# Notes - Theoretische Physik (Bachelor)

Vorlesungen aus mehreren Semestern an der RWTH Aachen

Autor: Jannis Zeller

Letzte Änderung: 4. Oktober 2022

# Inhaltsverzeichnis

1 Crashzusammenfassung Mathematik			ummenfassung Mathematik	8		
	1.1	1.1 Lineare Algebra				
		1.1.1	Epsilon - Delta Spaß für Physiker	8		
		1.1.2	Basiswechsel und Transformation	9		
		1.1.3	Das Eigenwertproblem	10		
	1.2	Analy	sis und Vektoranalysis	10		
		1.2.1	Mehrdimensionale Kettenregel	10		
		1.2.2	Rotation, Divergenz und Laplace-Operator	11		
		1.2.3	Krummlinige Koordinatensystemen	12		
		1.2.4	Integralsätze	13		
		1.2.5	Extremwertprobleme	13		
		1.2.6	Mehrdimensionale Taylorentwicklung	14		
	1.3	Delta	- Distribution	15		
	1.4	Fourie	r Transformation	15		
0	IZI.	. 1	March and In	1 🗖		
2	$\mathbf{N}$	Noute	Wiechanik	17		
	2.1		Calilaigabas Palativitätanvingin	17		
		2.1.1	Gameisches Relativitätsprinzip	17		
		2.1.2	Die Newtonschen Axiome	10		
		2.1.3	Invarianz und Forminivarianz	10		
		2.1.4 2.1.5	Prinaitungssatze für abgeschlossene Systeme	19		
	<u></u>	2.1.0	weiler werden werden der stehten sonnen sonn	21 91		
	2.2	Das Z	All generating Detro obtain g	21 91		
		2.2.1	Angemeine Detrachtung      Pahrtman	21 99		
		2.2.2		22 92		
		2.2.3	Das Keplerproblem	-∠ə 92		
	<u> </u>	Logro	ngo Mochanik	20 94		
	2.0	021	Konfigurationsraum und Lagekoordinaten	24 94		
		2.J.1 9.2.9	Lagrange Cleichungen erster Art	24 94		
		$\begin{array}{c} 2.3.2 \\ 2.3.2 \end{array}$	Variationon	$\frac{24}{25}$		
		2.0.0	Lagrange Cleichungen zweiter Art	20 25		
		2.0.4 2.2.5	Das Hamiltonsche Prinzin	20 26		
		2.0.0	Waitara Aspokta	$\frac{20}{97}$		
		2.3.0 2.3.7	Frhaltungsgrößen und Satz von Noether	$\frac{21}{97}$		
		2.J.1 9.2.Q	Das Prinzip von Fulor Mauportuis	41 28		
		2.3.0 2.2.0	Variationspringinion	$\frac{20}{20}$		
	2 1	2.J.9 Schwir	variationsprinzipien	- <u>∠</u> 9 20		
	4.4	JUIWII		54		

		2.4.1 Konservative schwingende Systeme			. 32
		2.4.2 Diskrete Symmetrien			. 32
		2.4.3 Der eindimensionale Oszillator		•	. 33
		2.4.4 Saitenschwingung		•	. 33
	2.5	Feste Körper		•	. 34
		2.5.1 Massenverteilung und Trägheitstensor		•	. 34
		2.5.2 Bewegungsgleichungen		•	. 35
	2.6	Hamiltonsche Systeme		•	. 36
		2.6.1 Die kanonischen Bewegungsgleichungen		•	. 36
		2.6.2 Kanonische Transformationen		•	. 37
		2.6.3 Kanonische Flüsse		•	. 38
		2.6.4 Satz von Liouville		•	. 38
		2.6.5 Erhaltungsgrößen		•	. 39
		2.6.6 Erzeugung kanonischer Transformationen		•	. 39
	2.7	Hamilton-Jacobi-Theorie			. 40
		2.7.1 Der zeitunabhängige Fall			. 40
		2.7.2 Separation		•	. 40
		2.7.3 Winkel-Wirkungsvariablen		•	. 41
		2.7.4 Zeitabhängige Hamilton-Jacobi Gleichung		<b>.</b> .	43
•	G				
3	Spe	ezielle Relativitatstheorie			44
	3.1 2.0	Das Einsteinsche Relativitatsprinzip	• •	• •	. 44
	3.2	Die Vierdimensionale Raumzeit	• •	• •	. 44
		3.2.1 Vierer-Vektoren und Tensoren	• •	• •	. 44
	0.0	5.2.2 Die Lorentztransformation	• •	• •	. 48
	3.3	Polgerungen der Lorentztransformation	• •	• •	. 49
		3.3.1 Relativitat des Abstandes	• •	• •	. 49
		3.3.2 Zeltdilatation	• •	• •	. 49
		$3.3.3$ Doppler-Effect $\dots$	• •	• •	. 50
		3.3.4 Langenkontraktion	• •	• •	. 50
	9.4	3.3.5 Relativistische Geschwindigkeitsaddition	• •	• •	. 51
	3.4	Relativistische Mechanik	• •	• •	. DI
		3.4.1 Hamiltonscies Prinzip und Lagrangelunktion	• •	• •	. 01 E0
		3.4.2 Energie und impuis	• •	• •	. 02 E2
		3.4.3 Vierer-Geschwindigkeit und Vierer-Impuls	• •	• •	. 00 E9
		3.4.4 Bewegungsgielenung	• •	• •	. 03 E4
		3.4.5 Aquivalente Lagrangerunktion und Satz von Noetner	• •	• •	. 04 FF
		3.4.0 Kinetische und Potenzielle Energie	• •	• •	. 00 FF
		2.4.8 Zowfell von Teilehen	• •	• •	. 00 56
		2.4.0 Der Vierer Drehimpuls	• •	• •	. 30 57
		5.4.9 Der vierer-Dreininpuls	• •	• •	. 57
4	Elel	ektromagnetismus			59
	4.1	Grundlagen		•	. 59
		4.1.1 cgs-System		•	. 59
		4.1.2 Greensche Funktionen		•	. 60
		4.1.3 Helmholtzscher Hauptsatz der Vektoranalysis		•	. 62
		4.1.4 Vollständige orthonormierte Funktionensysteme		•	. 63
	4.2	Elektrostatik		•	. 64

	4.2.1	Integraldarstellung der Felder	. 64
	4.2.2	Kräfte	. 65
	4.2.3	Elektrische Energie	. 65
	4.2.4	Multipoletwicklung	. 66
	4.2.5	Ernshaw Theorem	. 69
	4.2.6	Leiter	. 69
	4.2.7	Kondensatoren	. 70
	4.2.8	Lösungsmethoden für Randwertprobleme	. 71
4.3	Elektı	rostatik mit Dielektrika	. 76
	4.3.1	Polarisationsvektor	. 76
	4.3.2	Homogene Polarisation	. 77
	4.3.3	Feldgleichungen mit Dielektrika	. 78
	4.3.4	Dielektrika und Grenzflächen	. 79
	4.3.5	Energie und Kräfte in Dielektrika	. 79
	4.3.6	Polarisierbarkeit von Atomen und Molekülen	. 80
4.4	Magn	etostatik	. 80
	4.4.1	Ladungserhaltung und Feldgleichungen	. 80
	4.4.2	Vektorpotenzial	. 81
	4.4.3	Kräfte auf Ladungsstromdichten	. 82
	4.4.4	Magnetisches Dipolmoment	. 83
	4.4.5	Magnetostatik in Materie	. 84
	4.4.6	Magnetostatik an Grenzflächen	. 84
4.5	Elektr	odynamik	. 85
	4.5.1	Maxwell-Gleichungen	. 85
	4.5.2	Potenzialgleichungen	. 86
	4.5.3	Erhaltungssätze	. 87
	4.5.4	Induktion	. 89
	4.5.5	Magnetische Energie	. 89
4.6	Elektr	odynamik in relativistischer Form	. 90
	4.6.1	Kovariante Gleichungen	. 90
	4.6.2	Maxwell Gleichungen	. 92
	4.6.3	Transformation der Felder	. 93
	4.6.4	Lagrangeformalismus für Teilchen im elektromagnetischen Feld	. 94
	4.6.5	Energie-Impuls-Tensor	. 95
4.7	Elektr	comagnetische Wellen im Vakuum	. 95
	4.7.1	Die monochromatische ebene Welle	. 95
	4.7.2	Zu komplexen Feldern	. 97
	4.7.3	Allgemeine Lösung	. 98
	4.7.4	Gruppengeschwindigkeit	. 98
	4.7.5	Hohlraumresonator	. 99
4.8	Elektı	comagnetische Wellen im Medium	. 101
	4.8.1	Homogenes, nichtleitendes Medium	. 101
	4.8.2	Leitfähiges, homogenes Medium	. 101
	4.8.3	Lorentz-Modell	. 102
	4.8.4	Brechung und Reflexion	. 103
4.9	Inhor	nogene Wellengleichung	. 103
	4.9.1	Retardierte Potenziale	. 103
	4.9.2	Liénard-Wiechert-Potenziale	. 104

	4.9.3	Dipolstrahlung	. 105
5 Qua	antenm	nechanik	107
5.1	Einfüh	nrung: Grenzen der klassischen Physik	. 107
	5.1.1	Schwarzkörperstrahlung	. 107
	5.1.2	Doppelspaltexperiment	. 108
	5.1.3	Stern-Gerlach Versuch I	. 108
5.2	Unitär	re Räume	. 109
	5.2.1	Der Duale Raum	. 110
	5.2.2	Operatoren	. 111
	5.2.3	Endlichdimensionale Spektraltheorie	. 111
	5.2.4	Kommutator und Spektraltheorie	. 113
	5.2.5	Funktionen von Operatoren	. 113
	5.2.6	Stern-Gerlach-Versuch II - Operatormethode	. 114
5.3	Konzej	pte der Statistik	. 116
	5.3.1	Erwartungswert und Varianz	. 116
	5.3.2	Heisenbergsche Unschärferelation	. 117
5.4	Wellen	npakete und Schrödingergleichung	. 117
	5.4.1	Materiewellen	. 118
	5.4.2	Orts- und Impulsdarstellung	. 119
	5.4.3	Schrödingergleichung	. 120
5.5	Sepera	able Hilberträume	. 120
	5.5.1	Funktionale auf Hilberträumen	. 121
	5.5.2	Lineare Operatoren	. 121
	5.5.3	Ortsoperator I	. 122
	5.5.4	Spektraltheorie	. 123
	5.5.5	Impulsoperator	. 125
	5.5.6	Räumliche Translation	. 127
5.6	Die Po	ostulate der Quantenmechanik	. 127
	5.6.1	Zustände und physikalische Größen	. 127
	5.6.2	Statistik und Messung	. 128
	5.6.3	Dynamik des Systems	. 129
5.7	Schröc	lingergleichung	. 129
	5.7.1	Zeitentwicklung	. 129
	5.7.2	Wahrscheinlichkeitsstromdichte	. 131
	5.7.3	Freies Teilchen	. 131
	5.7.4	Eindimensionale Probleme	. 132
	5.7.5	Paritatsoperator	. 135
<b>F</b> 0	5.7.0 D. H	Schrödingergleichung in mehreren Dimensionen	. 135
5.8	Der Ha		. 137
5.9	Drenin	npulsoperatoren	. 139
	5.9.1 5.0.2	Angemeiner Drenimpulsoperator	. 140
	0.9.2 5.0.2	Damarenimpuls	. 141 144
5 10	0.9.3 Dec W	Instation und Drennipulsoperator	. 144 145
0.10	Das W	Tensorprodultroum	. 140 145
	5.10.1	Zentralpotenzial	. 140 146
	5.10.2		. 140 146
	0.10.3		. 140

	5.11	Kombi	ination von Spin und Bahnfreiheitsgraden	149
		5.11.1	Freiheitsgrad	149
		5.11.2	Kombination verschiedener Hilberträume	150
		5.11.3	Pauli Gleichung	151
	5.12	Additi	on von Drehimpulsen	151
		5.12.1	Addition zweier Spin-1/2 Teilchen	152
		5.12.2	Gesamtdrehimpuls eines Elektrons	153
		5.12.3	Allgemeine Theorie	154
	5.13	Dynan	nik von Quantensystemen	154
		5.13.1	Zeitentwicklungsoperator	154
		5.13.2	Schrödingerbild	155
		5.13.3	Heisenbergbild	156
		5.13.4	Erhaltungsgrößen und Invarianzen	157
		5.13.5	Ehrenfest Theorem	158
		5.13.6	Dirac- / Wechselwirkungsbild	158
	5.14	Näher	ungsmethoden	159
		5.14.1	Variationsprinzip	160
		5.14.2	Zeitunabhängige Störungstheorie	160
		5.14.3	Zeitabhängige Störungstheorie	162
		5.14.4	Wasserstoffatom im elektromagnetischen Strahlungsfeld	164
	5.15	Beweg	ung im Elektromagnetischen Feld	165
		5.15.1	Bewegungsgleichung der Operatoren	165
		5.15.2	Eichtransformationen	166
		5.15.3	Landau Niveaus	167
		5.15.4	Der Aharonov-Bohm-Effekt	168
	5.16	Ununt	erscheidbare Teilchen	169
		5.16.1	Zustand ununterscheidbarer Teilchen	170
		5.16.2	Pauli-Prinzip	170
		5.16.3	Ununterscheidbare Teilchen	171
		5.16.4	Eigenschaften von nicht wechselwirkenden ident. Teilchen . $\ .$	172
	5.17	Viel E	lektronen Atom	172
6	Stat	istisch	e Physik	174
	6.1	Einfüh	rung und Grundlagen	174
		6.1.1	Fragestellung der statistischen Physik	174
		6.1.2	Methodik der statistischen Physik	174
		6.1.3	Statistische Methoden und Zentraler Grenzwertsatz	175
		6.1.4	Ensemble in der klassischen Mechanik	178
		6.1.5	Ensemble in der Quantenmechanik	180
	6.2	Gleich	gewichtsensemble	183
		6.2.1	Mikrokanonisches Ensemble	183
		6.2.2	Entropie und Information	188
		6.2.3	Ergodizität	189
		6.2.4	Temperatur und Gleichgewicht	190
		6.2.5	Außere Parameter und Druck	191
		6.2.6	Das Kanonische Ensemble	193
		6.2.7	Virialtheorem und Gleichverteilungssatz	195
		6.2.8	Großkanonisches Ensemble	196

6.2.9	Gegenüberstellung der Ensemble			199
Thermodynamik				199
6.3.1	Der Nullte Hauptsatz der Thermodynamik			199
6.3.2 Der Erste Hauptsatz der Thermodynamik			•	199
6.3.3 Statistische Bedeutung der Wärme			•	200
6.3.4	Thermodynamische Prozesse		•	201
6.3.5	Arbeit und Wärme sind keine Zustandsfunktionen		•	203
6.3.6	Der Zweite Hauptsatz der Thermodynamik		•	203
6.3.7	Kreisprozesse			204
6.3.8	Der Dritte Hauptsatz der Thermodynamik		•	206
6.3.9	Legendre-Transformation		•	207
6.3.10	Thermodynamische Potenziale		•	208
6.3.11	Extremaleigenschaften der thermodynamischen Potenziale		•	211
6.3.12	Maxwell-Relationen und Kalkül		•	211
6.3.13	Responsefunction			213
6.3.14	Stabilität und Responsefunktionen			214
6.3.15	Absolute und Empirische Temperatur		•	215
6.3.16	Phasendiagramme			215
6.3.17	Van-der-Waals-Zustandsgleichung		•	217
6.3.18	Chemisches Gleichgewicht und Massenwirkungsgesetz		•	219
Ideale	Quantengase			221
6.4.1	Fockraum		•	221
6.4.2	Großkanonisches Potenzial und Verteilungen			223
6.4.3	Thermodynamischer Grenzfall und Einteilchenzustandsdichte .		•	225
6.4.4	Klassischer Grenzfall			226
6.4.5	Das entartete Fermi-Gas		•	227
6.4.6	Bose-Einstein-Kondensation		•	228
6.4.7	Photonengas		•	230
6.4.8	Phononen			231
6.4.9	Phasenübergänge		•	233
	6.2.9 Therm 6.3.1 6.3.2 6.3.3 6.3.4 6.3.5 6.3.6 6.3.7 6.3.8 6.3.7 6.3.8 6.3.9 6.3.10 6.3.12 6.3.13 6.3.12 6.3.13 6.3.14 6.3.15 6.3.16 6.3.17 6.3.18 Ideale 6.4.1 6.4.2 6.4.3 6.4.4 6.4.5 6.4.6 6.4.7 6.4.8 6.4.9	6.2.9       Gegenüberstellung der Ensemble         Thermodynamik	6.2.9       Gegenüberstellung der Ensemble         Thermodynamik	6.2.9       Gegenüberstellung der Ensemble         Thermodynamik

# Disclaimer

Diese Zusammenfassung ist nicht offiziell von der RWTH Aachen oder Dozierenden der betreffenden Lehrveranstaltungen bestätigt oder erprobt. Sie wurde nach bestem Wissen und Gewissen erstellt.

# Vorbemerkung

Diese Zusammenfassung beruht vor allem auf meinen Mitschriften und den Skripten der Vorlesungen:

- Theoretische Physik I Mechanik bei Prof. Fabian Hassler, Sommersemester 2016
- Theoretische Physik II Elektrodynamik bei Prof. Barbara Terhal, Wintersemester 2016/2017 (Skript von Prof. Hans-Jörg Kull Wintersemester 2015/16)
- Theoretische Physik III Quantenmechanik bei Prof. Riccardo Mazzarello, Sommersemester 2017
- Theoretische Physik IV Statistische Physik bei Prof. Stefan Wessel, Wintersemester 2017/2018

an der RWTH Aachen. Die notwendige Mathematik werde ich nur an Stellen, an denen wir auch in der Vorlesung selbst rein mathematische Themen diskutiert haben neu einführen.

# Notation

Zu Beginn jedes Kapitels gehe ich, falls es Besonderheiten in der Notation gibt, kurz auf diese ein. Allgemein gilt die **Einsteinsche Summenkonvention**, das heißt über in einem Produkt doppelt auftretende lateinische Indizes wird von 1 bis 3 und über griechische von 0 bis 3 summiert. Bei griechischen Indizes gilt dies nur, wenn jeweils ein Index hoch und einer tief steht, weshalb wird im Teil über spezielle Relativitätstheorie deutlich. Es gilt also:

$$a_i b_i = \sum_{i=1}^3 a_i b_i$$
,  $a_\mu b^\mu = \sum_{\mu=0}^3 a^\mu b^\mu$ .

Wenn an bestimmten Stellen ein Index nur zur Nummerierung, wie z.B. Eigenvektor und zugehöriger Eigenwert, verwendet wird, wird ausdrücklich darauf hingewiesen, dass nicht summiert wird.

# Kapitel 1

# Crashzusammenfassung Mathematik

Ich möchte hier, wie gesagt, nicht die gesamten mathematischen Grundkenntnisse zusammenfassen, die benötigt werden. Allerdings halte ich es für sinnvoll einige hilfreiche Definitionen und Gleichungen kurz zu Beginn anzugeben. Dabei muss man die Kapitelüberschriften stets so verstehen, dass an derjenigen Stelle nur die zusätzlichen Teile aus dem jeweiligen Bereich folgen, nicht dass dort das gesamte benötigte Rüstzeug zu dem Thema zu finden ist.

## 1.1 Lineare Algebra

Ich gehe davon aus, dass Objekte wie das Spat- / Vektorprodukt, das Skalarprodukt usw. bekannt sind.

## 1.1.1 Epsilon - Delta Spaß für Physiker

Nützliche Tensoren der Vektoranalysis sind das **Kronecker-Delta** und der **Epsilon-Tensor** (auch Levi-Civita-Symbol, Total-Antisymmetrischer Tensor):

$$\delta_{ik} = \begin{cases} 1 & i = k \\ 0 & i \neq k \end{cases}, \qquad \epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & (i, j, k) \in \{(1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2)\} \\ -1 & (i, j, k) \in \{(3, 2, 1), (2, 1, 3), (1, 3, 2)\} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Praktische Darstellungen dieser durch kartesische Basisvektoren, mit denen man viele Identitäten leicht zeigen kann sind:

$$\delta_{ik} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_k, \qquad \epsilon_{ijk} = \mathbf{e}_i \cdot (\mathbf{e}_j \times \mathbf{e}_k) = \det(\mathbf{e}_i | \mathbf{e}_j | \mathbf{e}_k).$$

Mit der einsteinschen Summenkonvention gilt insbesondere

$$\delta_{ik}a_i = a_k$$

Als Matrix stellt das Kronecker-Delta die Identitätsmatrix dar. Für den  $\epsilon$ -Tensor gilt die sog.

