes beruht auf vier elementaren Lemmas:

Lemma 1. i) Die Abbildung $S : \Pi(\mathcal{H}) \rightarrow \Pi(\mathcal{H}')$ besitzt sowohl eine lineare wie auch eine antilineare Erweiterung $S : [\Pi(\mathcal{H})] \rightarrow [\Pi(\mathcal{H}')]$ auf die \mathbb{C} -lineare Hülle $[\Pi(\mathcal{H})]$. Sie erfüllen

$$\text{tr} S(A)^* S(B) = \begin{cases} \text{tr} A^* B & (\text{linear}) \\ \overline{\text{tr} A^* B} & (\text{antilinear}). \end{cases} \quad (\text{F.5})$$

Für $A = A^*$, $B = B^*$, $[A, B] = 0$ gilt ferner

$$S(A)S(B) = S(AB) \quad (\text{F.6})$$

ii) $[\Pi(\mathcal{H})] = \{\text{Operatoren } \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}' \text{ von endlichem Rang}\}$.

Beweis. i) Die Identität

$$\left(\sum_j \tilde{\lambda}_j \tilde{\Pi}_j \right)^* \left(\sum_i \lambda_i \Pi_i \right) = \sum_{j,i} \overline{\tilde{\lambda}_j} \lambda_i \tilde{\Pi}_j \Pi_i$$

und (F.1) zeigen:

- Die Definition

$$S\left(\sum_i \lambda_i \Pi_i\right) = \sum_i \lambda_i^{(-)} \Pi'_i$$

ist wohldefiniert, denn mit $(A = 0 \Leftrightarrow \text{tr } A^* A = 0)$, $\tilde{\Pi}_i = \Pi_i$, $\tilde{\Pi}'_i = \Pi'_i$, $\tilde{\lambda}_i = \lambda_i$ (bzw. $\tilde{\lambda}_i = \overline{\lambda_i}$) folgt

$$\sum_i \lambda_i \Pi_i = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_i \lambda_i^{(-)} \Pi'_i = 0.$$

- Gl. (F.5) gilt.
- Unter der zusätzlichen Voraussetzung können A, B gemeinsam diagonalisiert werden, also $\tilde{\Pi}_i = \Pi_i$. Dann ist $\Pi_i \Pi_j = \delta_{ij} \Pi_i$ und ebenso $\Pi'_i \Pi'_j = \delta_{ij} \Pi'_j$, da $\Pi \tilde{\Pi} = 0 \Leftrightarrow \text{tr}(\Pi \tilde{\Pi}) = 0$.

ii) Es ist $|a\rangle\langle a| \in [\Pi(\mathcal{H})]$. Operatoren vom Rang 1 sind von der Form $|a\rangle\langle b|$ und damit

$$|a\rangle\langle b| = \frac{1}{4} \sum_{k=0}^3 i^k |a + i^k b\rangle\langle a + i^k b| \in [\Pi(\mathcal{H})].$$

□

Korollar. Für jene der beiden Abbildungen, deren (Anti-)Linearität mit derjenigen von U aus dem Satz übereinstimmt, gilt

$$S(A) = UAU^*.$$

Lemma 2. Sei $M \subset \mathcal{H}$, $\dim M < \infty$. Dann gibt es $M' \subset \mathcal{H}$, $\dim M' = \dim M$ mit

$$R(\Pi) \subset M \quad \Rightarrow \quad R(\Pi') \subset M'.$$

(Notationen: $R(\Pi)$ Wertebereich (Bild) von Π ; $M' = S(M)$).

Beweis. $P'_M := S(P_M)$ ist nach (F.6) ein Projektor derselben Dimension wie P_M ($\text{tr } P = \dim R(P)$). Setze $M' = R(P'_M)$. Die Behauptung folgt aus (F.6) und

$$R(\Pi) \subset M \quad \Leftrightarrow \quad P_M \Pi = \Pi P_M = \Pi.$$

□

Lemma 3. Die Behauptung (F.2), und somit auch das Korollar, gelten für $\dim \mathcal{H} = 2$.