**Grassmann-Identität:** 
$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{klm} = \delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl}$$
.

Damit folgt für das Kreuzprodukt, welches sich durch:

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b})_i = \epsilon_{ijk} a_j b_k$$

darstellen lässt die sog. baccab - Regel:

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b} (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c} (\mathbf{b} \cdot \mathbf{a})$$

## 1.1.2 Basiswechsel und Transformation

Lineare Transformationen zwischen Koordinatensystemen mit orthonormierter Basis kann man durch orthogonale Rotationsmatrizen R mit  $R^T = R^{-1}$  erzeugen. Diese bilden die Gruppe O(3). Dann ist:  $\mathbf{e}'_i = R_{ij}\mathbf{e}_j$ . Man kann die Einträge der Matrix finden, in dem man die alten und neuen Basisvektoren miteinander verrechnet:

$$R_{ij} = \mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}_j$$

Die Determinante einer Rotationsmatrix ist aufgrund der Orthogonalität immer  $\pm 1$ . Vektoren  $\mathbf{x}$  transformieren wie die Einheitsvektoren:

$$x'_i = R_{ij} x_j e_j \qquad \Leftrightarrow \qquad \mathbf{x}' = R \mathbf{x}$$

Dieses Konzept kann man auf **Tensoren** k-ter Stufe übertragen. Für einen Tensor gilt also die Transformationsvorschrift:

$$T_{ij...k}(\mathbf{x}') = R_{ir}R_{js}...R_{kt}T_{rs...t}(\mathbf{x}) \qquad \Leftrightarrow \qquad T = R^T T R$$

Ein Tensor kann sich als Mehrdimensionale Matrix vorgestellt werden. Man Spricht von einem **Pseudo**vektor, -Skalar, -Tensor, wenn ein Objekt nicht gemäß der obigen Relationen transformiert, sondern ein Faktor  $\det(R)$  auftritt.

Im Gegensatz dazu sind Skalare Größen, die bei einer Rotation invariant sind:

$$S(\mathbf{x}') = S(\mathbf{x}) \,.$$

Die Ableitung eines skalaren Feldes ist also bei Transformation gegeben durch:

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}')}{\partial x'_i} = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x'_i} = \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial x'_i} = R_{ik} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_k}$$

Gradientenfelder sind also in diesem Sinne Vektoren.

#### Tensorprodukt

Man kann ein allgemeines Tensorprodukt (hier gezeigt für Vektoren) definieren:

$$a \otimes b = a_i b_j \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad \Rightarrow \quad a \otimes b = \begin{pmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 & \dots & a_1 b_k \\ a_2 b_1 & a_2 b_2 & \dots & a_2 b_k \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_n b_1 & a_n b_2 & \dots & a_n b_k \end{pmatrix}$$

## 1.1.3 Das Eigenwertproblem

Wir betrachten eine Matrix A (in der Quantenmechanik allgemein einen linearen Operator) und suchen nach den Paaren von Zahlen  $\lambda_i$  und Vektoren  $\mathbf{v}_i$ , für die gilt:

**Eigenwertgleichung:** 
$$A\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i$$
.

Dabei nennt man die  $\lambda_i$  auch die **Eigenwerte** und  $\mathbf{v}_i$  auch die Eigenvektoren der Matrix *A*. Hier wird *nicht summiert*, da es sich nur um eine Nummerierung handelt. Man findet die Eigenwerte durch Lösen des Charakteristischen Polynoms:

$$\det(A - \lambda_i \mathbf{1}) = 0.$$

Bei gegeben Eigenwerten bestimmt man die zugehörigen Eigenvektoren dann mit dem Gauß Algorithmus o.Ä. Es gilt ein wichtiger Satz:

**Spektralsatz** (endlich-dimensional): Für hermitesche Matrizen  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$  existiert ein Satz von n orthonormierten Eigenvektoren.

Hermitesche Matrizen sind gleich ihrer eigenen komplex-konjugiet und Transponierten:  $A^{\dagger} = (A^*)^T$ . Dadurch lassen sich solche Matrizen in dieser sog. **Eigenbasis** stets in einer Diagonalform schreiben. Die Transformation in die Eigenbasis wird durch die Matrix:

$$T = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, ...) \quad \Rightarrow \quad A_D = T^T A T$$

geleistet. Dabei ist  $A_D$  die Matrix A in Diagonalform bezüglich der Eigenbasis.

Auch für nicht hermitesche Matrizen lässt sich eine Transformation in die sogenannte **Jordan-Normalform** finden. Diese Matrizen sind aber für uns nicht so interessant, weshalb dies hier nicht weiter ausgeführt wird.

# **1.2** Analysis und Vektoranalysis

## 1.2.1 Mehrdimensionale Kettenregel

Gegeben sei eine skalare Funktion  $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{C}$ . Dann ist ihr sog. totales Differenzial gegeben durch:

$$\mathrm{d}f = \sum_{k=1}^{N} \frac{\partial f}{\partial x_k} \,\mathrm{d}x_k \,.$$

Damit lautet z.B. die totale Zeitableitung:

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \sum_{k=1}^{N} \frac{\partial f}{\partial x_k} \frac{\mathrm{d}x_k}{\mathrm{d}t} + \frac{\partial f}{\partial t} \,.$$

Betrachtet man eine vektorwertige Funktion  $\mathbf{F}(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ , so ist ihre erste Ableitung durch die sog. Jacobi-Matrix definiert:

$$(D\mathbf{F}(\mathbf{x}))_{ik} = \frac{\partial F_i}{\partial x_k} = \begin{pmatrix} \nabla F_1^T \\ \vdots \\ \nabla F_n^T \end{pmatrix}$$

Die allgemeinste Kettenregel für eine Verknüpfung  $\mathbf{F} \circ \mathbf{G}$  lautet somit:

$$D(\mathbf{F} \circ \mathbf{G}) = D\mathbf{F}(\mathbf{G}) \cdot D\mathbf{G}$$

Damit kann man eine totale (Zeit)Ableitung umschreiben zu:

$$\frac{\mathrm{d}(f \circ \mathbf{G})}{\mathrm{d}t} = \nabla f(\mathbf{G}) \cdot \dot{\mathbf{G}} \,.$$

## 1.2.2 Rotation, Divergenz und Laplace-Operator

Man kann den  $\nabla$ -Operator als "Vektor" mit den Komponenten (hier für 3 Dimensionen):

$$\nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial x_3} \end{pmatrix}$$

auffassen. Achtung: dieses Objekt transformiert sich nicht zwingend wie ein gewöhnlicher Vektor! Daher ist dies nur eine nützliche Schreibweise um sich die Definitionen für weitere Differenzialoperatoren leichter zu merken. Diese lauten:

#### 1) Gradient:

$$\nabla f = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f}{\partial x_3} \end{pmatrix}$$

### 2) Divergenz:

$$\nabla \cdot \mathbf{F} = \operatorname{div} \mathbf{F} = \sum_{i} \frac{\partial F_{i}}{\partial x_{i}}$$

#### 3) Rotation:

3 Dimensionen: 
$$(\nabla \times \mathbf{F})_i = (\operatorname{rot} \mathbf{F})_i = \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \frac{\partial f_j}{\partial x_k}$$
  
Allgemein:  $\nabla \times \mathbf{F} = D\mathbf{F}^T - D\mathbf{F}$ 

#### 4) Laplace Operator:

$$\Delta f = \operatorname{div}(\nabla f) = \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_k}$$
 bzw.  $(\Delta \mathbf{F})_k = \Delta F_k$ 

Es gibt folgende Rechenregeln für die Differenzialoperatoren, die sich durch explizites, komponentenweises Nachrechnen zeigen lassen:

$$div (\phi \mathbf{E}) = \nabla \phi \cdot \mathbf{E} + \phi div \mathbf{E},$$
  

$$rot (\phi \mathbf{E}) = \nabla \phi \times \mathbf{E} + \phi rot \mathbf{E},$$
  

$$div (\mathbf{B} \times \mathbf{E}) = \mathbf{E} \cdot rot \mathbf{B} - \mathbf{B} \cdot rot \mathbf{E},$$
  

$$rot (\mathbf{B} \times \mathbf{E}) = \mathbf{B} div \mathbf{E} - \mathbf{E} div \mathbf{B} + (\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{B} - (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{E},$$
  

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \nabla (div \mathbf{E}) - \Delta \mathbf{E}.$$

Zudem kann man zeigen, dass sich auf bestimmten Definitionsmengen für Vektorfelder für die  $\nabla \times \mathbf{F} = 0$  gilt stets ein Potenzial  $\phi$  mit  $\nabla \phi = \mathbf{F}$  und für Vektorfelder für die  $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$  gilt stets ein Vektorpotenzial  $\mathbf{A}$  mit  $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$  finden lässt. Diese Zuordnungen sind möglich, da allgemein gilt:

$$\operatorname{rot}(\nabla\phi) = 0, \qquad \operatorname{div}(\nabla \times \mathbf{A}) = 0.$$

## 1.2.3 Krummlinige Koordinatensystemen

Gegeben ist eine stetig differenzierbare (bijektive) Abbildung, also eine Koordinatentransformation:

$$\Phi(u, v, w) = (x(v_1, v_2, v_3), y(v_1, v_2, v_3), z(v_1, v_2, v_3)) ,$$

dann nennt man die Vektorfelder

$$\mathbf{e}_{v_i} := rac{1}{h_i} rac{\partial \Phi}{\partial v_i} \qquad ext{mit} \qquad h_i = \left| rac{\partial \Phi}{\partial v_i} \right|$$

normierte Koordinatenfelder. Sie sind **im Allgemeinen nicht paarweise orthogonal.** Daraus folgen Transformationsregeln für die Differenzialoperatoren. Der Gradient hat dann die Form:

$$\nabla f = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{h_i} \frac{\partial f}{\partial v_i} \mathbf{e}_{v_i}$$

So gilt beispielsweise für die Zylinderkoordinaten  $(v_1, v_2, v_3) = (r, \varphi, z)$ :

 $h_r = 1 , \qquad h_\varphi = r , \qquad h_z = 1$ 

mit den normierten Koordinatenfeldern:

$$\mathbf{e}_r = \begin{pmatrix} \cos\varphi\\ \sin\varphi\\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{e}_\varphi = \begin{pmatrix} -\sin\varphi\\ \cos\varphi\\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{e}_z = \begin{pmatrix} 0\\ 0\\ 1 \end{pmatrix}$$

Die Rechenregeln für Rotation und Divergenz können sehr unschön werden, sind aber hilfreich, wenn man Probleme mit bestimmten Symmetrien betrachtet. Allgemein gilt:

• Divergenz:

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[ \frac{\partial}{\partial v_1} (h_2 h_3 A_{v_1}) + \frac{\partial}{\partial v_2} (h_1 h_3 A_{v_2}) + \frac{\partial}{\partial v_3} (h_2 h_1 A_{v_3}) \right]$$

Dabei ist  $A_{v_i}$  die Komponente von **A** in Richtung von  $\mathbf{e}_{v_i}$ 

• Rotation:

$$\nabla \times \mathbf{A} = \frac{1}{h_2 h_3} \left[ \frac{\partial}{\partial v_2} (h_3 A_{v_3}) - \frac{\partial}{\partial v_3} (h_2 A_{v_2}) \right] \mathbf{e}_{v_1} + \frac{1}{h_1 h_3} \left[ \frac{\partial}{\partial v_3} (h_1 A_{v_1}) - \frac{\partial}{\partial v_1} (h_3 A_{v_3}) \right] \mathbf{e}_{v_2} + \frac{1}{h_1 h_2} \left[ \frac{\partial}{\partial v_1} (h_2 A_{v_2}) - \frac{\partial}{\partial v_2} (h_1 A_{v_1}) \right] \mathbf{e}_{v_3}$$

• Laplace:

$$\Delta f = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[ \frac{\partial}{\partial v_1} \left( \frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial f}{\partial v_1} \right) + \frac{\partial}{\partial v_2} \left( \frac{h_1 h_3}{h_2} \frac{\partial f}{\partial v_2} \right) + \frac{\partial}{\partial v_3} \left( \frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial f}{\partial v_3} \right) \right]$$

## 1.2.4 Integralsätze

Die Berechnungsvorschrift, bzw. die Definitionen von Kurven-, Volumen und Flächenintegralen wird hier vorausgesetzt. Im Rahmen der Vektoranalysis lassen sich verschiedene Integralsätze zeigen, die den Zusammenhang zwischen Raum und Flächenintegralen über bestimmte Differenzialoperatoren darstellen.

1) Integralsatz von Gauß:

$$\int_{V} \mathrm{d}V \,\nabla \cdot \mathbf{A} = \int_{\partial V} \mathrm{d}\mathbf{S} \cdot \mathbf{A}$$

2) Integralsatz von Stokes:

$$\int_{S} \mathrm{d}\mathbf{S} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = \oint_{\partial S} \mathrm{d}\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}$$

3 Integralsätze von Green: Mittels Rechenregeln für Divergenz und Rotation lassen sich zwei weitere nützliche Integralsätze leicht aus den Vorherigen ableiten, die häufig auch als partielle Integration in höheren Dimensionen bezeichnet werden:

$$\int_{V} dV (\phi \Delta \psi - \psi \Delta \phi) = \int_{\partial V} d\mathbf{S} \cdot (\phi \nabla \psi - \psi \nabla \phi),$$
$$\int_{V} dV (\phi \Delta \psi) = \int_{\partial V} d\mathbf{S} (\phi \nabla \psi) - \int_{V} dV (\nabla \psi \cdot \nabla \phi)$$

4) **Transformationssatz:** Ein bijektiver Koordinatenwechsel  $\phi : B \to D, \mathbf{x} \to \phi(\mathbf{x}) := \mathbf{y}$  erzeugt die Integraltransformation:

$$\int_D f(\mathbf{y}) \, \mathrm{d}\mathbf{y} = \int_B f(\phi(\mathbf{x})) \left| \det(D\phi(\mathbf{x})) \right| \, \mathrm{d}\mathbf{x} \,, \quad \det(D\phi(\mathbf{x})) := \frac{\partial(x_1, x_2, x_3...)}{\partial(y_1, y_2, y_3...)} \,.$$

Beispiel Kugelkoordinaten:

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} r\cos\varphi\,\sin\theta\\ r\sin\varphi\,\sin\theta\\ r\cos\theta \end{pmatrix}$$

Betrachte das Gebiet:  $D := \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : |x|^2 = r^2, r \in \mathbb{R} \}$ :

$$\int_D (x^2 + y^2 + z^2) \,\mathrm{d}^3 x = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \int_0^r \mathrm{d}r \, r^2 (r^2 \sin \theta) = \frac{4\pi}{5} r^5$$

## 1.2.5 Extremwertprobleme

#### Ohne Nebenbedingungen

Sucht man ein globales Extremum einer Skalaren Funktion  $f(\mathbf{x})$  so lassen sich die Konzepte der eindimensionalen Kurvendiskussion leicht auf höhere Dimensionen übertragen. Wir betrachten hier den Fall einer Funktion  $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$ . 1) Notwendige Bedingung für Extrema: Der Gradient verschwindet:

$$\nabla f(x_0) = 0$$

2) Hinreichende Bedingung für Maxima (Minima): Die Hesse-Matrix:

$$Hf(\mathbf{x}_{0}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^{2}f}{\partial x_{1}\partial x_{1}} & \frac{\partial^{2}f}{\partial x_{1}\partial x_{2}} & \vdots & \frac{\partial^{2}f}{\partial x_{1}\partial x_{n}} \\ \frac{\partial^{2}f}{\partial x_{2}\partial x_{1}} & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^{2}f}{\partial x_{n}\partial x_{1}} & \frac{\partial^{2}f}{\partial x_{n}\partial x_{2}} & \cdots & \frac{\partial^{2}f}{\partial x_{n}\partial x_{n}} \end{pmatrix} \qquad \Leftrightarrow \qquad Hf_{ij}(\mathbf{x}_{0}) = \frac{\partial^{2}f}{\partial x_{i}\partial x_{j}}(\mathbf{x}_{0})$$

ist negativ (positiv) definit. Das bedeutet, dass für alle Vektoren  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  gilt:

 $\mathbf{x} \cdot Hf(\mathbf{x}_0)\mathbf{x} < 0.$ 

Man kann die Definitheit auch über die Eigenwerte bestimmen:

Eine Matrix ist positiv (negativ) definit, wenn alle ihre Eigenwerte echt positiv (negativ) sind.

#### Mit Nebenbedingungen

Wir betrachten dieselbe Funktion  $f(\mathbf{x})$ , die unter den *m*-Nebenbedingungen  $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$  maximiert oder minimiert werden soll. Dabei muss gelten  $\nabla g_i(x_0) \neq 0$  für alle i = 1, 2, ..., m. Dann findet man die Extremstellen durch lösen des Gleichungssystems:

$$\nabla f(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \nabla g_i(\mathbf{x}) = 0 \text{ und } g_i = 0 \ \forall i.$$

Dies ist ein Gleichungssystem aus n+m Gleichungen zur Bestimmung der n Variablen und m konstanten  $\lambda_i$ , die man auch die **Lagrange-Multiplikatoren** nennt. Ob ein Maximum oder Minimum vorliegt, muss man anhand verschiedener Stellen vergleichen.

## 1.2.6 Mehrdimensionale Taylorentwicklung

Wir betrachten eine Funktion  $f(\mathbf{x}) \in \mathbb{C}^{\infty}(\mathbb{R}^n)$ . Dann ist die Taylorentwicklung mit dem Multiindex  $\alpha = (\alpha_1, ..., \alpha_n)$  und den Definitionen:

$$\partial^{\alpha} f := \frac{\partial^{\alpha_1}}{\partial x_1^{\alpha_1}} \dots \frac{\partial^{\alpha_n}}{\partial x_n^{\alpha_n}}, \qquad |\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i, \qquad \alpha! = \prod_{i=1}^n \alpha_i!$$

gegeben durch:

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + \sum_{|\alpha|=0}^{\infty} \frac{1}{\alpha!} \partial^{\alpha} f(\mathbf{x}_0) (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^{\alpha}.$$

Die ersten zwei Ordnungen der Taylorentwicklung einer Funktion  $f(\mathbf{r} + \mathbf{a})$  den Punkt  $\mathbf{r}$  (also  $\mathbf{a} = 0$ ) in 3 Dimensionen kann man kürzer schreiben als:

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = f(\mathbf{r}) + (\mathbf{a} \cdot \nabla) f(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} (\mathbf{a} \cdot \nabla) (\mathbf{a} \cdot \nabla) f(\mathbf{r})$$

mit (Einsteinsche Summenkonvention)

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla) = a_i \partial_i$$
.

# **1.3** Delta - Distribution

Die Delta-Distribution  $\delta(x - x')$  (verallgemeinerte auf eine sog. Testfunktion angewandte "Funktion") ist über das Integral:

$$\int_{a}^{b} \mathrm{d}x \,\delta(x - x')f(x) = \begin{cases} f(x') & x' \in (a, b) \\ 0 & x' \notin (a, b) \end{cases}$$

definiert. Damit diese Definition bei Koordinatentransformationen erhalten bleibt, gilt in mehreren Dimensionen, mit Funktionaldeterminante J:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{|J|} \prod_{i=1}^{n} \delta(r_i - r'_i)$$

Die Ableitung (analog für den Gradient) der Delta-Distribution lässt sich durch mehrfache partielle Integration ermitteln:

$$\int_{a}^{b} \mathrm{d}x \,\delta^{(n)}(x-x')f(x) = (-1)^{n} \int_{a}^{b} \mathrm{d}x \,\delta(x-x')f^{(n)}(x)$$

Man kann auch eine **Stammfunktion** angeben. Z.B. für eine um 0 zentrierte Delta Distribution gilt:

$$y(0_+) - y(0_-) = \lim_{\epsilon \to 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \mathrm{d}x \,\delta(x) = 1$$

Somit wird ein Sprung der Höhe 1 erzeugt:

$$y := \Theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x > 0 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad y := \Theta(L - |x|) = \begin{cases} 1 & |x| < L \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Zuletzt kann man auch eine Substitutionsregel angeben:

$$\delta(h(x)) = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{|h(x_i)|} \,\delta(x - x_i) \,, \quad h'(x_i) \neq 0$$

mit  $x_i$  den (einfachen) Nullstellen der Funktion h.

# **1.4** Fourier Transformation

Die Fouriertransformierte einer Funktion wird definiert als:

$$(\mathcal{F}g)(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} g(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \,\mathrm{d}\mathbf{x}.$$

Die Rücktransformation ist dann gegeben durch:

$$g(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} (\mathcal{F}g)(\mathbf{k}) \, e^{i\mathbf{x}\cdot\mathbf{k}} \, \mathrm{d}\mathbf{k} \, .$$

Dies zu zeigen ist nicht leicht. Hieraus folgt eine wichtige Darstellung der  $\delta$ -Distribution:

$$\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{\pm i\mathbf{x} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}')} \,\mathrm{d}\mathbf{x}$$
(1.1)

Ein wichtiger Zusammenhang zwischen der Funktion und ihrer Fouriertransformierten ist die sog. **Paseval-Identität**:

$$\int_{\mathbb{R}^n} |g(\mathbf{x})|^2 \, \mathrm{d}\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^n} |(\mathcal{F}g)(\mathbf{k})|^2 \, \mathrm{d}\mathbf{k} \, .$$

Ein Fixpunkt der Fouriertransformation ist die **Gaußfunktion**, deren Fouriertransformierte wieder von der Form einer Gaußfunktion hat:

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \quad \Rightarrow \quad (\mathcal{F}g)(k) \propto \exp\left(-\frac{k^2\sigma^2}{2}\right) \exp\left(-i\,kx_0\right) \,.$$

# Kapitel 2

# Klassische Mechanik

# 2.1 Newtonsche Mechanik

Die Newtonsche Mechanik beschreibt die Bewegung von Körpern. Anders als bei der Kinematik betrachtet die Mechanik nicht nur die Form der Bewegung, sondern auch die Ursache und weitere Zeitentwicklung. Da sich, wie man leicht zeigen kann, Schwerpunkte von Körpern in Kraftfeldern bewegen als wären sie Massepunkte lassen sich bereits Aussagen über die Bewegung von Körpern treffen, ohne dass die Ausdehnung und spezielle Form beachtet wird. Die konkrete Bewegung inklusive der eigenen Rotation usw. wird später behandelt.

## 2.1.1 Galileisches Relativitätsprinzip

Bei der Beschreibung einer Bewegung ist es notwendig ein Bezugskoordinatensystem festzulegen, in dem die Bewegung beschrieben wird. Dieses Koordinatensystem ist frei wählbar. Spezielle Koordinatensysteme sind die sog. **Inertialsysteme:** 

**Galileisches Relativitätsprinzip:** Alle Naturgesetze haben in jedem Inertialsystem dieselbe Form. Die Transformation zwischen zwei Inertialsystemen ist die Galileitransformation. Die physikalischen Gleichungen sind also **forminvariant** / **kovariant** unter Galileitransformation

Die Galileitransformationen bilden die mathematische Struktur einer Gruppe. Sie lautet:

$$t' = \lambda t + a \qquad (\lambda = \pm 1; a \in \mathbb{R}) \mathbf{x}' = R\mathbf{x} + \mathbf{v}t + \mathbf{b} \qquad (R \in O(3); \mathbf{v}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^3)$$

$$(2.1)$$

Es gibt also **10 unabhängige kontinuierliche Parameter**. Tatsächlich beruhen die auch die 10 klassischen Erhaltungsgrößen auf diesen 10 Parametern. Abstände in Raum und Zeit sind unter Galileitransformation invariant. Offenbar ist zudem die **Zeit** in der galileischen Betrachtung **absolut**, sie hängt, bis auf die Wahl eines Ursprunges, nicht von der Wahl des Systems ab. Dies trifft in Einsteins spezieller Relativitätstheorie nicht mehr zu.

## 2.1.2 Die Newtonschen Axiome

Die klassische Mechanik beruht auf den Newton'schen Axiomen. Diese werden im Folgenden aufgelistet. Die Newtonschen Axiome:

- **1.** Axiom: Ein Körper verbleibt so lange in Ruhe ( $\mathbf{v} = \text{const.}$ ) bis eine Kraft auf ihn wirkt.
- 2. Axiom: Wirken Kräfte auf einen Körper so ändert sich seine Raumkoordinate zeitlich gemäß:

$$m \ddot{\mathbf{x}}(t) = \sum_{i} \mathbf{F}_{i}(t)$$

Hierbei gilt das **Superpositionsprinzip** für Kräfte und der Parameter m ist die **träge Masse**.

**3.** Axiom: Wirkt ein Körper A auf einen Körper B eine Kraft so wirkt eine gleich große Kraft mit entgegengesetztem Vorzeichen auf A:

$$\mathbf{F}_{AB} = -\mathbf{F}_{BA}$$

Das zweite Axiom zeigt eine zusätzliche Annahme der klassischen Mechanik:

Die Geschwindigkeit der **Wechselwirkungen** ist in der klassischen Mechanik **un**endlich.

## 2.1.3 Invarianz und Forminvarianz

Betrachten wir zwei Koordinatensysteme  $\mathcal{K}$  und  $\mathcal{K}'$ , die durch Galileitransformation auseinander hervorgehen, so haben die newtonschen Bewegungsgleichungen in beiden Systemen, wegen

$$\frac{\mathrm{d}^2 \mathbf{x}'}{\mathrm{d}t'^2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \mathbf{x}} \frac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{d}t} = R \frac{\mathrm{d}^2 \mathbf{x}}{\mathrm{d}t^2} \quad (R \text{ unabhängig von } t)$$

und falls  ${\bf F}$  ein Vektorfeld ist:

$$\mathbf{F}'(\mathbf{x}') = R\mathbf{F}(\mathbf{x})$$

dieselbe Form, sie sind forminvariant oder auch kovariant. Es gilt:

Kovarianz: 
$$m \ddot{\mathbf{x}}' = \mathbf{F}'(\mathbf{x}', \dot{\mathbf{x}}', t'), \quad \stackrel{\mathcal{K}' \leftrightarrow \mathcal{K}}{\leftrightarrow} \quad m \ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t)$$

Die Invarianz einer Größe ist hingegen wie folgt definiert:

**Invarianz:** Die Funktion **Y**' hängt in derselben Weise von den Koordinaten, Geschwindigkeiten und der Zeit ab, wie **Y**:

$$\mathbf{Y}'(\mathbf{x}', \mathbf{\dot{x}}', t') = \mathbf{Y}(\mathbf{x}', \mathbf{\dot{x}}', t')$$

Das Relativitätsprinzip ist hierbei aus den Beobachtungen abgeleitet. In einem System, in dem äußere Kräfte wirken können diese durchaus nicht invariant unter Galileitransformation sein, die Kovarianz gilt aber weiterhin. Ein Beispiel ist eine eindimensionale Reibungskraft:

$$F(\dot{x}) = \gamma \dot{x} = \gamma (\dot{x}' - v) = F'(\dot{x}')$$

Diese Kraft ist offenbar nicht invariant, da  $F'(\dot{x}') \neq F(\dot{x}') = \gamma \dot{x}'$ . Hier sind die beiden Inertialsysteme also nicht gleichwertig. Dies liegt an einem Medium, zu dem die Geschwindigkeit der Reibung relativ gemessen wird.

#### Invarianz von Paarkräften

Paarkräfte in abgeschlossenen Systemen müssen jedoch immer bis auf eine Rotation **in-variant** unter der Galileitransformation sein. Dies wird klar, wenn man sich ein Elektron vorstellt, welches um ein Proton kreist<sup>1</sup>. Die Kraft muss in jedem Inertialsystem in Richtung des Verbindungsvektors von Elektron und Proton zeigen und zusätzlich natürlich auch denselben Betrag haben. Also muss gelten:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) \stackrel{\mathcal{K}' \leftrightarrow \mathcal{K}}{\leftrightarrow} R\mathbf{F}(\mathbf{x}', \dot{\mathbf{x}}', t)$$

Hier steht auf beiden Seiten dieselbe Funktion nur anderer Koordinaten! Diese Überlegung deckt sich genau mit den Experimentellen Beobachtungen.

### 2.1.4 Erhaltungssätze für abgeschlossene Systeme

In einem System aus N Teilchen kann die Kraft von den **Geschwindigkeiten** und **Orten** der Teilchen des Systems abhängen<sup>2</sup>. Man unterscheidet meist zwischen internen Kräften zwischen den Teilchen und externen Kräften. Man kann beweisen, dass eine interne Kraft, die vom *i*-ten auf das *k*-te Teilchen ausgeübt wird immer die Form:

$$\mathbf{F}_{ik} = f_{ik}(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k|) \, rac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k|}$$

haben *muss*, damit sie invariant unter Galileitransformation sein kann, was, wie oben diskutiert, auf Paarkräfte zutreffen muss. Kräfte dieser Form sind rotationsfrei und lassen

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Aufgrund der hohen Massendifferenz kann man die Bewegung der Relativkoordinate (siehe Zweikörperproblem) als die Bewegung des Elektrons auffassen.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Für ein Lipschitz stetiges  $\mathbf{F}$  existiert immer eine eindeutige Lösung der Bewegungsgleichung (Satz von Picard-Lindelöf). Die klassische Mechanik ist also streng deterministisch.

sich stets als Gradientenfeld eines Abstands-abhängigen Potenzials darstellen:

$$\mathbf{F}_{ik} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} V(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k|) \,.$$

Entsprechend lassen sich die Potenziale in N-Teilchen Systemen superponieren, um auf die Gesamtkraft zu schließen.

Die allgemeinste Form der Newtonschen Bewegungsgleichungen eines N-Teilchensystems lautet:

$$m \ddot{\mathbf{x}} = \sum_{k \neq i} \mathbf{F}_{ik}^{(\text{in})} + \mathbf{F}^{(\text{ext})}(\mathbf{x}_i, \dot{\mathbf{x}}_i, t), \qquad i = 1, ..., N.$$
(2.2)

Mit dieser Form kann man einige sog. Erhaltungssätze beweisen. Diese gelten für **abge**schlossene Systeme, in denen ausschließlich die inneren Kräfte  $\mathbf{F}_{i}^{(\text{in})} = -\partial_{\mathbf{x}_{i}} V$  wirken. V soll hierbei das Gesamtpotenzial, also die Summe der Paarpotenziale  $V_{ik}(|\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}_{k}|)$  sein.

1. Impulssatz: Es folgt sofort aus der Bewegungsgleichung:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_{\substack{i=1\\ \text{Gesamtimpuls } \mathbf{P}}}^{N} \mathbf{p}_{i} = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{F}_{i}$$

Für abgeschlossene Systeme heben sich die Kräfte bei der Summierung über alle Teilchen aufgrund des dritten Axioms  $\mathbf{F}_{ik} = -\mathbf{F}_{ki}$  weg, sodass der Gesamtimpuls zeitlich erhalten ist:

$$\dot{\mathbf{P}} = 0$$

2. Drehimpulssatz: Es lässt sich zeigen, dass gilt:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \underbrace{\sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_i \times \mathbf{p}_i}_{\text{Gesamtdrehimpuls}} := \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \mathbf{L} = \underbrace{\sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_i \times \mathbf{F}_i}_{\text{Gesamtrehmoment}} := \mathbf{M}.$$

Der Gesamtdrehimpuls lässt sich in eine Komponente der Schwerpunktsbewegung und eine Komponente relativ zum Schwerpunkt zerlegen. Für abgeschlossene Systeme ist dieser erhalten:

$$\dot{\mathbf{L}} = 0$$
 .

3. Energiesatz: Aus der Bewegungsgleichung kann man durch Skalarmultiplikation mit  $\dot{\mathbf{x}}_i$  und Summation zeigen:

$$\dot{T} := \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m_i \dot{\mathbf{x}}_i^2 = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{F}_i \cdot \dot{\mathbf{x}}_i$$

Hier ist offenbar T die gesamte kinetische Energie des Systems. Damit ist, da:

$$\dot{V} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}_i} \cdot \dot{\mathbf{x}}_i \quad \Rightarrow \quad \dot{E} = \dot{T} + \dot{V} = 0$$

gilt die Gesamtenergie erhalten.

Zusammen mit dem Schwerpunktsatz:

$$\dot{\mathbf{P}} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \mathbf{X}(t) = \mathbf{X}(0) + \frac{\mathbf{P}}{M}t$$

(Schwerpunkt X und Gesamtmasse M) gibt es in einem abgeschlossenen System also 10 Erhaltungsgrößen.

#### 2.1.5 Beschleunigte Bezugssysteme

Wir betrachten nun Koordinaten  $\mathbf{y}$ , die nicht durch eine Galileitransformation, sondern durch eine allgemeinere Transformation  $\mathbf{x} = R(t)\mathbf{y} + \mathbf{b}(t)$  aus einem Inertialsystem  $\mathbf{x}$ hervorgehen. Man kann berechnen, dass für  $\mathbf{y}$  dann die Bewegungsgleichung

$$m\ddot{\boldsymbol{y}} = \mathbf{K} \underbrace{-2m\omega \times \dot{\mathbf{y}}}_{\text{Coriolis-Kraft}} - m\dot{\omega}\mathbf{y} \underbrace{-m\omega \times (\omega \times \mathbf{y})}_{\text{Zentrifugalkraft}} - m\mathbf{a}$$

gilt. **K** ist hierbei einfach die rotierte ursprüngliche Kraft  $\mathbf{K} = R^T \mathbf{F}$  und  $m\mathbf{a} = mR^T \mathbf{\ddot{b}}$ wir auch die Führungskraft genannt.

## 2.2 Das Zweikörperproblem

## 2.2.1 Allgemeine Betrachtung

Historisch und auch heute noch von Interesse ist das sog. Zweikörperproblem. Es geht um ein abgeschlossenes System von zwei Körpern, die durch ein Potenzial, welches nur vom Abstand dieser Teilchen abhängt (s.o.), miteinander Wechselwirken. Man erhält ein separiertes System aus einer Relativ- und einer Schwerpunktsbewegung, wenn man die Schwerpunkts- und Relativkoordinaten einführt:

$$\mathbf{X} = \frac{1}{M} \left( m_1 \, \mathbf{x}_1 + m_2 \, \mathbf{x}_2 \right) \,, \qquad \mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$$

Die separierten Bewegungsgleichungen lauten:

$$\underbrace{\left(\frac{m_1m_2}{M}\right)}_{:=\mu} \ddot{\mathbf{x}} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} V(|\mathbf{x}|), \qquad M \ddot{\mathbf{X}} = 0.$$

 $\mu$  nennt man auch die reduzierte Masse und man verwendet die Abkürzung  $|\mathbf{x}| := r$ . Der Schwerpunkt führt also offenbar, wie für ein abgeschlossenes System zwangsläufig gegeben, eine gleichförmig geradlinige Bewegung aus.

#### Die Relativbewegung

Der **relative Drehimpuls** ist erhalten, da die Kraft, die durch das Potenzial erzeugt wird, natürlich parallel zur Relativkoordinate ist:

$$\mathbf{L} = \mu \mathbf{x} \times \dot{\mathbf{x}} = \text{const.} \qquad \Rightarrow \qquad l = |\mathbf{L}| = \mu r^2 \dot{\varphi} = \text{const.}$$

Dies ist auch die Ursache für das **zweite Keplersche Gesetz:** Der Relativvektor überschreitet in gleichen Zeiten gleiche Flächen, die Flächenänderung ist also konstant:  $\dot{F}(t) =$   $r^2 \dot{\varphi}/2 = l/(2\mu).$ 

Die **Energie** der Relativbewegung ist in diesem abgeschlossenen System natürlich auch erhalten, wie man sehr leicht zeigen kann und man kann mittels Polarkoordinaten schreiben:

$$E = \frac{1}{2}\mu\dot{r}^{2} + \frac{l^{2}}{2\mu r^{2}} + V(r) = \text{const.}$$

Man fasst den Term, in dem der Drehimpuls auftritt, die sog. **Drehimpulsbarriere** mit dem Potenzial V(r) zu einem effektiven Potenzial U(r) zusammen. Dadurch lässt sich aus der Energieerhaltung die Bewegungsgleichung für r(t) integrieren. Aus der Kettenregel  $d\varphi/dr = \dot{\varphi}/\dot{r}$  lässt sich  $\varphi(r)$  bestimmen. Insgesamt ist das Problem damit vollständig **integrabel**:

$$t(r) - t(r_0) = \pm \int_{r_0}^r \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{\frac{2}{\mu}(E - U(x))}}, \qquad \varphi(r) - \varphi(r_0) = \pm \int_{r_0}^r \frac{l\,\mathrm{d}x}{x^2\sqrt{2\mu(E - U(x))}}$$

### 2.2.2 Bahntypen

Für verschieden Potenziale und Energien ergeben sich unterschiedlich geformte Bahnen. Über diese lassen sich aber auch ohne eine explizite Form des Potenzials bereits Aussagen treffen.

#### Gebundene Bahnen

Für Gebundene Bahnen ist r(t) periodisch zwischen zwei Umkehrpunkten, die Bewegung findet also in einem, zu beiden Seiten begrenzten, Bereich: E > U statt. Ein Spezialfall ist der Gleichgewichtspunkt, bei dem die Periodendauer gegen unendlich geht und der Radius sich nicht mehr ändert. Während einer Periode in r ändert sich der Winkel  $\varphi$  entsprechend seinem Integral (**Periheldrehung**), sodass die allgemeine Form einer Gebundenen Bahn eine **Rosettenbahn** ist.

#### Streubahnen

Bei Streubahnen ist der Bereich E > U zu mindestens einer Seite hin nicht begrenzt. Relevant sind vor allem Potenziale, die für  $r \to \infty$  verschwinden. In diesen Fällen hat die Bahn für  $t \to \pm \infty$  geradlinig gleichförmige Asymptoten. Der Relativwinkel  $\chi$  von ein- zu auslaufender Asymptote hängt vom Abstand des "Teilchens"<sup>3</sup> von der Streuachse (zur Einlauf-Asymptote parallele Achse durch das Streuzentrum), dem sog. **Streuparameter** b ab. Dieser hängt durch die Erhaltungsgrößen über

$$l = b\sqrt{2\mu E}$$

mit der Energie und dem Drehimpuls zusammen. Der sog. totale Streuquerschnitt (auch Wirkungsquerschnitt)  $\sigma$  beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen gestreut wird. Er ist gleich der Fläche der maximalen Streuparameter b, bei denen noch

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Man kann die Bewegung der Relativkoordinate als Bewegung eines Teilchens beschreiben, wenn man sich als Beobachter in das Ruhesystem des anderen Teilchens begibt. Ist die Masse des einen Teilchens viel Größer als die des Anderen, so wird die Bewegung letzten Endes tatsächlich zur Bewegung des Leichteren.

eine Streuung stattfindet. Der sog. **differentielle Streuquerschnitt** ist dann die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen in ein bestimmtes Raumwinkelelement  $d\Omega$  gestreut wird. Es gilt:

$$\sigma = \pi b_{\text{max.}}^2$$
,  $\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{b}{\sin\chi} \left| \left( \frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}b} \right)^{-1} \right|$ .

### 2.2.3 Das Keplerproblem

Das Zweikörperproblem mit dem Gravitationspotenzial:

$$V(r) = -\frac{1}{r}Gm_1m_2$$

bezeichnet man auch als das Keplerproblem. Analog, nur mit anderen Konstanten, lässt sich dieses Problem für das Coulomb Potenzial lösen. Die Integralgleichung für  $r(\varphi)$  lässt sich in diesem Fall explizit lösen und man erhält:

$$r = \frac{d}{1 + \epsilon \cos(\varphi)}$$

Mit den Parametern:

$$d = \frac{l^2}{GM\mu^2}, \qquad 1 - \epsilon^2 = -\frac{2El^2}{G^2M^2\mu^3}.$$

Für verschiedene Werte der Gesamtenergie ergeben sich verschiedene Formen der Bewegung: Kreise für  $\epsilon = 0$ , Ellipsen für  $\epsilon \in (0, 1)$ , Parabeln für  $\epsilon = 1$  und Hyperbeln für  $\epsilon > 1$ . Für die Hyperbel bahnen erhält man den differentiellen Wirkungsquerschnitt:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{GM\mu}{4E\sin^2(\chi/2)}\right)^2$$

also den Rutherford Wirkungsquerschnitt.