Beweis. Durch Einführung von orthonormierten Basen in \mathcal{H} und $S(\mathcal{H}) \subset \mathcal{H}'$ können wir annehmen $\mathcal{H} = S(\mathcal{H}) = \mathbb{C}^2$. Dann ist

$$\Pi(\mathcal{H}) = \left\{ \Pi = \frac{1}{2}(1 + \vec{e} \cdot \vec{\sigma}) \mid \vec{e} \in S^2 \right\}$$

und S stiftet eine Abbildung $S : S^2 \rightarrow S^2, \vec{e} \mapsto \vec{e}'$ mit (wegen (F.1))

$$\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2 = \vec{e}'_1 \cdot \vec{e}'_2,$$

d.h. eine Abbildung $S \in O(3)$. Wir unterscheiden:

i) $\det S = +1$: Nach (4.12) ist

$$S \vec{e} \cdot \vec{\sigma} = U(\vec{e} \cdot \vec{\sigma})U^* ,$$

d.h. $S(\Pi) = U\Pi U^*$ mit $U \in SU(2)$ (**unitärer** Fall).

ii) $\det S = -1$: Angesichts von i) genügt es, eine einzige Drehung mit $\det S = -1$ zu betrachten:

$$S \vec{e} = (e_1, -e_2, e_3).$$

Dann ist

$$U\sigma_i U^* = \begin{cases} \sigma_i , & (i = 1, 3) \\ -\sigma_i , & (i = 2) \end{cases}$$

für die **antiunitäre** Abbildung $U \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{z}_1 \\ \bar{z}_2 \end{pmatrix}$. Also $S(\Pi) = U\Pi U^*$. \square

Bemerkung. S , nicht aber $\det S$, hängt von obiger Basiswahl ab.

Im allgemeinen Fall sei $M \subset \mathcal{H}$ ein beliebiger Teilraum mit $\dim M = 2$ und sei $S \upharpoonright M$ die Einschränkung von S auf $\Pi(M)$.

Lemma 4. $\det(S \upharpoonright M)$ ist unabhängig von M (Bezeichnung: $\text{sgn } S$).

Beweis. Wegen (F.1) ist

$$\text{tr}(\Pi'_1 - \Pi'_2)^2 = \text{tr}(\Pi_1 - \Pi_2)^2$$

und somit ist $S : \Pi(\mathcal{H}) \rightarrow \Pi(\mathcal{H})$ stetig. Für eine stetige Familie $M(t)$ von Teilräumen können die Basen in $M(t)$ und $S(M(t))$ stetig gewählt werden. Damit ist $\det S(M(t))$ stetig und folglich konstant. \square

Beweis des Satzes. Sei $M \subset \mathcal{H}$, $\dim M = 2$ beliebig und $U(M) : M \rightarrow \mathcal{H}'$ der (anti-)lineare Operator aus Lemma 3. Wähle ein festes $\Pi_0 \in \Pi(\mathcal{H})$ und feste $e \in R(\Pi_0)$, $e' \in R(\Pi'_0)$ mit $\|e\| = \|e'\| = 1$. Dann ist für jedes $M \ni e$

$$\Pi'_0 U(M)e = U(M)\Pi_0 e = U(M)e$$

und wir legen die Phase von $U(M)$ fest durch

$$U(M)e = e' . \tag{F.7}$$

Konstruktion von $U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}'$:

$$a' \equiv U(a) := U(M)a , \quad (a \in \mathcal{H}) ,$$

wobei $M \ni e, a$. (M , und damit a' , ist eindeutig, falls a, e linear unabhängig sind; andernfalls ist es a' wegen (F.7) trotzdem). Zu zeigen bleibt die Alternative (F.3), und zwar je nach $\text{sgn } S$. Betrachte dazu die Erweiterung aus dem Korollar für $M \ni e, a$:

$$S(|e\rangle\langle a|) = U(M)|e\rangle\langle a|U(M)^* = |e'\rangle\langle a'| ,$$

und ebenso für $a \rightsquigarrow b$. Dann ist einerseits

$$\text{tr } S(|e\rangle\langle b|)^* S(|e\rangle\langle a|) = \text{tr} (|e'\rangle\langle b'|)^* |e'\rangle\langle a'| = \text{tr} (|b'\rangle\langle e'|e'\rangle\langle a'|) = (a', b') ,$$