### 2.2.4 Der Laplace-Runge-Lenz Vektor

Für das Keplerproblem findet man eine weitere Erhaltungsgröße den sog. Laplace-Runge-Lenz-Vektor:

$$\mathbf{A} := \mu \dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{L} - GM\mu^2 \frac{\mathbf{x}}{r} \,.$$

Die Konstanz dieses Vektors kann man unter Verwendung der Drehimpulserhaltung und natürlich der expliziten Form des Potenzials  $V(r) \propto 1/r$  zeigen. Dieser Vektor ist nur für das Keplerproblem erhalten. Durch Bilden des Skalarproduktes  $\mathbf{x} \cdot \mathbf{A} = r|\mathbf{A}| \cos \varphi$  kann man die Bewegungsgleichung sofort angeben:

$$r = \frac{l^2}{GM\mu^2 + |\mathbf{A}|\cos\varphi} \,.$$

# 2.3 Lagrange Mechanik

## 2.3.1 Konfigurationsraum und Lagekoordinaten

In der Newtonschen Mechanik kann es aus geometrischen Gründen o.Å. schwierig sein alle Kräfte in einem gemeinsamen kartesischen Koordinatensystem zu finden. Mathematisch waren weitere Koordinatensysteme, wie Polar- und Kugelkoordinaten bereits bekannt und man fragte sich, wie man die Newtonschen Bewegungsgleichungen durch diese verallgemeinerten Koordinatensysteme ausdrücken kann. Lagrange gelang es eine solche verallgemeinerte Form der Bewegungsgleichungen zu finden. Wir betrachten also ein N-Teilchensystem mit den 3N kartesischen Koordinaten  $x = (\mathbf{x}_1, ..., \mathbf{x}_N)$ . Durch sog. holonome Zwangsbedingungen werden diese 3N sog. Freiheitsgrade auf f Freiheitsgrade reduziert und zwar in der Art, dass der von diesen f Freiheitsgrade aufgespannte Raum eine f-dimensionale Fläche im  $\mathbb{R}^{3N}$  bildet. Man nennt dies auch den Konfigurationsraum. Da holonome Zwangsbedingungen eine Fläche im  $\mathbb{R}^{3N}$  Raum der Ortskoordinaten x darstellen können sie nicht von den Geschwindigkeiten  $\dot{x}$  abhängen. Den Konfigurationsraum kann man durch f verallgemeinerte sog. Lagekoordinaten  $q = (q^1, ..., q^f)$ beschreiben. Die ursprünglichen Koordinaten werden dann durch die neuen Lagekoordinaten ausgedrückt:<sup>4</sup>

$$x = x(q(t), t) \, .$$

Aus dieser einfachen Identifizierung lassen sich mittels der Kettenregel weitreichenden Folgerungen treffen. Die Geschwindigkeit ( $\dot{x} \in \mathbb{R}^{3N}$ ) lassen sich z.B. durch:

$$\dot{x} = \sum_{\alpha=1}^{f} \frac{\partial x}{\partial q^{\alpha}}(q,t) \dot{q}^{\alpha} + \frac{\partial x}{\partial t}(q,t) = \dot{x}(q,\dot{q},t)$$

ausdrücken.

## 2.3.2 Lagrange Gleichungen erster Art

Sind die Zwangsbedingungen holonom, also durch eine Gleichung  $g(\mathbf{x}, t) = 0$  gegeben, so erhält man die Bewegungsgleichungen durch die Maximierung der Gesamtenergie mittels der Methode der Lagrange-Multiplikatoren. Unter Verwendung von

$$\nabla \dot{\mathbf{x}}^2 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\dot{\mathbf{x}}} \dot{\mathbf{x}}^2 \frac{\mathrm{d}\dot{\mathbf{x}}}{\mathrm{d}t} \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\mathbf{x}} = 2\dot{\mathbf{x}}\ddot{\mathbf{x}}\frac{1}{\dot{\mathbf{x}}} = 2\ddot{\mathbf{x}}$$

erhält man die Lagrange Gleichungen erster Art

$$m\ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, t) + \sum_{i=1}^{f} \lambda_i g_i(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t).$$

**Energieerhaltung** liegt hier vor, wenn die Kraft konservativ ist und die Zwangsbedingungen nur von der Koordinaten abhängen. Man interpretiert die Größen  $\lambda_i g_i$  auch als **Zwangskräfte**.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Damit die Bewegung mit den Zwangsbedingungen verträglich ist, müssen die Richtungsableitungen für jedes  $q^{\alpha}$ ,  $\alpha \in (1, f)$  linear unabhängig sein.

### 2.3.3 Variationen

Da sich die Lagrange Mechanik aus Variationen herleiten lässt und deren Verallgemeinerungen weitere Anwendungsgebiete der Physik betreffen, wollen wir hier den Begriff der Variation einführen. Bei einer festen Zeit t ist die **virtuelle Verschiebung**  $\delta x$  der Koordinate x(q, t) definiert durch die Kettenregel:

$$\delta x = \sum_{\alpha=1}^{f} \frac{\partial x}{\partial q^{\alpha}} \, \delta q^{\alpha} \, .$$

Hiermit definiert man die sog. viruelle Arbeit

$$\delta A = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{F}_{i} \cdot \delta \mathbf{x}_{i} = \sum_{\alpha=1}^{f} K_{\alpha} \delta q^{\alpha}$$

mit den Koeffizienten (verallgemeinerte Kräfte):

$$K_{\alpha} = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{F}_{i} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}_{i}}{\partial q^{\alpha}}(q, t) \,.$$

Analog definiert man die verallgemeinerten Impulse, sodass:

$$\sum_{i=1}^{N} \mathbf{p}_i \cdot \delta \mathbf{x}_i = \sum_{\alpha=1}^{f} p_\alpha \delta q^\alpha$$

gilt, die Variation des Impulses also gleich bleibt. Damit lauten die verallgemeinerten Impulse nach der Kettenregel:

$$p_{\alpha} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}^{\alpha}}(q, \dot{q}, t)$$

Als Letztes ist die sog. Variation einer Bahn von Bedeutung. Hierbei betrachten wir eine Schar von Kurven

$$q_{\lambda}^{\alpha} = q^{\alpha}(t) + \lambda \delta q^{\alpha}(t) \,,$$

wobei die f Funktionen  $\delta q^{\alpha}$  frei wählbar sind. Diese sind die Variationen der Bahn. Die Variation einer Funktion dieser Koordinaten ist dann definiert als:

$$\delta F(t) = \frac{\partial}{\partial \lambda} F(q_{\lambda}(t), \dot{q}_{\lambda}(t), t) \Big|_{\lambda = 0}$$

Für stetig differenzierbare Funktionen vertauscht die Variation mit der Zeitableitung.

#### 2.3.4 Lagrange Gleichungen zweiter Art

Mittels der Kettenregel und der bereits definierten Größen erhält man die Bewegungsgleichung:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}^{\alpha}} - \frac{\partial T}{\partial q^{\alpha}} = K_{\alpha} \,, \qquad (\alpha = 1, ..., f)$$

Dabei ist die Ableitung der verallgemeinerten Impulse:

$$\dot{p}_{\alpha} = \frac{\partial T}{\partial q^{\alpha}} + K_{\alpha} \,.$$

Für sog. Lagrangesche Systeme kann man die verallgemeinerten Kräfte durch das Potenzial ausdrücken:

$$K_{\alpha} = -\frac{\partial V}{\partial q^{\alpha}}$$

Mit der Definition der

**Lagrange Funktion:** 
$$L(q, \dot{q}, t) = T(q, \dot{q}, t) - V(q, t)$$

erhält man dann die Lagrange Gleichungen zweiter Art oder auch die:

**Euler-Lagrange Gleichungen:** 
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^{\alpha}} - \frac{\partial L}{\partial q^{\alpha}} = 0$$
,  $(\alpha = 1, ..., f)$ 

Dies sind f Bewegungsgleichungen für die Lagekoordinaten, die durch die skalaren Funktionen T und V gefunden werden können. Die verallgemeinerten oder auch **konjugierten Impulse** lassen sich dann durch

$$p_{\alpha} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^{\alpha}} \tag{2.3}$$

ausdrücken.

## 2.3.5 Das Hamiltonsche Prinzip

Die Gesetze der Mechanik (also die Lagrangen Bewegungsgleichungen) lassen sich für Lagrangesche Systeme aus einem Extremalprinzip ableiten. Dies lässt sich auch für weitere Formen verallgemeinern. Wir definieren die Wirkung:

$$S[q(t)] = \int_{t^{(1)}}^{t^{(2)}} \mathrm{d}t \, L(q, \dot{q}, t) \, .$$

Das Hamiltonsche Prinzip besagt:

**Hamiltonsches Prinzip:** Die Wirkung einer mechanischen Bahn q(t) ist stationär (extremal) bezüglich einer beliebigen Schar  $q_{\lambda}(t)$  von Variationsbahnen mit festen Endpunkten:

$$\delta S = 0$$

Aus dieser Variation erhält man auch die Euler-Lagrange Gleichungen.

## 2.3.6 Weitere Aspekte

#### Alternative Form der Euler-Lagrange Gleichungen

Unter Verwendung der Vertauschbarkeit von Variation und Zeitableitung kann man durch Verwendung einer Koordinaten-freien Darstellung der Summe:

$$\sum_{i=1}^{3N} m_i \dot{x}_i \, \delta \dot{x}_i = \sum_{\alpha=1}^f p_\alpha \, \delta q^\alpha := \langle p, \delta q \rangle$$

als Skalarprodukt kann man die Euler-Lagrange Gleichungen Koordinaten-freien durch:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p,\delta q\rangle = \delta L$$

ausdrücken.

#### Äquivalente Lagrangefunktionen

Zwei Lagrangefunktionen  $L_1$  und  $L_2$  sind äquivalent, wenn sie sich nur durch die totale Zeitableitung einer Funktion F(q, t) unterschieden. Sie liefern dann identische Bewegungsgleichungen:

$$L_1 - L_2 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} F(q, t) \,.$$

Man kann dies nachrechnen oder durch das Hamiltonsche Prinzip zeigen.

## 2.3.7 Erhaltungsgrößen und Satz von Noether

Eine Funktion  $f(q, \dot{q}, t)$  heißt Erhaltungsgröße oder Konstante der Bewegung, wenn für alle mechanischen Bahnen q(t) (also Bahnen, die sich gemäß der Euler-Lagrange Gleichungen entwickeln) gilt:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}f(q,\dot{q},t) = 0\,.$$

#### Zyklische Variablen

Aus den Euler-Lagrange Gleichungen kann man sofort zeigen, dass, wenn die Lagrangefunktion unabhängig von einer Koordinate  $q^{\alpha}$  ist, der zugehörige Impuls erhalten ist:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p_{\alpha} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^{\alpha}} = 0$$

#### Satz von Noether

Wir nennen Abbildungsscharen  $\phi_{\lambda} : \mathbb{R}^f \to \mathbb{R}^f$  mit den Eigenschaften:

$$\phi_0 = \mathbf{1}, \qquad \phi_\lambda \circ \phi_\mu = \phi_{\lambda+\mu}$$

einen **Fluss**<sup>5</sup>. Zu einem Fluss gehört ein sog. **erzeugendes Vektorfeld v** :  $\mathbb{R}^f \to \mathbb{R}^f$ :

$$\mathbf{v}(q) = \frac{\partial}{\partial \lambda} \phi_{\lambda}(q) \Big|_{\lambda=0}$$

Ein Fluss  $q_{\lambda}(t) = \phi_{\lambda}(q(t))$  eine **kontinuierliche Symmetrie** der Lagrangefunktion, wenn eine Funktion  $F_{\lambda}(q, t)$  (nur der Koordinaten!) existiert, sodass gilt:

$$L(q_{\lambda}, \dot{q}_{\lambda}, t) = L(q, \dot{q}, t) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} F_{\lambda}(q, t).$$

Damit lässt sich dann der Satz von Noether formulieren:

**Satz von Noether:** Sei  $\phi_{\lambda}$  eine kontinuierliche Symmetrie von L, dann ist:

$$\langle p, v(q) \rangle - \delta F = \sum_{\alpha=1}^{f} p_{\alpha} v^{\alpha}(q) - \frac{\partial}{\partial \lambda} F \Big|_{\lambda=0} = \text{const.}$$

erhalten.

#### Die 10 klassischen Erhaltungsgrößen

Man kann jede Erhaltungsgröße auf eine kontinuierliche Symmetrie zurückführen. Man kann folgern:

Zeitsymmetrie:	$t_{\lambda} = t + \lambda$	${f Energierehaltung}$
transversale Symetrie:	$\phi_{\lambda}(\mathbf{x}_i) = (\mathbf{x}_i + \lambda b)$	Impulserhaltung
spezielle Galileitransformation:	$\phi_{\lambda}(\mathbf{x}_i, t) = (\mathbf{x}_i + \lambda \mathbf{v}t)$	${f Schwerpunktsintegral}$
Rotationssymmetrie:	$\phi_{\lambda}(\mathbf{x}_i) = (R(\mathbf{e}, \lambda)\mathbf{x}_i)$	Drehimpulserhaltung

wobei  $R(\mathbf{e}, \lambda)$  eine Rotation um die **e**-Achse mit dem Vektorfeld  $\mathbf{v}(\mathbf{x}_i) = (\mathbf{e} \times \mathbf{x}_i)$  und **v** eine konstante Geschwindigkeit ist. Die **Energieerhaltung** ist dabei nicht direkt zu folgern, allerdings kann man zeigen, dass gilt:

$$E = \text{const.} \qquad \Leftrightarrow \qquad \frac{\partial L}{\partial t} = 0$$

### 2.3.8 Das Prinzip von Euler-Maupertuis

Für die Variation einer Bahnform<sup>6</sup> bei fester Energie, wobei die Endpunkte, aber nicht die Endzeiten festgehalten werden, kann man ein weiteres Variationsprinzip herleiten. Für ein System, in dem das Potenzial nur von den Koordinaten abhängt, ist:

$$T(\dot{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^{f} g_{\alpha\beta}(q) \dot{q}^{\alpha} \dot{q}^{\beta}, \qquad g_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} m_{i} \frac{\partial \mathbf{x}_{i}}{\partial q^{\alpha}} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}_{i}}{\partial q^{\beta}}.$$

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>Diese Bedingungen sind 2 der wesentlichen Eigenschaften von Gruppen. Man spricht daher auch von **Symmetriegruppen.** 

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>Wie in HM. III ist die Form einer Bahn  $\Gamma$  unabhängig von ihrer Parametrisierung  $\gamma(t)$ .

Dadurch ist es sinnvoll das sog. mechanische Linienelement einzuführen, mit welchen sich die kinetische Energie kurz ausdrücken lässt:

$$\mathrm{d}s^2 = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^n m_i (\mathrm{d}\mathbf{x}_i)^2 = \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta=1}^f g_{\alpha\beta}(q)\,\mathrm{d}q^\alpha\,\mathrm{d}q^\beta \qquad \Rightarrow \qquad T = \left(\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}\right)^2$$

Dadurch kann man mittels Substitution zeigen:

**Prinzip von Euler-Maupertuis:** Für die Variation einer Bahn bei festgehaltenen Endzeiten und Energie gilt:

$$\delta S_0 = \delta \int_{(1)}^{(2)} \sqrt{E - V(q)} \,\mathrm{d}s$$

wobei man  $S_0$  auch die **reduzierte Wirkung** nennt.

Zur expliziten Berechnung muss man die Kurve kann man die Bahn parametrisieren, wobei dies nicht zwingend der gewohnte Zeitparameter t sein muss. Wählt man z.B.  $q(\tau)$  gilt mit der Gleichung von oben:

$$\delta \int_{\tau^{(1)}}^{\tau^{(2)}} \sqrt{E - V(q(\tau))} \sqrt{T(q(\tau), q'(\tau))} \, \mathrm{d}\tau = 0$$

Die Lösung der Variationsgleichung ergibt sich dann ganz allgemein durch die Euler-Lagrange Gleichungen, wie im folgenden Abschnitt demonstriert wird.

### 2.3.9 Variationsprinzipien

Gegeben sei ein Funktional:

$$F[y] = \int_{a}^{b} f(x, y, y') \,\mathrm{d}x$$

mit den festen Randpunkten y(a) = A und y(b) = B. Gesucht ist diejenige Funktion y(x), für die F[y] extremal wird. Diese Funktion erhält man durch Lösen die Euler-Lagrange Differenzialgleichung:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial f}{\partial y'} - \frac{\partial f}{\partial y} = 0\,.$$

#### Mehrere Funktionen

Betrachten wir ein Funktional von mehreren Funktionen:

$$F[y_1, ..., y_N] = \int_a^b f(y_1, ..., y_N, y'_1, ..., y'_N, x)$$

so erhält man stattdessen die N Euler-Lagrange-Gleichungen:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial f(y,y',x)}{\partial y'_i} - \frac{\partial f(y,y',x)}{\partial y_i} = 0 \quad (i = 1,...,N) \,.$$

#### Mehrere Argumente

Sind mehrere Argumente gegeben, also  $y(x_1, ..., x_n)$  und das Funktional lautet:

$$G[y] = \int \mathrm{d}x_1 \dots \int_B \mathrm{d}x_n \, g\left(y, \frac{\partial y}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial y}{\partial x_n}, x_1, \dots, x_n\right)$$

wobei der Integrationsbereich B festgehalten wird, ergibt sich die Gleichung:

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial g}{\partial (\partial_{x_i} y)} - \frac{\partial g}{\partial y} = 0 \,.$$

Für den Fall das eine der Koordinaten z.B. die Zeit ist, aber auch Raumkoordinaten auftreten so nennt man in diesem Fall g auch eine **Lagrangedichte**. Solche Lagrangedichten spielen z.B. in der Kontinuumsmechanik und der (Quanten-) Feldtheorie eine extrem wichtige Rolle.

#### Allgemeiner Fall

Kombiniert man die beiden vorhergehenden Fälle zu einem Funktional  $(y = (y_1, ..., y_N), x = (x_1, ..., x_n))$ 

$$S[y, y', x] = \int \mathrm{d}x_1 \dots \int_B \mathrm{d}x_n \, L(y_j, \partial_i y_j, x_i)$$

so folgen erneut N Gleichungen:

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial L}{\partial (\partial_{x_i} y_j)} - \frac{\partial L}{\partial y_j} = 0.$$

#### Verschiedene Nebenbedingungen

#### Isoemperimetrische Nebenbedingungen

Sind zusätzliche sog isoemperimetrische Nebenbedingungen in der Form:

$$G[y] = \int_a^b g(x, y, y') \,\mathrm{d}x = C = \text{const.}$$

gegeben so existiert ein Lagrange Multiplikator  $\lambda$ , sodass:

$$L[y,\lambda] = \int_a^b l(x,y,y',\lambda) \,\mathrm{d}x = \int_a^b \left(f(x,y,y') - \lambda g(x,y,y')\right) \,\mathrm{d}x$$

extremal wird. Dann ergibt sich y(x) durch die Euler-Lagrange Gleichungen angewendet auf die Funktion  $l(x, y, y', \lambda)$ . Die Nebenbedingung ist dann eine zusätzliche Gleichung um alle Integrationskonstanten festzulegen.

#### Holonome Nebenbedingungen

Sind Holonome Randbedingungen, wie in der Lagrangen Mechanik, durch:

$$g_{\alpha}(y_1, \dots, y_N, x) = 0 \quad 1 \le \alpha \le R < N$$

gegeben, so erhält man aus der Variation die Euler-Lagrange Gleichungen in der Form:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial F}{\partial y'_i} = \frac{\partial F}{\partial y_i} - \sum_{\alpha=1}^R \lambda_\alpha(x)\frac{\partial g_\alpha}{\partial y_i}.$$

#### Funktionalableitung und Variation

Die Variation eines Funktionals lässt sich auch direkt als "Ableitungsvorschrift"interpretieren. Man definiert die sog. Funktionalableitung. Diese ist die Funktion  $\frac{\delta F[y]}{\delta y}$ , die für alle Testfunktionen<sup>7</sup> erfüllt:

$$\int_{\Omega} \left( \frac{\delta F[y]}{\delta y} \right) h(x) \, \mathrm{d}x = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{F[y + \epsilon h] - F[y]}{\epsilon}$$

Diese Funktionalableitung ist, wie die gewöhnliche Ableitung, **linear** und es gelten sowohl **Produkt-** als auch **Kettenregel**.

**Beispiel:** Wir betrachten das Funktional:

$$F[y] = \int_{\mathbb{R}} y(x)^2 g(x) \, \mathrm{d}x \, .$$

Dann gilt:

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{\delta F}{\delta y(x)} h(x) \, \mathrm{d}x = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\epsilon} \left( \int_{\mathbb{R}} (y(x) + \epsilon h(x))^2 g(x) \, \mathrm{d}x - \int_{\mathbb{R}} y(x)^2 g(x) \, \mathrm{d}x \right)$$
$$= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\epsilon} \int_{\mathbb{R}} (2y(x)\epsilon h(x)g(x) + \epsilon^2 h(x)^2 g(x)) \, \mathrm{d}x$$
$$= \int_{\mathbb{R}} 2y(x)g(x)h(x) \, \mathrm{d}x$$

Also ist  $\frac{\delta F[y]}{\delta y(x)} = 2y(x)g(x)$ .

Die Behandlung in dieser Form ist relativ umständlich. Deutlich leichter wird die Behandlung, wenn man mit  $\delta$ -Distributionen rechnet. Dazu brauchen wir die Regel für das Funktional:

$$F_x[f] := \int_{\mathbb{R}} f(y)\delta(x-y) \,\mathrm{d}y.$$

Das heißt:

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{\delta F_x[f]}{\delta f(y)} h(x) \, \mathrm{d}x = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{\epsilon} \int_{\mathbb{R}} \left( (f(y) + \epsilon h(y))\delta(x - y) - f(y)\delta(x - y) \right) \, \mathrm{d}y = h(x)$$
$$\Leftrightarrow \qquad \frac{\delta f(x)}{\delta f(y)} = \delta(x - y)$$

Damit kann man dann mittels der Kettenregel sehr leicht weiterrechnen. Unter der Vertauschung mit der Ableitung nach x erhält man zudem:

$$\frac{\delta f^{(n)}(x)}{\delta f(y)} = \frac{\delta}{\delta f(y)} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} f(x) = \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \delta(x-y)$$

Die Euler-Lagrange Gleichungen kann man dann mittels dieses allgemeinen Vorgehens herleiten:

$$\delta S = \frac{\delta}{\delta y} \int L(y, \dot{y}, t') \, \mathrm{d}t' = \int \frac{\delta L}{\delta y} (y, \dot{y}, t') \, \mathrm{d}t'$$
$$= \int \left(\frac{\partial L}{\partial y} \delta(t - t') + \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'} \delta(t - t')\right) \, \mathrm{d}t' = \frac{\partial L}{\partial y} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} \, \mathrm{d}t'$$

 $<sup>^7\</sup>mathrm{Die}$  Testfunktionen haben einen kompakten Träger im Integrationsgebiet $\Omega.$ 

Sehr angenehm ist, dass man nach diesem Prinzip auch höhere Ableitungen und weitere Fälle berücksichtigen kann. Die Form der zu minimierenden Gleichung für Randbedingungen ergibt sich so allerdings nicht.

## 2.4 Schwingungsprobleme

### 2.4.1 Konservative schwingende Systeme

Wir betrachten ein System, dessen Energie durch die f Lagekoordinaten  $q = (q^1, ..., q^f)$  festgelegt ist. Es soll die Energierhaltung in der Form

$$E = T(\dot{q}) + V(q)$$

gelten. Dabei sollen kinetische Energie und Potenzial in quadratischer Form vorliegen:

$$T(\dot{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^{f} g_{\alpha\beta}(q) \dot{q}^{\alpha} \dot{q}^{\beta}, \qquad E(q,\dot{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^{f} k_{\alpha\beta}(q) \dot{q}^{\alpha} \dot{q}^{\beta},$$

wobei k und g symmetrische Matrizen sind. Dann kann man symmetrische Matrizen  $\overline{T}$  und  $\overline{V}$  finden, sodass mit dem Spaltenskalarprodukt gilt:

 $T(\dot{q}) = \dot{q} \cdot \bar{T}\dot{q}$  und  $V(q) = q \cdot \bar{V}q$ .

Unter Ausnutzung der Symmetrie erhält man dann durch die Energieerhaltung:

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} = 2\dot{q}\cdot\left(\bar{T}\ddot{q} + \bar{V}q\right) = 0$$

Da diese Gleichung für alle  $\dot{q}$  erfüllt sein muss folgt die **Bewegungsgleichung**:

$$\ddot{q} = -\tilde{V}q$$
, mit  $\tilde{V} = \bar{T}^{-1}\bar{V}$ .

Da  $\tilde{V}$  symmetrisch ist, ist  $\tilde{V}$  auch diagonalisierbar und man kann das Problem vollständig lösen. Die Annahme einer Quadratischen Form für das Potenzial ist durchaus sinnvoll, da jedes Potenzial um sein Minimum  $q_0$  entwickelt eine solche Form aufweist, denn eine Mehrdimensionale Taylorentwicklung liefert:

$$V(q) \approx \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^{f} \frac{\partial^2 V}{\partial q^{\alpha} \partial q^{\beta}} \Big|_{q_0} (q^{\alpha} - q_0^{\alpha}) (q^{\beta} - q_0^{\beta})$$

#### 2.4.2 Diskrete Symmetrien

Eine diskrete Symmetrie ist eine lineare Abbildung ("Matrix")  $S : \mathbb{R}^f \to \mathbb{R}^f$ , die T und V invariant lässt:  $T(\dot{q}) = T(S\dot{q})$  und V(q) = V(Sq). Man kann folgern, dass S unitär sein muss und mit  $\tilde{V}$  kommutiert:

 $S^{-1}=S^T\,,\qquad [S,\,\tilde V]=S\tilde V-\tilde V S=0\,.$ 

Daher gilt in einer Eigenbasis  $\{e_k\}_k$  von S:

$$Se_k = \lambda_k e_k \quad \Rightarrow \quad SVe_k = \lambda_k Ve_k$$

Es kann mehr als einen Vektor  $e_k$  zum Eigenwert  $\lambda_k$  geben. Da zwei symmetrische, kommutierende Matrizen eine gemeinsame Basis aus Eigenvektoren besitzen, kann man nun das Eigenwertproblem von  $\tilde{V}$  in jedem Eigenraum von S lösen, was die Dimension des Problems verringert.

## 2.4.3 Der eindimensionale Oszillator

Ein Oszillator der Masse m in einem harmonischen Potenzial  $V = kx^2/2$  mit Reibungsund Treibkraft hat die allgemeine Bewegungsgleichung:

$$\ddot{x} + 2\lambda \dot{x} + \omega_0^2 x = f(t)$$

wobei  $\omega_0 = \sqrt{k/m}$  ist. Die allgemeine Lösung dieser Gleichung ist durch die Summe der homogenen Gleichung (ohne f(t)) und einer partikulären Lösung gegeben. Die **homogene Gleichung** hat für verschiedene Verhältnisse von  $\lambda$  und  $\omega_0$  unterschiedliche Lösungen:

•  $\lambda < \omega$  Schwingfall: Mit den Integrationskonstanten  $A_1$  und  $A_2$  gilt:

$$x_{\text{hom}}(t) = e^{-\lambda t} \left( A_1 \sin(\omega_0 t) + A_2 \cos(\omega_0 t) \right)$$

•  $\lambda > \omega_0$  Kriechfall:

$$x_{\text{hom}}(t) = B_1 e^{-\lambda_1 t} + B_2 e^{-\lambda_2 t} \qquad \text{mit}$$
$$\lambda_{1,2} = \lambda \pm \sqrt{\lambda^2 - \omega_0^2}$$

•  $\lambda = \omega_0$  Aperiodischer Grenzfall: Aus einer speziellen Lösungsmethode erhält man:

$$x_{\text{hom}}(t) = (C_1 + C_2 t)e^{-\lambda t}$$

Für einen ungetriebenen Oszillator ist f(t) = 0 und somit die homogene Lösung universal gültig. Eine **partikuläre Lösung** für eine **harmonische Treibkraft**  $f(t) = f_w \cos(\omega t)$  lautet:

$$X_{\text{part}}(t) = f_w \chi(\omega) e^{i\omega t} \quad \text{mit}$$
$$\chi(\omega) = \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 + 2i\lambda\omega}.$$

Man nennt  $\chi(\omega)$  auch die **dynamische Suszeptibilität**. Offensichtlich ist die partikuläre Lösung nicht gedämpft, sodass sich nach einer gewissen Zeit immer die partikuläre Lösung als Schwingung einstellt. Die Schwingung verläuft dann im reellen gemäß:

$$x = f_w |\chi(\omega)| \cos(\omega t + \delta(\omega))$$

Hierbei tritt **Resonanz und Phasenverschiebung** auf. Die Resonanzfrequenz erhält man aus dem Maximum von  $\chi(\omega)$  zu:

$$\omega_{\rm res} = \sqrt{\omega_0^2 - 2\lambda^2}$$
 .

#### 2.4.4 Saitenschwingung

Man betrachtet viele paarweise gekoppelte harmonische Oszillatoren (Kopplungskraft P) mit Abstand  $\Delta x$  und Masse  $\Delta m$ . Durch einen Kontinuumslimes  $\Delta x \rightarrow dx \rightarrow 0$  und  $\Delta m \to 0$  be<br/>i $\rho = \Delta m / \Delta x = {\rm const.}$ erhält man für kinetische und potenzielle Energie folgende Gleichungen:

$$U = \frac{P}{2} \int_0^l \mathrm{d}x \left(\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}\right)^2, \quad T = \frac{\rho}{2} \int_0^l \mathrm{d}x \left(\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}\right)^2$$

Dabei ist u(x,t) die Auslenkung der Saite am Ort x. Die Lagrange Funktion ist entsprechend gegeben. Bei einer Variation der Wirkung muss nun eben auch in x variiert werden, sodass die Lagrangedichte:

$$L(u, \dot{u}, u', x, t) = \frac{\rho}{2}\dot{u}(x, t)^2 - \frac{P}{2}u'(x, t)^2$$

betrachten müssen. Aus dem Variationsprinzip (leicht mit Funktionalableitung) ergibt sich die Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial L}{\partial \dot{u}} + \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial L}{\partial u'} - \frac{\partial L}{\partial u} = 0$$

Setzt man die erhaltene Lagrange dichte ein so führt dies auf die bekannte **Wellenglei**chung mit der Wellengeschwindigkeit  $c = \sqrt{P/\rho}$ :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 \,.$$

Dies ist ein erstes Beispiel einer **Feldtheorie**. Die Funktion u(x,t) ist ein skalares, zeitabhängiges Feld, abhängig von einer Ortskoordinate x. Weitere solche Feldtheorien spiele in der Teilchenphysik eine entscheidende und extrem fundamentale Rolle.

# 2.5 Feste Körper

## 2.5.1 Massenverteilung und Trägheitstensor

Ein starrer Körper wird durch die Massenverteilung

$$\mathrm{d}m = \rho(\mathbf{y})\,\mathrm{d}^3y$$

bezüglich eines körperfesten Koordinatensystems  $\mathbf{y}$  beschrieben. Im raumfesten Inertialsystem  $\mathbf{x}$  wird die Bewegung dann durch:

$$\mathbf{x}(t) = R(t)\mathbf{y} + \mathbf{b}(t), \qquad (R \in SO(3), \ \mathbf{b} \in \mathbb{R}^3)$$

beschrieben. Man verwendet häufig zur Beschreibung der Rotation einen Vektor $\omega$  für den gilt:

$$R^{T}\dot{R} := \Omega = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_{3} & \omega_{2} \\ \omega_{3} & 0 & -\omega_{1} \\ -\omega_{2} & \omega_{1} & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \Omega \mathbf{y} = \omega \times \mathbf{y}$$
(2.4)

Viele relevante Größen lassen sich durch die Massenverteilung beschreiben:

- Gesamtmasse:  $M = \int dm$
- Schwerpunkt:  $\mathbf{X} = M^{-1} \int \mathrm{d}m \, \mathbf{x}$
- Drehimpuls:  $\mathbf{L} = \int \mathbf{x} \times \dot{\mathbf{x}} \, \mathrm{d}m$
- kinetische Energie:  $T = \frac{1}{2} \int \dot{\mathbf{x}}^2 dm$

Die Gleichungen für konzentrierte Massenpunkte an einem Ort  $\mathbf{y}_0$  erhält man dann durch das Massenelement  $dm = m_0 \delta(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0) d^3 y$ .

Man hat immer die Möglichkeit das körperfeste Koordinatensystem auf den Schwerpunkt zu legen ( $\mathbf{Y} = 0$ ) oder auf den festgehaltenen Punkt ( $\mathbf{b} = 0$ ). In beiden Fällen vereinfachen sich Gleichungen für Energie und Drehimpulse.

• Energie: Die Gleichung für die kinetische Energie lautet:

$$T = \frac{1}{2}M\dot{\mathbf{b}}^2 + T_{\rm rot}\,,$$

wobei sich die Rotationsenergie mittels des Trägheitstensors  $\Theta$  ausrücken lässt:

$$\Theta_{ik} = \int \mathrm{d}m \left( \mathbf{y}^2 \delta_{ik} - y_i y_k \right) \quad \Rightarrow \quad T_{\mathrm{rot}} = \frac{1}{2} \Theta_{ik} \omega_i \omega_k = \frac{1}{2} \omega \cdot \mathbf{\Theta} \omega \,.$$

• Drehimpuls: Für den Drehimpuls erhält man analog:

$$\mathbf{L} = M\mathbf{b} \times \dot{\mathbf{b}} + R\mathbf{\Theta}\omega \,.$$

#### Trägheitstensor

Der Trägheitstensor ist eine symmetrische, reelle  $3 \times 3$  Matrix, die zeitunabhängig ist, da sie im körperfesten Bezugssystem berechnet wird. Sie lässt sich aufgrund der Symmetrie diagonalisieren und die **Diagonalelemente** werden dann **Hauptträgheitsachsen** genannt. Die Komponenten des Trägheitstensors um eine um **a** verschobene, parallele Achse ist nach dem **Satz von Steiner** durch:

$$\Theta_{ik}' = \Theta_{ik} + M(\mathbf{a}^2\delta_{ik} - a_i a_k)$$

gegeben.

## 2.5.2 Bewegungsgleichungen

Die Bewegung eines starren Körpers lässt sich mittels der 6 Gleichungen:

 $M\ddot{\mathbf{X}} = \mathbf{F} \qquad \text{(Impulssatz)}$  $\dot{\mathbf{L}} = \mathbf{M} \qquad \text{(Drehimpulssatz)}$ 

beschreiben, wobei **F** und **M** bezüglich  $\mathbf{x} = 0$  zu betrachten sind. Der Drehimpulssatz lässt sich leicht in das körperfeste System transformieren. Mithilfe des Vektors  $\mathbf{S} = \boldsymbol{\Theta}\omega$ , also dem Drehimpuls der Eigenrotation, erhält man:

$$\dot{\mathbf{S}} + \omega \times \mathbf{S} + R^T (\mathbf{b} \times M \ddot{\mathbf{b}}) = R^T \mathbf{M}.$$
## Schwerpunkt als Bezugspunkt:

Wählt man den Schwerpunkt als Bezugspunkt, also ( $\mathbf{Y} = 0$ ), do vereinfacht sich die obige Gleichung zu:

$$\dot{\mathbf{S}} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{S} = \mathbf{N} =: R^T (\mathbf{M} - \mathbf{X} \times \mathbf{F}),$$

wobei  ${\bf N}$  dann das Gesamtdrehmoment bezüglich des Schwerpunktes im körperfesten Koordinatensystem ist.

## Kreisel:

Bei einem Kreisel wird der starre Körper im Aufhängungspunkt  $\mathbf{x} = \mathbf{y} = 0$  festgehalten. Dadurch fällt der Impulssatz bei der Beschreibung weg. Es gilt  $\mathbf{b} = 0 \forall t$  und  $\mathbf{N} = R^T \mathbf{M}$ . Die Gleichung von oben lässt sich im Hauptachsensystem auf die drei **Eulerschen Gleichungen** zurückführen:

$$\begin{aligned} \theta_1 \dot{\omega}_1 + (\theta_3 - \theta_2) \omega_2 \omega_3 &= N_1 \\ \theta_2 \dot{\omega}_2 + (\theta_1 - \theta_3) \omega_3 \omega_1 &= N_2 \\ \theta_3 \dot{\omega}_3 + (\theta_2 - \theta_1) \omega_1 \omega_2 &= N_3 \end{aligned}$$

Durch die Bestimmung von  $\omega_i(t)$  ist dann auch R(t) gegeben und die Rotation bekannt. Man kann zeigen, dass für einen freien Kreisel ( $\mathbf{N} = 0$ ) nur die Rotation um die Achse mit dem kleinsten und dem größten Hauptträgheitsmoment stabil ist.

# 2.6 Hamiltonsche Systeme

In der Hamiltonschen Formulierung der Mechanik geht man dazu über nicht, wie im Lagrange Formalismus, Koordinaten und Geschwindigkeiten, sondern Lagekoordinaten und ihre jeweiligen konjugierten / kanonischen Impulse zu betrachten. Dafür benötigt man eine neue sog. Hamiltonfunktion, die man aus der Lagrangefunktion durch eine sog. Legendre Transformation erhält. Es gilt:

**Hamiltonfunktion:** 
$$H(q, p, t) = \langle p, \dot{q}(q, p, t) \rangle - L(q, \dot{q}(q, p, t), t)$$

mit dem Skalarprodukt  $\langle p,q \rangle = \sum_{\alpha} p_{\alpha}q^{\alpha}$ . Dabei müssen die Geschwindigkeiten durch Auflösen von (2.3) nach  $\dot{q}^{\alpha}$  bestimmt werden. Für eine quadratische Form der kinetischen Energie und einem von  $\dot{q}$  unabhängigem Potenzial ist die Hamiltonfunktion die **Gesamtenergie**.

# 2.6.1 Die kanonischen Bewegungsgleichungen

Die 2*f*-Koordinaten q, p nennt man auch die sog. **Phasenraumkoordinaten**. auf dem **Phasenraum**. q und p werden als unabhängige, gleichberechtigte Koordinaten auf diesem Raum aufgefasst, sodass  $\partial_p q = \partial_q p = 0$ . Durch Bilden der partiellen Ableitungen erhält man die sog. kanonischen Bewegungsgleichungen:

Kanonische Bewegungsgleichungen: 
$$\frac{\partial H}{\partial p_{\alpha}} = \dot{q}^{\alpha}, \quad \frac{\partial H}{\partial q^{\alpha}} = -\dot{p}_{\alpha}$$
 (2.5)

Auch diese Gleichungen kann man durch eine Variation der Wirkung erhalten. Außerdem erhält man trivial:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}$$

Durch die Einführung einer 2*f*-dimensionalen Variable  $x := (q^1, p_1, q^2, p_2, ..., q^f, p_f)$  kann man die Bewegungsgleichungen durch die allgemeine Form:

$$\dot{x}_k = \sum_{i=1}^{2f} \varepsilon_{ki} \frac{\partial H}{\partial x_i} \qquad \text{mit} \qquad \varepsilon = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & \\ -1 & 0 & & \\ & \ddots & \\ & & 0 & 1 \\ & & & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

ausdrücken. In Matrix-Vektor Schreibweise lautet diese Gleichung:  $\dot{x} = \epsilon \nabla_x H$ . Die Matrix  $\varepsilon$  erfüllt  $\varepsilon^2 = -1$  und  $\varepsilon^{-1} = \varepsilon^T = -\varepsilon$ . Man kann also leicht umformen:  $\nabla_x H = \varepsilon^T \dot{x}$ . Mithilfe der **Poissonklammer**:

$$\{F_1, F_2\} = \sum_{i,k=1}^{2f} \frac{\partial F_1}{\partial x_k} \varepsilon_{ki} \frac{\partial F_2}{\partial x_i} = \sum_{\alpha=1}^f \frac{\partial F_1}{\partial q^\alpha} \frac{\partial F_2}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial F_1}{\partial p_\alpha} \frac{\partial F_2}{\partial q^\alpha}$$

kann man die Änderung einer Beliebigen Funktion auf einer Bahn im Phasenraum durch:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F(x,t) = \{H,F\} + \frac{\partial F}{\partial t}$$
(2.6)

ausdrücken. Die Bewegungsgleichungen haben dann die Form:

$$\dot{x}_k = \{H, x_k\}$$

Das Rechnen mit Poissonklammern wird durch die drei sog. kanonischen Poissonklammern erleichtert:

$$\{q_{\alpha}, q^{\beta}\} = 0, \qquad \{q^{\alpha}, p_{\beta}\} = \delta_{\alpha\beta}, \qquad \{p_{\alpha}, p_{\beta}\} = 0$$

Tatsächlich erfüllen die Poisson-Klammern die Bedingungen einer **Lie-Algebra**, analog zu den Kommutatoren der Quantenmechanik. Allgemein ist diese Schreibweise nützlich um später Beziehungen zur Quantenmechanik zu erkennen.