was andererseits nach (F.5) im linearen Fall auch gleich

$$\text{tr} (|e\rangle\langle b|)^* |e\rangle\langle a| = (a, b)$$

ist, und $= (b, a)$ im antilinearen. \square

Literaturhinweise

Elektrodynamik

- J. D. Jackson, “Classical Electrodynamics” Wiley 1998
- W. K. H. Panofsky, M. Phillips, “Classical Electricity and Magnetism”, Addison-Wesley 1969
- L. D. Landau, E. M. Lifshitz, “Lehrbuch der Theoretischen Physik (Band 2). Klassische Feldtheorie”, Harri Deutsch 2009
- R. Becker, F. Sauter, “Theorie der Elektrizität, Band I-III”, Teubner, 1959
- A. Sommerfeld, “Vorlesungen über theoretische Physik (Band 3): Elektrodynamik”, Harri Deutsch 2005
- F. E. Low, “Classical field theory: electromagnetism and gravitation”, Wiley 1997
- R. K. Wangsness, “Electromagnetic fields”, Wiley 1986
- M. H. Nayfeh, M. K. Brussel, “Electricity and magnetism”, Wiley 1985
- M. Schwartz, “Principles of Electrodynamics”, McGraw-Hill 1972
- W. E. Thirring, “Lehrbuch der Mathematischen Physik (Band 2). Klassische Feldtheorie”, Springer 1990
- T. Fließbach, “Elektrodynamik”, Spektrum 2012
- G. Scharf, “From electrostatics to optics: a concise electrodynamics course”, Springer 1994
- N. Straumann, “Elektrodynamik”, “Spezielle Relativitätstheorie”, <http://www.vertigo-center.ch/straumann/norbert/>

Quantenmechanik

- G. Auletta, M. Fortunato, G. Parisi, “Quantum mechanics”, Cambridge University Press 2009
- G. Baym, “Lectures on quantum mechanics”, Addison-Wesley Publishing 1996
- C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, “Quantenmechanik”, de Gruyter 1999
- R. P. Feynman, “Vorlesungen über Physik (Band 3: Quantenmechanik)”, Oldenbourg 1999
- L. D. Landau, E. M. Lifshitz, “Lehrbuch der theoretischen Physik (Band 3). Quantenmechanik”, Verlag Harri Deutsch 2009 1990

- A. Messiah, “Quantum mechanics”, Dover 1999
- W. Pauli, “Die allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik”, Springer 1990
- A. Peres, “Quantum theory: concepts and methods”, Kluwer 1995
- F. Scheck, “Nichtrelativistische Quantentheorie”, Springer 1999
- F. Schwabl, “Quantenmechanik”, Springer 2002
- N. Straumann, “Quantenmechanik : ein Grundkurs ber nichtrelativistische Quantentheorie”, Springer 2013
- B. Thaller, “Visual quantum mechanics”, Springer 2000
- W. Thirring, “Quantum mathematical physics: atoms, molecules and large systems”, Springer 2003

Index

- Absorption, 59
- Auf- und Absteigeoperatoren, 99
- Balmer-Formel, 54
- Bloch-Kugel, 110
- Clebsch-Gordan Reihe, 102
- Darstellung, 83
- Dichtematrizen, 109
- Doppelspaltexperiment, 62
- Drehimpuls, 55, 84, 86, 98
- Dynamik, 76
- Eichtransformationen, 76
- Element physikalischer Wirklichkeit, 112
- Entartung, 58, 88
- EPR-Paar, 112
- EPR-Paradoxon, 112
- Erhaltungsgrösse, 83
- Erwartungswert, 71, 74
- Erzeugungsoperator, 80
- freies Teilchen, 63
- gemischte Zustände, 109
- gemischter Zustand, 109
- Hamilton-Jacobi Gleichung, 57, 58
- Hamiltonoperator, 76
- harmonischer Oszillator, 50, 79
- Heisenberg-Bild, 77
- Heisenberg-Gleichung, 68
- Impulsoperator, 72
- induzierte Emission, 59
- infinitesimale Drehung, 97
- irreduzible Darstellung, 99
- kanonische Quantisierung, 76
- kohärente Zustände, 82
- Kontinuitätsgleichung, 65
- Korrespondenzprinzip, 56, 67
- Messwerte, 74
- Normalbasis, 100
- Operator, 70
- orthogonaler Projektor, 70, 73
- Ortsoperator, 71
- Pauli-Matrizen, 104
- photoelektrischer Effekt, 54
- Präparation der Zustände, 76
- Produktbasis, 101
- projektive Darstellung, 96
- Projektor, 73
- Quantenbedingung, 52, 55, 56
- Raumspiegelung, 95
- Schrödinger-Bild, 77
- Schrödinger-Gleichung, 63
- Schwankungsquadrat, 71
- Spektralsatz, 73
- Spektrum, 71
- Spin, 62, 107
- spontane Emission, 59
- Störung, 90
- Stark-Effekt, 92
- Stern-Gerlach Analysator, 109
- Strahlungsgesetz, 52
- Symmetrie, 94
- Symmetriegruppe, 83
- Teleportation, 118
- Tensorprodukt, 101
- Tensorproduktdarstellung, 102
- unitäre Darstellung, 97
- Unschärferelation, 75
- verborgene Variablen, 113
- Vernichtungsoperator, 80
- Verschiebungsoperator, 81
- vollständig separable Systeme, 57
- Wahrscheinlichkeit, 59, 66, 70, 73, 113
- Wasserstoff-Atom, 54, 59, 87
- Wellenfunktion, 65
- Wirkung, 56
- Zeeman-Effekt, 107
- Zeitumkehr, 95