# 2.6.2 Kanonische Transformationen

Man nennt eine bijektive Transformation  $\bar{x}_i = \phi(x_1, ..., x_{2f})$  kanonisch, wenn sie die kanonischen Bewegungsgleichungen forminvariant lässt, also dass gilt:

$$\sum_{k=1}^{2f} \varepsilon_{ki} \dot{\bar{x}}_k = \frac{\partial \bar{H}}{\partial \bar{x}_i}$$

wobei  $\overline{H}(\overline{x}) = (\overline{H} \circ \phi)(x) = H(x)$ . gilt. Mittels der Kettenregel kann man herleiten, dass diese Bedingung äquivalent dazu ist, dass die Jakobi Matrix A von  $\phi \varepsilon$  invariant lässt, also dass gilt:

$$A_{ij} = \frac{\partial \bar{x}_i}{\partial x_i}, \qquad A^T \varepsilon A = \varepsilon$$

Man nennt A dann **symplektisch**. Mathematisch bilden die symplektischen Matrizen gleicher Dimension eine Gruppe, die man mit Sp(2f) bezeichnet. Für symplektische Matrizen gilt:

$$A \in \operatorname{Sp}(2f) \quad \Rightarrow \quad (\operatorname{Det} A)^2 = 1$$

Eine solche Transformation lässt gemäß der Kettenregel auch alle Poissonklammern invariant ( $\{F_1, F_2\} = \{\bar{F}_1, \bar{F}_2\}$ ). Um zu überprüfen, ob eine Transformation kanonisch ist genügt es zu prüfen, ob alle kanonischen Poissonklammern erhalten sind.

#### 2.6.3 Kanonische Flüsse

Als einen kanonischen Fluss auf dem Phasenraum  $\Gamma$  bezeichnet man eine Abbildung der Form:  $\phi_{\lambda} : x \mapsto \bar{x} = x(\lambda)$ , d.h eine Schar kanonischer Transformationen mit  $x(0) = \phi_0(x) = x$ . Der Unterschied zur "gewöhnlichen" kanonischen Transformation ist der kontinuierliche Parameter  $\lambda$ . Die Ableitung dieses Flusses nach  $\lambda$  nennt man das **erzeugende** Vektorfeld:

$$\frac{\mathrm{d}\bar{x}}{\mathrm{d}\lambda} = \frac{\partial\phi_{\lambda}}{\partial\lambda}(x) =: v(\phi_{\lambda}(x))$$

Die Bedingung, dass ein Fluss kanonisch ist lautet: Es existiert eine Funktion F(x), sodass gilt:

$$\sum_{k=1}^{2f} \varepsilon_{ki} \frac{\mathrm{d}x_k(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda} = \frac{\partial F}{\partial x_i}(x(\lambda))$$

Man nennt F(x) dann auch die **erzeugende Funktion** des Flusses. Diese Gleichung ist analog zu den kanonischen Bewegungsgleichungen, wobei der Zeitparameter t durch  $\lambda$ und die Hamiltonfunktion H durch F ersetzt wurde. Die Lösungsbahnen der Bewegungsgleichugen sind also auch kanonische Flüsse.

### 2.6.4 Satz von Liouville

Satz von Liouville: Ein Phasenraumvolumen

$$\mu(\Omega) = \int_{\Omega} \mathrm{d}x_1 \dots \mathrm{d}x_{2f}$$

ist invariant unter einem kanonischen Fluss:

$$\mu(\phi_t(\Omega)) = \mu(\Omega) \,.$$

Insbesondere gilt dies für die Zeitentwicklung.

Man kann dies durch den Transformationssatz der mehrdimensionalen Integration zeigen.

## 2.6.5 Erhaltungsgrößen

Aus Gleichung 2.6 erhält man sofort ein Kriterium zur Bestimmung der Zeitentwicklung beliebiger Funktionen auf einer mechanischen Bahn. Aus der sog. Jacobi Identität:

$$\{\{f_1, f_2\}, f_3\} + \{\{f_2, f_3\}, f_1\} + \{\{f_3, f_1\}, f_2\} = 0$$

erhält man den Poisson'schen Satz:

**Poisson'scher Satz:** Seien zwei Erhaltungsgrößen  $F_1$  und  $F_2$  gegeben, die nicht explizit von der Zeit abhängen. Dann ist wegen der Jacobi Identität auch die Poissonklammer  $\{F_1, F_2\}$  erhalten.

Häufig erhält man hierdurch aber triviale Ergebnisse, wie  $\{F_1, F_2\} = c$ . Wenn sogar  $\{F_1, F_2\} = 0$  ist, so sagt man:  $F_1$  und  $F_2$  sind in **Involution**.

Die Gleichung 2.6 lässt sich leicht umschreiben. Wir bezeichnen die von F und H erzeugten kanonischen Flüsse mit  $\psi_{\lambda}$  und  $\phi_t$ , dann gilt:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F(q,p) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F(\phi_t(x)) = \{F,H\} = -\{H,F\} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}H(\psi_\lambda(x))$$

Das ist der sog. Erhaltungssatz:

**Erhaltungssatz:** Die Größe F ist erhalten, wenn H unter dem von F generierten Fluss invariant ist.

# 2.6.6 Erzeugung kanonischer Transformationen

Wir betrachten eine möglicherweise zeitabhängige Koordinatentransformation, dargestellt als Funktion der alten Koordinaten:  $\bar{x}(x_1, ..., x_{2f}, t)$ . Die neuen Koordinaten bezeichnen wir mit:  $\bar{x} = (Q^1, P_1, ..., Q^f, P_f)$ . Da die Transformation kanonisch ist, sind die Bewegungsgleichungen forminvariant, dazu wird allerdings eine neue Hamiltonfunktion  $K(\bar{x}, t)$ benötigt. Damit dies zutreffen kann, müssen die Lagrange Funktionen bis auf eine totale Zeitableitung einer Funktion F(q, Q, t) übereinstimmen:

$$\sum_{\alpha=1}^{f} p_{\alpha} \dot{q}^{\alpha} - H(x,t) = \sum_{\alpha=1}^{f} P_{\alpha} \dot{Q}^{\alpha} - K(\bar{x},t) + \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}(q,Q,t)$$

Durch Bilden des totalen Differenzials und einen Koeffizientenvergleich erhält man die Bedingungen:

$$p_{\alpha} = \frac{\partial F}{\partial q^{\alpha}}, \qquad P_{\alpha} = -\frac{\partial F}{\partial Q^{\alpha}}, \qquad K(\bar{x},t) = H(x(\bar{x}),t) + \frac{\partial F}{\partial t}(q,Q,t).$$

Oft ist es auch nützlich, die erzeugende Funktion nicht durch die Variablen q und Q, sondern durch die alten Koordinaten q und neuen Impulse P auszudrücken. Wegen der letzten Gleichung leistet diesen Übergang auf eine neue erzeugende Funktion S(q, P, t)eine Legendre Transformation:

$$S(q, P, t) = F(q, Q, t) + \sum_{\alpha=1}^{f} P_{\alpha}Q^{\alpha}$$

Analog zum obigen Vorgehen erhält man dann die Beziehungen:

$$p_{\alpha} = \frac{\partial S}{\partial q^{\alpha}}, \qquad Q^{\alpha} = \frac{\partial S}{\partial P_{\alpha}}, \qquad K(\bar{x}, t) = H(x(\bar{x}), t) + \frac{\partial S}{\partial t}$$
 (2.7)

Um die kanonische Transformation dann explizit anzugeben muss die erste Gleichung nach  $P_{\alpha}$  aufgelöst werden und dann in die zweite eingesetzt werden. Man kann nun frei Swählen. Man nennt S nun die **erzeugende Funktion** einer kanonischen Transformation (nicht zu verwechseln mit der eines kanonischen Flusses).

# 2.7 Hamilton-Jacobi-Theorie

# 2.7.1 Der zeitunabhängige Fall

Wir betrachten ein System mit zeitunabhängiger Hamiltonfunktion H. Der Ansatz der Hamilton-Jacobi-Theorie besteht darin, eine zeitunabhängige kanonische Transformation zu finden, sodass die neue Hamiltonfunktion gerade einfach durch einen der neuen Impulse gegeben ist:  $K = P_f$ . Diese verallgemeinerte Impulskoordinate stellt dann natürlich die Energie dar und die Bewegungsgleichungen werden trivial:

$$\begin{split} \dot{P}_{\alpha} &= -\frac{\partial K}{\partial Q^{\alpha}} = 0, \qquad (\alpha = 1, ..., f), \\ \dot{Q}^{\alpha} &= \frac{\partial K}{\partial P_{\alpha}} = 0, \qquad (\alpha = 1, ..., f - 1), \qquad \dot{Q}^{f} = \frac{\partial K}{\partial P_{f}} = 1 \end{split}$$

Dieser Transformation ordnen wir die erzeugende Funktion  $S_0(q, P)$  zu, dadurch ist die Hamiltonfunktion gegeben durch:

**Hamilton-Jacobi Gleichung:** 
$$H\left(q^1, ..., q^f, \frac{\partial S_0}{\partial q^1}, ..., \frac{\partial S_0}{\partial q^f}\right) = P_f = E$$
 (2.8)

Dies ist eine partielle Differenzialgleichung erster Ordnung für  $S_0(q, P)$ . Hat man  $S_0(q, P)$ bestimmt so ergeben sich durch (2.7) die neuen Koordinaten. Eine Sonderstellung nimmt im Zeitunabhängigen Fall die Kombination der Gleichungen für  $\dot{Q}^f$  und  $Q_f$  ein, da hieraus folgt:

$$\frac{\partial S_0}{\partial E}(q, P) = t_0 + t$$

Somit ist auch der zeitliche Durchlauf der Bahnkurve gegeben. Eine solche vollständige Schar von Lösungen nennt man auch ein **vollständiges Integral**.

# 2.7.2 Separation

Partielle Differenzialgleichungen der Form von (2.8) lassen sich besonders leicht lösen, wenn man sie in eine Form

$$f\left(q^{1}, \frac{\partial S_{0}}{\partial q^{1}}\right) = F\left(q^{2}, ..., q^{f}, \frac{\partial S_{0}}{\partial q^{2}}, ..., \frac{\partial S_{0}}{\partial q^{f}}\right)$$

umschreiben kann. Man nennt dies auch einen **Separationsschritt**, da man die Koordinaten voneinander getrennt, also separiert hat. Da beide Seiten dieser Gleichung von verschiedenen Variablen abhängen, die sich insbesondere unabhängig voneinander ändern können, müssen die Seiten gleich einer Konstanten sein. Dies erfüllt ein **summarischer Separationsansazt**:

$$S_0(q^1, ..., q^f) = S_1(q^1, P_1) + \tilde{S}_0(q^2, ..., q^f, P_2, ..., P_f),$$

welcher auf die beiden getrennten Gleichungen:

$$f\left(q^1, \frac{\partial S_1}{\partial q^1}\right) = P_1, \qquad F\left(q^2, ..., q^f, \frac{\partial \tilde{S}_0}{\partial q^2}, ..., \frac{\partial \tilde{S}_0}{\partial q^f}\right) = P_1$$

führt. Der Ansatz, dass es sich bei den Konstanten um die entsprechenden Impulse handelt ist willkürlich, aber natürlich zulässig. Hierdurch ergeben sich Gleichungen für S(q, P). Dadurch erhält man in der Hamilton-Jacobi-Theorie die automatisch durch Lösen der Gleichung alle Erhaltungsgrößen des Systems. Lässt sich dieser Separationsschritt f-mal ausführen, so heißt das Problem **vollständig Separabel**. Analog zum summarischen Separationsansatz ist der **faktorische Separationsansatz**:

$$f(q) = \prod_{i=1}^{f} g_i(q_i)$$

Solche Ansätze werden vor allem in der Elektrodynamik und Quantenmechanik verwendet.

#### Zyklische Variablen

Für zyklische Variablen ist die Separation besonders einfach. Geht die Variable  $q_1$  nicht explizit in die Hamiltonfunktion ein, so führt ein Separationsansatz automatisch auf

$$S_1 = P_1 q^1 \,.$$

## 2.7.3 Winkel-Wirkungsvariablen

Betrachtet man ein separables Problem ist  $p_{\alpha} = \partial S_{\alpha}/\partial q^{\alpha}$  und man kann eine spezielle Wahl der Koordinaten, die sogenannten **Winkel-Wirkungsvariablen** treffen, in denen die Bewegungsgleichungen trivial werden. Die **Wirkungsvariablen**  $J_{\alpha}$  sind dabei gegeben, durch das geschlossene Kurvenintegral, bei festen  $q^{\beta}$  mit  $\beta \neq \alpha$ :

$$J_{\alpha} = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_{\alpha}} p_{\alpha}(q^{\alpha}) \,\mathrm{d}q^{\alpha}$$
(2.9)

Man unterscheidet:

- a) Rotation (Bsp.: Winkel  $\varphi$  in Polarkoordinaten):  $q^{\alpha}$  ist periodische Variable mit Periode  $q_0^{\alpha}$  und die Kurve  $\gamma_{\alpha}$  verbindet  $q^{\alpha} = 0$  mit  $q^{\alpha} = q_0^{\alpha}$
- b) Libration (Bsp.: Position q beim harmonischen Oszillator): die Kurve  $\gamma_{\alpha}$  umschließt eine Fläche im Phasenraum.

Nach Konstruktion sind die Wirkungsvariablen unabhängig von den  $q^{\alpha}$  und somit nur von den P's abhängig, also ebenfalls erhalten: Somit definieren wir die  $J_{\alpha}$  als neue Impulse und erhalten eine neue erzeugende Funktion  $\tilde{S}_0(q, J) = S_0(q, P(J))$ , die auf die kanonisch konjugierten **Winkelvariablen**:

$$\phi^{\alpha}(q,J) = \frac{\partial \tilde{S}_0}{\partial J_{\alpha}} \tag{2.10}$$

schließen lässt. Die neue Hamilton Funktion  $K(J) = P_f(J)$  hängt nicht von den Winkelvariablen ab und es gilt:

$$\dot{\phi}^{\alpha} = \frac{\partial K(J)}{\partial J_{\alpha}} := \omega^{\alpha}(J) \quad \Rightarrow \quad \phi^{\alpha} = \omega^{\alpha}(J)t + \phi_{0}^{\alpha} \tag{2.11}$$

Man kann zeigen, dass die Winkelvariablen alle Winkelvariablen periodische Bewegungen ausführen und zyklisch sind. Die Bewegung spielt sich also im Phasenraum auf einem **fdimensionalen Torus** ab. Da die verallgemeinerten Koordinaten  $q = q(\phi, J)$  Funktionen der Winkel- und der Wirkungsvariablen sind und somit insbesondere gilt:  $q(\phi+2\pi m, J) =$  $q(\phi, J)$  mit  $m \in \mathbb{Z}^{f}$ , kann man sie immer als eine Fourierreihe ausdrücken:

$$q^{\alpha}(t) = \sum_{m \in \mathbb{Z}^f} A^{\alpha}_{m_1,\dots,m_f} \exp\left(i\sum_{\beta=1}^f m_{\beta}(\omega^{\beta}t + \phi^{\beta}_0)\right)$$
(2.12)

Es ist klar, dass die Gesamtbewegung (Vektor q mit allen  $q_{\alpha}$ ) i.A. nicht periodisch ist, da die Kreisfrequenzen nicht immer kommensurabel, d.h.  $\omega^i/\omega^j \notin \mathbb{Q}$  gilt. Sind zwei Frequenzen kommensurabel, spricht man von einer Entartung der Bewegung in diesen. Sind alle Kreisfrequenzen kommensurabel, ist die Bewegung vollständig entartet.

#### Adiabatische Invarianten

Wir betrachten ein (autonomes) integrables mechanisches System mit der Hamiltonfunktion  $H = H(q, p, \lambda)$ , welche von einem externen Parameter  $\lambda$  abhängt. Die Bewegung des Systems wird dann in eine Zeitskala:

$$T \sim \frac{2\pi}{\omega_{min}}$$
 mit  $\omega_{min} = \max_{\alpha \le f} (\omega^{\alpha})$ 

beschrieben. Wir möchten nun Aussagen darüber treffen, wie sich das System entwickelt, wenn sich der Parameter  $\lambda = \lambda(t)$  in der Hamiltonfunktion langsam zeitlich ändert. Die Herleitungen sind recht "wage" und es werden einige Näherungen gemacht, aber man kann so zeigen, dass unter der Bedingung:

$$T\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t} \ll \lambda \tag{2.13}$$

die Wirkungsvariablen  $J_{\alpha}$  annähend konstant bleiben. Drückt man also die Hamiltonfunktion durch die Wirkungsvariablen aus kann man Aussagen über die Änderung der Kreisfrequenzen und der Gesamtenergie treffen.

# 2.7.4 Zeitabhängige Hamilton-Jacobi Gleichung

Betrachtet man ein nicht autonomes System mit explizit zeitabhängiger Hamiltonfunktion dann macht man den Ansatz:  $K(Q^1, ..., Q^f, P_1, ..., P^f, t) = 0$ . Nach (2.7) ist dann die **zeitabhängige Hamilton-Jacobi Gleichung** gegeben durch:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) = 0 \tag{2.14}$$

Die Bewegung in den ursprünglichen Koordinaten ergibt sich wieder aus den Gleichungen:

$$\frac{\partial S}{\partial P_{\alpha}}(q, P, t) = Q^{\alpha} = \text{const.}$$
 (2.15)

Ist H nicht zeitabhängig geht das zeitabhängige Problem durch "Separation der Zeit" direkt in die zeitunabhängige Gleichung über.

#### Zusammenhang zum Hamiltonschen Prinzip

Die Erzeugende S der zeitabhängigen Hamilton-Jacobi-Theorie hängt mit der Wirkung S[q(t)] aus dem Hamiltonschen Prinzip zusammen. Bildet man das totale Zeitdifferenzial von S, so erhält man:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}S = \sum_{\alpha=1}^{f} (p_{\alpha}\dot{q}^{\alpha} + Q^{\alpha}\dot{P}_{\alpha} + (K - H)) = L$$

Die Differenz der Erzeugendenfunktion ist also die Wirkung.

# Kapitel 3

# Spezielle Relativitätstheorie

Im ausgehenden 19. Jahrhundert traten in der Physik vermehrt Phänomene auf, die die Gültigkeit des Galileischen Relativitätsprinzips in Frage stellten. Hier sei insbesondere die Konstanz der Lichtgeschwindigkeit bei Nicht-Existenz eines Äthermediums (Michelson-Morley-Experiment) und die fehlende Invarianz der Maxwell-Gleichungen unter Galilei-Transformation genannt. Der Physiker Albert Einstein schlug daher zu Beginn des 20. Jahrhunderts eine Abwandlung des Relativitätsprinzips vor. Kurz danach veröffentlichte der Mathematiker Henri Poincare ähnliche Thesen.

Dieses Kapitel soll nur einen kurzen Überblick liefern, damit die kovariante Schreibweise in der Elektrodynamik nicht neu eingeführt werden muss und die wichtige Entwicklung der Physik im beginnenden 20. Jahrhundert nachvollzogen werden kann.

# 3.1 Das Einsteinsche Relativitätsprinzip

Die beiden oben genannten Befunde legen nahe, dass die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum in jedem Inertialsystem gleich ist. Dies führt auf:

#### Einsteinsches Relativitätsprinzip:

- Die Lichtgeschwindigkeit hat in jedem Inertialsystem denselben konstanten Wertc.
- Die Physikalischen Gesetz sind in jedem Inertialsystem gleich, d.h. forminvariant / kovariant unter der entsprechenden Transformation.

Offen bleibt die Frage: Welche Transformation vermittelt zwischen zwei Inertialsystemen? Die Galileitransformation ist ausgeschlossen, da sie auf die klassische Geschwindigkeitsaddition führt und somit  $c' = c + v \neq c$  ist.

# 3.2 Die Vierdimensionale Raumzeit

# 3.2.1 Vierer-Vektoren und Tensoren

Aus kurzen Überlegungen kann man ableiten, dass das erste Postulat des Einsteinschen Relativitätsprinzips die Existenz einer absoluten Zeit, wie bei Galilei und Newton, verbieten. Dann sonst kann eine Geschwindigkeit niemals konstant bleiben, wenn sich die Ortskoordinate ändert. Die Zeit ist also ebenfalls von der Transformation betroffen. Dies motiviert dazu Ort und Zeit zu einer **vierdimensionalen Raumzeit** zusammenzufassen. Die gesuchte Transformation muss das Wegelement:

$$s^2 = c^2 t^2 - \mathbf{x}^2$$

konstant lassen. Dies kann man sich plausibel machen, indem man sich einen Lichtstrahl vorstellt, der sich mit c fortbewegt, sodass  $\Delta s^2 = 0$  wobei  $s_1 = (t_1, \mathbf{x}_1)$  das Ereignis (Punkt in der vierdimensionalen Raumzeit) der Aussendung und  $s_2$  das Ereignis des Empfangs des Lichtes ist. Dies kann man als den Erhalt des Skalarproduktes zweier sog. Vierer-Vektoren definieren. Dabei gilt:

kontravarianter Viererortsvektor: 
$$x^{\mu} = (x^0 = ct, x^1, x^2, x^3)$$
  
kovarianter Viererortsvektor:  $x_{\mu} = (x_0 = ct, -x^1, -x^2, -x^3)$ 

Der Index  $\mu$  ist griechisch und läuft daher von 0 bis 3. Diese Vektoren liegen im Vektorraum  $\mathbb{R}^4$ . Die Konstanz von  $s^2$  von oben macht die Einführung des Skalarproduktes:

$$(A,B) := A^0 B^0 - A^1 B^1 - A^2 B^2 - A^3 B^3 = A_\mu B^\mu = A^\mu B_\mu$$

plausibel. Dieses wird auch durch den Metriktensor:

$$g := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

erzeugt<sup>1</sup>

$$(A,B) = A \cdot \eta B.$$

In dieser Notation sind A bzw. B "gewöhnliche" kontravariante Spaltenvektoren. Indexweise lautet die Gleichung also:

$$A^{\mu}B_{\mu} = g_{\nu\mu}A^{\mu}B^{\nu}$$

Der Metriktensor vermittelt also zwischen ko- und kontravarianten Vektoren:

$$A_{\mu} = \eta_{\mu\nu} A^{\nu} \,.$$

Es sei angemerkt, dass grundsätzlich offenbar  $g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu}$  gilt. Es macht aber für die Summation ggf. einen Unterschied. Man kann durch Betrachtung der Verkettung von 2 Transformationen zwischen Inertialsystemen zeigen, dass diese gesuchte Transformation, ab hier schon vorgreifend **Lorentztransformation** genannt, linear ist. D.h. man erhält die Transformierten Koordinaten gemäß:

$$x^{\prime \mu} = \Lambda^{\mu}_{\ \nu} x^{\nu} \,,$$

 $<sup>^{1}</sup>$ In der Teilchenphysik verwendet man meist die hier vorliegende Version von g. In der Kosmologie wird häufig stattdessen -g verwendet.

wobe<br/>i $\Lambda \in \mathbb{R}^{4 \times 4}.$  Das bedeutet für das Skalarprodukt:

$$x'_{\mu}x'^{\mu} = g_{\mu\nu}x'^{\mu}x'^{\nu} = g_{\mu\nu}\Lambda^{\mu}_{\ \rho}\Lambda^{\nu}_{\ \sigma}x^{\rho}x^{\sigma}$$

Dieses soll nun invariant unter Lorentztransformation sein. Das heißt:

$$g_{\rho\sigma} = g_{\mu\nu}\Lambda^{\mu}_{\ \rho}\Lambda^{\nu}_{\ \sigma} \qquad \Leftrightarrow \qquad g = \Lambda^T g\Lambda \,.$$

Man kann zeigen, dass ein Inverses Element existiert und es gilt:

$$(\Lambda^{-1})^{\mu}_{\ \nu} = g^{\mu\rho}\Lambda^{\sigma}_{\ \rho}g_{\sigma\nu} := \Lambda^{\ \mu}_{\nu}$$

Betrachtet man damit wieder das Skalarprodukt  $x_{\mu}x^{\mu}$  so erhält man:

$$x'_{\mu}x'^{\mu} = g_{\mu\nu}\Lambda^{\mu}_{\ \rho}\Lambda^{\nu}_{\ \sigma}x^{\rho}x^{\sigma} = g_{\mu\nu}\Lambda^{\mu}_{\ \rho}\Lambda^{\nu}_{\ \sigma}g^{\rho\alpha}x_{\alpha}x^{\sigma} = (\Lambda^{\ \alpha}_{\nu}x_{\alpha})x'^{\nu}$$

Dies zeigt also die Bedingung für die Transformation von kovarianten Vierer-Vektoren:

$$x'_{\mu} = \Lambda_{\mu}^{\ \nu} x_{\nu} \,.$$

#### Transformationseigenschaften

Insgesamt nennt man Größen, die wie die Koordinaten-Vierer-Vektoren transformieren allgemein **Vierer-Vektor** und es gilt:

$$\begin{array}{ll} \mbox{kontravarianter Vierer-Vektor:} & A'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\ \nu} A^{\nu} \\ \mbox{kovarianter Vierer-Vektor:} & A'_{\mu} = \Lambda^{\ \nu}_{\mu} A_{\mu} \,. \end{array}$$

Analog definiert man **Vierertensoren**, die entsprechend wie folgt transformieren (hier für Tensoren des Ranges 2):

Es gibt auch **gemischte** Tensoren:

$$T^{\prime \mu}_{\ \nu} = \Lambda^{\mu}_{\ \alpha} \Lambda^{\ \beta}_{\nu} T^{\alpha}_{\ \beta}$$
$$T^{\prime \nu}_{\ \mu} = \Lambda^{\ \alpha}_{\mu} \Lambda^{\nu}_{\ \beta} T^{\alpha}_{\alpha}.$$

Wichtig ist zudem, wegen:  $(A_{\mu}A^{\mu})' = A'_{\mu}A'^{\mu} = A_{\mu}A^{\mu}$ :

#### Differenzialoperatoren

Besonders wichtig sind die Transformationseigenschaften der Differenzialoperatoren. Wir betrachten die Anwendung des Differenzialoperators

$$\partial^{\mu} := \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} = \left(\frac{\partial}{\partial x^{0}}, -\nabla\right) \,.$$

Die Kettenregel zeigt, dass dieser Transformiert, wie ein kontravarianter Vektor und die Bezeichnung daher berechtigt ist:

$$\partial'^{\mu} = \frac{\partial}{\partial x'_{\mu}} = \frac{\partial x_{\rho}}{\partial x'_{\mu}} \frac{\partial}{\partial x_{\rho}} = \Lambda^{\mu}_{\ \rho} \frac{\partial}{\partial x_{\rho}} = \Lambda^{\mu}_{\ \rho} \partial^{\rho}$$

Dementsprechend bezeichnen wir auch den zugehörigen kovarianten "Differenzialvektor":

$$\partial_{\mu} := \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} = \left(\frac{\partial}{\partial x^{0}}, \nabla\right), \qquad \partial^{\mu} := \frac{\partial}{\partial x_{\mu}} = \left(\frac{\partial}{\partial x^{0}}, -\nabla\right)$$

Dementsprechend ist das Objekt  $\partial^{\mu}B_{\mu} = \partial_{\mu}B^{\mu}$  ein Skalar und das Objekt  $\partial^{\mu}s$  ein kontravarianter Vier-Vektor. Zusätzlich ist der **d'Alembert Operator**:

$$\Box := \partial^{\mu} \partial_{\mu} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta$$

die Verallgemeinerung des Laplace Operators und ein Lorentz-Skalar.

#### Ereignisse

Ein Ereignis ist ein Punkt in der Raumzeit  $x_1 = (ct, x^1, x^2, x^3)$ . Man unterscheidet 3 verschiedene Arten von Verbindungen zwischen zwei Ereignissen  $x_1$  und  $x_2$ :

• **zeitartig** (time-like)

$$\Delta s^{2} := (x_{1} - x_{2})^{2} = c\Delta t^{2} - \Delta \mathbf{x}^{2} > 0$$

Der räumliche Weg von  $x_1$  nach  $x_2$  ist klein genug, dass eine Information die sich mit *c* ausbreitet, diese in der Zeit  $\Delta t$  zurücklegen kann. Die Gesamtheit aller Punkte, die bezogen auf  $x_1$  zeitartig sind, nennt man **Zukunft** von  $x_1$ . Die Gesamtheit der Punkte, von denen aus  $x_1$  in der Zukunft liegt sind die **Vergangenheit** von  $x_1$ 

• raumartig (space-like)

$$\Delta s^2 = c\Delta t^2 - \Delta \mathbf{x}^2 < 0$$

Die räumliche Entfernung zwischen  $x_1$  und  $x_2$  ist so groß, dass die Information diese nicht in der Zeit  $\Delta t$  zurücklegen kann. Die Gesamtheit dieser Punkte sind das Anderswo von  $\mathbf{x}_1$ . • Lichtartig (light-like):

 $\Delta s^2 = 0$ 

Die Existenz von negativen  $\Delta s^2 = x_{\mu}x^{\mu}$  bedeutet, dass der  $\mathbb{R}^4$  mit dem hier verwendeten Skalarprodukt **kein metrischer Raum** ist. Wir bezeichnen ihn, um davon abzugrenzen, als **Minkovski Raum**.

# 3.2.2 Die Lorentztransformation

Die Matizen der Lorentztransformation bilden eine Matrixinvarianzgruppe bezüglich der Invarianzbedingung:

$$g = \Lambda^T g \Lambda$$
.

Die Gruppenaxiome sind relativ leicht zu überprüfen. Zudem gilt:

$$\det \Lambda = \pm 1 \,.$$

Man nennt die Gruppe auch O(3, 1). Die Untergruppe der Lorentztransformationen mit det  $\Lambda = +1$  wird auch mit SO(3, 1) bezeichnet. Man unterscheidet zudem zwischen verschiedenen Klassen von Lorentztransformationen mit und ohne Spiegelungen usw. Dies sei hier aber nur kurz erwähnt. Zudem bildet die Lorentzgruppe eine Lie-Gruppe mit der Lie-Algebra:

$$[J^{\mu\nu}, J^{\rho\sigma}] = \mathrm{i} \left( g^{\nu\rho} J^{\mu\sigma} - g^{\mu\rho} J^{\nu\sigma} - g^{\nu\sigma} J^{\mu\rho} + g^{\mu\sigma} J^{\nu\rho} \right)$$

Die Lorentzgruppe hat 6 freie Parameter, die wir als Lorentz-Boosts in die drei Raumrichtungen und drei Rotationswinkel. Die **Poincare Transformation** fügt dem 4 weitere Parameter hinzu, die eine konstante Verschiebung im  $\mathbb{R}^4$  darstellen, hinzu:

**Poincare-Transformation:** 
$$x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}_{\ \nu} x^{\nu} + a^{\mu}$$
.

Die Lorentztransformation zwischen zwei Inertialsystemen, die sich in einer ausgezeichneten Richtung mit der Geschwindigkeit v gegeneinander bewegen, heißt **spezielle Lorentztransformation** und ist durch:

$$\begin{pmatrix} ct' \\ x'^1 \\ x'^2 \\ x'^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\beta & 0 & 0 \\ -\gamma\beta & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix}$$

mit

$$\beta = \frac{v}{c}, \qquad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

gegeben. Die allgemeine Lorentztransformation ergibt sich durch eine Verknüpfung mit Rotationen. Die **Inverse** Transformation ist zwangsläufig durch die Ersetzung  $\beta \rightarrow -\beta$ gegeben. Für  $\beta \rightarrow 0$  erhalten wir mit  $\gamma \rightarrow 1$  die spezielle Galileitransformation.

# 3.3 Folgerungen der Lorentztransformation

Wir betrachten im Folgenden einige überraschende Effekte, die sich aus dem Einsteinschen Relativitätsprinzip ergeben. Man kann diese auch komplett ohne die Lorentztransformation herleiten! Wir werden hier aber der Kürze halber immer von zwei Koordinatensystemen ausgehen, die mit der Relativgeschwindigkeit v in einer ausgezeichneten Richtung zueinander bewegt sind und dann die Lorentztransformation anwenden.

# 3.3.1 Relativität des Abstandes

In dem Ursprünglichen Inertialsystem  $\mathcal{K}$  sei die Differenz zweier Ereignisse gegeben durch:  $\Delta S = (\Delta t, \Delta x)$ . Da die Lorentztransformation linear ist, können wir sie direkt auf diese Differenz anwenden, anstatt einzeln auf die Ereignisse.

# **Räumlicher** Abstand

Angenommen in  $\mathcal{K}$  geschehen die Ereignisse am selben Ort, dann ist  $\Delta x = 0$ . Das Anwenden der Lorentztransformation liefert in einem anderen System  $\mathcal{K}'$  aber einen entsprechend geänderten Wert:  $\Delta x' = -\gamma v \Delta t$ . Der räumliche Abstand ist also in den beiden Systemen unterschiedlich. Dieses Ergebnis erhalten wir allerdings auch bereits in der galileischen Betrachtung, daher ist es nicht weiter überraschend. Wichtiger ist der nächste Punkt.

# Gleichzeitigkeit

Nun geschehen in  $\mathcal{K}$  die beiden Ereignisse Gleichzeitig, sodass  $\Delta t = 0$  ist. Dann folgt ebenfalls in  $\mathcal{K}'$  ein veränderter Wert:  $\Delta t' = -\gamma \beta \Delta x$ . Die Gleichzeitigkeit zweier Ereignisse ist also vom Bezugssystem abhängig! Dies ist ein überraschendes Ergebnis, welches sich bei Galilei nicht ergibt.

Allgemein nennt man Größen die vom Bezugssystem abhängen **relative Größen** und vom Bezugssystem unabhängige **absolute Größen**.

# 3.3.2 Zeitdilatation

Sei ein Zeitintervall $\Delta T$  in  ${\cal K}$ gegeben. Dann verändert sich dieses bei Lorentztransformation zu  ${\cal K}'$  zu

$$\Delta T' = \gamma \Delta T \,.$$

Das Zeitintervall erscheint also von dem bewegten Bezugssystem aus langsamer zu verstreichen. Diesen Effekt nennt man auch Zeitdilatation. Diese wurde bereits mit hoher Präzision experimentell überprüft.

# Eigenzeit

Wir Betrachten nun das Zeitmaß, dass in einem Ruhesystem eines bewegten Körpers mit der Bahn v(t) von einer mitbewegten Uhr gemessen wird. Dieses bezeichnen wir als **Eigenzeit**  $\tau$ . Ein Zeitintervall  $\Delta \tau$  steht mit einem Zeitintervall in jedem anderen Bezugssystem  $\Delta t$  gemäß der Zeitdilatation in der Beziehung  $\Delta \tau = \Delta t / \gamma(v(t))$ . Wird betrachten den gesamten Vorgang nun infinitesimal und erhalten eine wichtige Gleichung für die Eigenzeit:

$$\Delta \tau = \int_{t_1}^{t_2} \sqrt{1 - \beta(t)^2} \, \mathrm{d}t \quad \Rightarrow \quad \mathrm{d}\tau = \frac{\mathrm{d}t}{\gamma} \, .$$

Diese Eigenzeit ist eine Eigenschaft der Bahn und somit **Lorentz-Invriant**. Sie ist einfach durch den Zeigerstand der mitbewegten Uhr definiert und kann somit auch nicht von Bezugssystem abhängen.

Allgemein nennt man Größen, die in einem mitbewegten Koordinatensystem definiert sind **Eigengrößen**.

# 3.3.3 Doppler-Effekt

Aufgrund der Zeitdilatation verändern sich in verschiedenen Bezugssystemen die Periodendauern von Schwingungen und dadurch auch die Frequenzen. Abhängig von dem Winkel, unter dem die Quelle zum Beobachter steht lautet die Frequenzverschiebung daher:

$$\omega = \omega_0 \frac{\sqrt{1 - \beta^2}}{1 + \beta \, \cos \theta} \,.$$

Dabei ist  $\theta$  der Winkel zwischen der Verbindungsvektor zwischen Quelle und Beobachter und der Relativgeschwindigkeit v.

### 3.3.4 Längenkontraktion

Analog zur Zeitdilatation betrachten wir ein Lineal mit der Länge  $\Delta L = x_1 - x_2$  in  $\mathcal{K}$ .  $\Delta L$  ist somit die Eigenlänge des Lineals. Es sei zudem in Richtung der Relativgeschwindigkeit ausgerichtet. Bei einer Längenmessung in  $\mathcal{K}'$  werden die Positionen der Endpunkte gleichzeitig gemessen, d.h.  $\Delta t' = 0$ . In  $\mathcal{K}'$  gilt für die Position der Endpunkte:

$$x'_1 = \gamma(x_1 - vt_1), \qquad x'_2 = \gamma(x_2 - vt_2)$$

Dies führt mit

$$\Delta t' = 0 \quad \Leftrightarrow \quad t_1 - t_2 = \frac{v}{c^2}(x_1 - x_2)$$

insgesamt auf:

$$\Delta L' = \frac{\Delta L}{\gamma} \,.$$

Das Lineal wirkt also von einem bewegten Bezugssystem aus kürzer.

# 3.3.5 Relativistische Geschwindigkeitsaddition

Es bewege sich ein Körper in  $\mathcal{K}$  mit der Geschwindigkeit

$$\mathcal{K}: \mathbf{u}(t) = \left(\frac{\mathrm{d}x^1}{\mathrm{d}t}, \frac{\mathrm{d}x^2}{\mathrm{d}t}, \frac{\mathrm{d}x^3}{\mathrm{d}t}\right)^T.$$

Wie transformieren sich diese beim Übergang in  $\mathcal{K}'$ ? Wichtig ist hier, dass die Relativgeschwindigkeit in  $x^1$  Richtung weist. Wir suchen also nach:

$$\mathcal{K}': \quad \mathbf{u}'(t') = \left(\frac{\mathrm{d}x'^1}{\mathrm{d}t'}, \frac{\mathrm{d}x'^2}{\mathrm{d}t'}, \frac{\mathrm{d}x'^3}{\mathrm{d}t'}\right)^T$$

Um diese zu finden, betrachtet man die Lorentztransformation für die infinitesimalen Elemente  $(dt, dx^1, dx^2, dx^3)$  und bestimmen die Komponenten von  $\mathbf{u}'(t)$  durch entsprechende Division. Dadurch erhalten wir:

$$u_1' = \frac{u_1 - v}{1 - v u_1/c^2}, \qquad u_2' = \frac{1}{\gamma} \frac{u_2}{1 - v u_1/c^2}, \qquad u_3' = \frac{1}{\gamma} \frac{u_3}{1 - v u_1/c^2}.$$

Man kann leicht berechnen, dass, falls  $|\mathbf{u}| = c$  gilt, auch  $|\mathbf{u}'| = c$  folgt, sodass sich der Körper auf keinen Fall schneller bewegen kann als die Lichtgeschwindigkeit. Dies ist wichtig für die Konsistenz der Theorie.

# **3.4** Relativistische Mechanik

### 3.4.1 Hamiltonsches Prinzip und Lagrangefunktion

Wir leiten die Lagrange Funktion aus dem Hamiltonschen Prinzip der minimalen Wirkung ab. Diese ist ein Skalar und darf somit nicht vom Bezugssystem abhängen. Die Einzige Möglichkeit die Wirkung für ein **freies Teilchen** somit passend festzulegen ist:

$$S = -\alpha \int_a^b \mathrm{d}s \,,$$

wobei  $\alpha$  ein noch zu bestimmender Parameter ist. Die Wirkung ist also das Kurvenintegral über einen 4-dimensionalen Weg in der Raumzeit. Im Ruhesystem des Teilchens gilt:  $ds = c d\tau$ . Damit kann man umschreiben:

$$\int_{a}^{b} \mathrm{d}s = \int_{\tau_{a}}^{\tau_{b}} c \,\mathrm{d}\tau = \int_{t_{a}}^{t_{b}} \sqrt{1 - \beta(t)^{2}} \,\mathrm{d}t \tag{3.1}$$

wobei t ein Zeitmaß in einem mit v(t) gegenüber dem Teilchen bewegten System, bzw. das Zeitmaß eines Systems, in dem sich das Teilchen mit v(t) bewegt ist. Die Lagrange Funktion lautet also  $L = -\alpha c \sqrt{1 - \beta(t)^2}$ . Da im nichtrelativistischen Grenzfall  $L_{v < < c} = mv^2/2$  gilt, kann man  $\alpha$  bestimmen. Dadurch gilt:

$$S = -mc \int_a^b \mathrm{d}s \,, \qquad L = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \,.$$

# 3.4.2 Energie und Impuls

Aus der Lagrangefunktion erhält man in Verallgemeinerung der klassischen Prinzipien den Impuls:

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1-\beta^2}} \,.$$

Die Energie ist hierbei letztlich durch die Legendre-Transformation zur Hamiltonfunktion gegeben:

$$E = \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - L,$$

woraus folgt:

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\beta^2}} = m\gamma c^2 \,.$$

Insbesondere folgt hier für die Gesamtenergie, wenn man sie durch den Impuls ausdrückt:

$$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4 \,.$$

Dies ist die wichtige Energie-Impuls-Beziehung der relativistischen Mechanik. Man nennt die Energie  $E = mc^2$  für ein Teilchen, welches in Ruhe ist ( $\mathbf{p} = 0$ ) auch die **Ruhenergei**. In der sog. ultrahochrelativistischen Näherung (exakt für masselose Teilchen) gilt:

masselos: 
$$E = pc$$
.

Das Hamiltonsche Prinzip führt mit  $ds = \sqrt{dx_{\mu} dx^{\mu}} = \sqrt{u_{\mu} u^{\mu}} d\tau$  auf die Gleichung:

$$\frac{\partial u_{\mu}}{\partial \tau} = 0 \,.$$

Ein freies Teilchen bewegt sich also mit konstanter Vierer-Geschwindigkeit. Dieses Ergebnis macht die Einführung des Vierer-Impulses plausibel:

$$p^{\mu} = m u^{\mu} = (m \gamma c, m \gamma v^i) = \left(\frac{E}{c}, p^i\right).$$

wobei  $v^i$  und  $p^i$  die "gewöhnlichen" 3-dimensionalen Impuls- und Geschwindigkeitskomponenten sind. Das Skalar  $P^{\mu}P_{\mu} = m^2c^2$  liefert damit ebenfalls die obige Energie-Impuls-Beziehung. Dieser Vierer Impuls ist für ein freies Teilchen **zeitlich erhalten** und sein Betrag ist **lorentz invariant**. Es ist wichtig diese beiden Eigenschaften nicht durcheinander zu bringen.

# 3.4.3 Vierer-Geschwindigkeit und Vierer-Impuls

#### Geschwindigkeit

Um einen kontravarianten Vierer-Vektor zu finden, des als Analogon zur Geschwindigkeit fungieren kann, müssen wir uns die Frage stellen nach welcher Größe letztlich abzuleiten ist. Damit diese Vierer-Geschwindigkeit kontravariant sein kann, muss nach einer Lorentzinvariante abgeleitet werden. Es bleibt nur die Eigenzeit  $\tau$ :

$$u^{\mu} = \frac{\mathrm{d}x^{\mu}}{\mathrm{d}\tau} \,.$$

Nach der Kettenregel erhalten wir somit:

$$u^{\mu} = \frac{\mathrm{d}x^{\mu}}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\tau} = \gamma \cdot (c, \mathbf{v}) \,.$$

Die Norm dieser Vierer-Geschwindigkeit hat eine einfache Bedeutung:  $u_{\mu}u^{\mu} = c^2$ . Im nichtrelativistischen Grenzfall erhalten wir die gewöhnliche Geschwindigkeit.

# 3.4.4 Bewegungsgleichung

In der klassischen Mechanik erhält man die Bewegungsgleichung aus der Änderung des Impulses bei gegebener Kraft. Dies wird nun einfach verallgemeinert, sodass wir das 4dimensionale Analogon zur newtonschen Bewegungsgleichung erhalten:

$$W^{\mu} = \frac{\partial p^{\mu}}{\partial \tau} = m \frac{\mathrm{d}u^{\mu}}{\mathrm{d}\tau} \,. \tag{3.2}$$

Jetzt muss noch gezeigt werden, wie diese sog. **Minkovski-Kraft** aus den Komponenten der Dreidimensionalen Kraft hervorgeht. Dazu betrachten wir die drei Ortskomponenten der Bewegungsgleichung:

$$W^{i} = \frac{\partial P^{i}}{\partial \tau} = \gamma \frac{\mathrm{d}(m\gamma v^{i})}{\mathrm{d}t} = \gamma F^{i}$$

Für die Zeit-Komponente betrachten wir  $d(u_{\mu}u^{\mu})/d\tau = dc^2/d\tau = 0$ . Daraus folgt:

$$u^0 \frac{\mathrm{d}u^0}{\mathrm{d}\tau} = u^i \frac{\mathrm{d}u^i}{\mathrm{d}\tau}$$

Somit ist  $du^0/d\tau = (u^i/u^0)(du^i/d\tau)$ , woraus folgt:

$$\gamma c \frac{W^0}{m} = \gamma v^i \frac{\gamma F^i}{m} \,.$$

Damit haben wir den Zusammenhang zwischen  $F^i$  und  $W^{\mu}$  endgültig gefunden und es ist:

$$W^{\mu} = \gamma \cdot \left(\frac{F^{i}v^{i}}{c}, F^{i}\right)$$
.

Hiermit und mit der Bewegungsgleichung folgen aus der 4-dimensionalen Theorie direkt der Energie und der Impulssatz:

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} = F^i v^i \,, \qquad \frac{\mathrm{d}p^i}{\mathrm{d}t} = F^i \,. \tag{3.3}$$

Insgesamt haben wir also eine Lorentz-kovariante, also dem Relativitätsprinzip genügende Bewegungsgleichung gefunden.

#### Dreidimensionale Bewegungsgleichung

Die letzte Frage zu diesem Thema ist, wie nun die dreidimensionale Bewegungsgleichung bei relativistischen Geschwindigkeiten aussieht. Diese kann man relativ leicht aus den gefundenen Energie- und Impulssätzen (3.3), sowie aus der Bewegungsgleichung (3.2) herleiten:

$$F^{i} = \frac{1}{\gamma} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau} (m\gamma v^{i}) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} (m\gamma v^{i} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} (Ev^{i}/c^{2}) = \frac{v^{i}}{c^{2}} \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} + \frac{E}{c^{2}} \frac{\mathrm{d}v^{i}}{\mathrm{d}t}$$

Insgesamt erhält man also durch neues Anordnen der Terme:

$$m\frac{\mathrm{d}v^i}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\gamma} \left[ F^i - \frac{v^i}{c^2} (\mathbf{F}\cdot\mathbf{v}) \right] \,.$$

# 3.4.5 Äquivalente Lagrangefunktion und Satz von Noether

Wegen (3.1) erhalten wir eine äquivalente Form der Lagrange Funktion, mit der sich Erhaltungssätze leichter untersuchen lassen:

$$L = -mc\sqrt{u^{\mu}u_{\mu}} \,.$$

Wir betrachten die als kontinuierliche Symmetrietransformation den Translationsanteil der Poincare-Transformation also:

$$x^{\prime \alpha} = x^{\alpha} + \lambda \delta^{\alpha}_{\beta}, \qquad v^{\alpha} = \delta^{\alpha}_{\beta}.$$

Unter dieser Transformation ist die Lagrange-Funktion komplett invariant, sodass gilt:  $F_{\lambda} = 0$ . Damit ist:

$$\frac{\partial L}{\partial u^{\alpha}}v^{\alpha} = -mu_{\beta} = \text{const.}$$

Die Translationsinvarianz liefert also die Erhaltung des Vierer-Impulses.

# 3.4.6 Kinetische und Potenzielle Energie

Die relativistische k**inetische Energie** ergibt sich, wenn man von der Gesamtenergie die Ruheenergie subtrahiert:

$$T = mc^2(\gamma - 1) \,.$$

Dies ergibt den korrekten nichtrelativistischen Grenzwert. Dies kann auch über die Arbeit, die eine Kraft verrichtet ( $dT = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{x} = F^i v^i dt = ...$ ) "hergeleitet" werden. Die Bedeutung der kinetischen Energie für die Bewegung des Teilchens bleibt also die selbe.

Die relativistische **potenzielle Energie** betrachten wir, indem wir ein Teilchen in einem externen, konservativen Kraftfeld betrachten, d.h.  $-dU = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{x} \iff -dU = F^i v^i dt$ . Damit folgt sofort:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(mc^2\gamma + U) = 0\,.$$

Da m und c konstanten sind ist auch T + U = const..

Für den **Vierer-Impuls** müssen wir nun die 0-Komponente umschreiben, da  $m\gamma c^2 = E - U$  ist. Das bedeutet:

$$p^{\mu} = (m\gamma c, m\gamma v^i) = \left(\frac{1}{c}(E-U), p^i\right).$$

Die Hamiltonfunktion ergibt sich zu:

$$H = c\sqrt{p^2 + m^2c^2} + U \,. \label{eq:H}$$

## 3.4.7 Transformation von Verteilungsfunktionen

Wir betrachten eine Verteilungsfunktion  $f(\mathbf{p})$ , hier z.B. für den Impuls, sodass

$$f(\mathbf{p}) \,\mathrm{d}p^1 \,\mathrm{d}p^2 \,\mathrm{d}p^3$$

die Wahrscheinlichkeit angibt, den Impuls in dem Quader  $dp^1 \times dp^2 \times dp^3 := d^3x$  zu finden. Man kann dies als eine Wahrscheinlichkeitsdichte des Impulses für ein Teilchen verstehen oder auch an die Anzahl einer Vielzahl von Teilchen, deren Impuls dieser Verteilung folgt.

#### Transformation des Vierdimensionalen Elementes

Für das vierdimensionale Volumen-Element gilt:

$$\mathrm{d}^4 p = \mathrm{d} P^0 \, \mathrm{d}^3 p$$

Das Element d<sup>4</sup>p transformiert mit der Lorentz-Transformation, für die gilt det  $\Lambda = \pm 1$ . Das heißt:

$$\int \mathrm{d}^4 p' = \int d^4 p$$

Diese Eigenschaft ist extrem wichtig.

#### Rückschluss auf das dreidimensionale Element

Mittels der  $\delta$ -Distribution kann man zeigen, dass:

$$\int \mathrm{d}^4 p \,\delta(p^\mu p_\mu - m^2 c^2) \Theta(p^0) = c \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{2E} \,.$$

Das bedeutet  $d^3p/2E$  ist ebenfalls Lorentzinvariant, also folgt:

$$\frac{\mathrm{d}^3 p}{E} = \frac{\mathrm{d}^3 p'}{E'} \,.$$

Da die Anzahl der Teilchen in einem Impulselement (bzw. die Wahrscheinlichkeit den Impuls in einem bestimmten Impulselement zu messen) erhalten sein muss, da sonst verschiedene Beobachter unterschiedliche Ergebnisse erhalten würden, kann man zeigen:

$$f(\mathbf{p})E = f'(\mathbf{p}')E'\,.$$

Insbesondere gilt in Kugelkoordinaten  $d^3p = p^2 dp d\Omega$  und man kann zeigen:

$$p \,\mathrm{d} E \,\mathrm{d} \Omega = p' \,\mathrm{d} E' \,\mathrm{d} \Omega' \,.$$

#### Verteilungsfunktion im Phasenraum

Nimmt man ein Volumenelement im Ortsraum  $d^3x := dV$  hinzu so ist:

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \,\mathrm{d}^3 p \,\mathrm{d} V$$

die Anzahl an Teilchen in einem Impulselement  $d^3p$  und einem Volumen dV, bzw. die Wahrscheinlichkeit für ein Teilchen sich in diesem Element zu befinden. Ausgehend vom Ruhesystem des Teilchens kann man mittels der Lorentz-Kontraktion zeigen:

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}V'} = \frac{E'}{E}$$

Mit unseren Ergebnissen von oben folgt:

$$\mathrm{d}V\,\mathrm{d}^3p = \mathrm{d}V'\,\mathrm{d}^3p'\,,\qquad f'(\mathbf{x}',\mathbf{p}') = f(\mathbf{x},\mathbf{p})\,.$$

# 3.4.8 Zerfall von Teilchen

Um in diesem Kapitel übersichtlicher Rechnen zu können verwenden wir natürliche Einheiten  $c = \hbar = 1$ .

#### Zerfall

Zunächst betrachten wir ein Teilchen der Masse M und Energie E, in Ruhe, welches in zwei Teilchen der Massen und Energien  $m_i, E_i$  zerfallen. Das heißt, es gilt:

$$E = M, \qquad M = E_1 + E_2$$

wobei  $E_i = \sqrt{p_i^2 + m_i^2} > m_i$ , da sich die entstehenden Teilchen bewegen. Damit der Zerfall also überhaupt stattfinden kann, muss gelten:

$$M > m_1 + m_2$$

Die Dreier-Impulse der Reaktion müssen ebenfalls erhalten sein. Insgesamt gilt:

$$p^{\mu} = p_1^{\mu} + p_2^{\mu}$$
.

Daraus lassen sich der Energien und Impulse der Teilchen bestimmen:

$$E_i = \frac{M^2 + m_i^2 - m_j^2}{2M}, \qquad |\mathbf{p}_i| = \frac{\left((M^2 - (m_1 + m_2)^2)(M^2 - (m_i - m_j)^2)^{1/2}\right)}{2M}, \quad i \neq j.$$

#### Fusion

Nun betrachten wir den Inversen Prozess, also zwei Teilchen, die zu einem großen Teilchen fusionieren. Dabei gehen wir in das Ruhesystem eines der Teilchens (hier  $m_2, E_2$ ), sodass  $E_2 = m_2$ ) gilt. Wir interessieren uns für die Ruhemasse des entstehenden Teilchens. Nun können wir alles in diesem System berechnen und dann transformieren. Stattdessen betrachten wir aber die Viererimpulse:

$$p^{\mu} = p_1^{\mu} + p_2^{\mu} = (E_1 + m_2, p_1)$$
  

$$\Rightarrow \quad p^{\mu} p_{\mu} = E_1^2 + 2m_2 E_1 - p_1^2 = m_1^2 + m_2^2 + 2m_2 E_1 = M^2$$

Es ist also viel einfacher Lorentzskalare zu verwenden anstatt alles zu Lorentz-Transformation, um die Ergebnisse zu erhalten.

# 3.4.9 Der Vierer-Drehimpuls

Der Drehimpuls ist die der Rotation zugeordnete Größe, analog wie der Impuls der Translation zugeordnet werden kann. Diese infinitesimale Rotation wird durch

$$\delta x^{\mu} = x_{\nu} \delta \omega^{\mu\nu}$$
, mit  $\omega_{\mu\nu} = -\omega_{\nu\mu}$ .

Aus der Hamilton-Jacobi-Theorie können wir der Wirkung  $S[x_a^{\mu}, x_b^{\mu}] = \int_a^b dt L = S_b - S_a$  zuordnen:

$$\frac{\partial S}{\partial x^i} = p^i , \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -H .$$

Dies lässt sich kovariant schreiben:

$$\partial_{\mu}S = -P_{\mu}\,.$$

Das bedeutet, dass eine Variation von S mit der Variation von  $x^{\mu}$  verknüpft ist:

$$\delta S = \frac{\partial S}{\partial x^{\mu}} \delta x^{\mu} = -P_{\mu} \delta x^{\mu} \,.$$

Variiert man nacheinander die Endpunkte so erhält man:

$$\delta S = -\sum P^{\mu} \delta x_{\mu} \Big|_{a}^{b} \,,$$

wobei die Summe über alle Teilchen läuft. Nun ist der Raum isotrop, das heißt die Wirkung muss invariant unter räumlicher Rotation sein. Dementsprechend erhalten wir die Erhaltungsgröße:

$$M^{\mu\nu} = \sum (x^{\mu}P^{\nu} - x^{\nu}P^{\mu}) \,.$$

Wir finden offenbar die Komponenten des gewohnten räumlichen Drehimpulses wieder, wobei:

$$M^{23} = L^1 \,, \quad M^{13} = -L^2 \,, \quad M^{12} = L^3 \,.$$

# Kapitel 4

# Elektromagnetismus

# Zur Notation in diesem Kapitel

Es tritt im Zusammenhang mit dem Gradient häufig die Notation auf:

$$\mathbf{p}\cdot 
abla \mathbf{E} := (\mathbf{p}\cdot 
abla) \mathbf{E} := p_i \partial_i \mathbf{E}$$
 .

Es gilt daher für  $\mathbf{p} = \text{const.}$  und rot  $\mathbf{E} = 0$ :

$$(\mathbf{p} \cdot \nabla)\mathbf{E} = \nabla(\mathbf{p} \cdot \mathbf{E})$$

# 4.1 Grundlagen

# 4.1.1 cgs-System

Im Elektrodynamik-Teil dieser Zusammenfassung wird das Gaußsche Maßsystem (auch cgs-System, cm, Gramm, Sekunde) verwendet. Dadurch bekommen elektrisches und magnetisches Feld die gleiche Einheit, was einige Rechnungen erleichtert. Diese Vorgehensweise ist der Vorlesung geschuldet aber ich fürchte, dass mir beim Versuch dies einheitlich umzuschreiben viele Fehler unterlaufen würden. Im cgs-System wird die Ladung substituiert:

$$q_{SI} = \sqrt{4\pi\varepsilon_0} \, q_G \,,$$

sodass das Coulomb-Gesetz lautet:

$$F = \frac{q_G^1 g_G^2}{r^2} \,.$$

Daraus resultieren generische Einheiten Kraft, Ladung und Feldstärken:

- Kraft:  $[F] = 1 \, \text{dyn} := 1 \, \text{g cm/s}^2$
- Ladung: [Q] = 1 ESE (Elektrostatische Standardeinheit, Definition siehe Kapitel 4.2.2)
- elektrisches / magnetisches Feld: [E] = [B] = 1 ESE/cm.

Zusätzlich müssen auch die Transformationen übertragen werden:

E-Feld:	$E_{SI} = E_G / \sqrt{4\pi\varepsilon_0}$
B-Feld:	$B_{SI} = B_G / \sqrt{4\pi/\mu_0}$
Ladungsdichte:	$\varrho_{SI} = \sqrt{4\pi\varepsilon_0} \cdot \varrho_G$

Dadurch bekommen auch die Maxwell-Gleichungen und die Lorentzkraft andere Vorfaktoren.

# 4.1.2 Greensche Funktionen

In der Elektrodynamik hat man es häufig mit linearen partiellen Differenzialgleichungen zu tun. Eine Möglichkeit diese zu lösen wird direkt hier besprochen, um dann im Folgenden sofort angewendet werden zu können. Gegeben sei eine Differenzialgleichung der Form:

$$\mathcal{D}y(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$$

wobei  $\mathcal{D}$  ein linearer Differenzialoperator ist. Dann kann man durch die Bestimmung der Green Funktion  $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  von  $\mathcal{D}$  aus der Differenzialgleichung

$$\mathcal{D}G(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$$

eine Integraldarstellung y angeben. Dazu bedient man sich der sog. Faltung:

$$(g * h)(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int g(\mathbf{x} - \mathbf{x}')h(\mathbf{x}') \,\mathrm{d}\mathbf{x}' \,.$$

Durch einsetzten der Bedingung für  $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  zeigt man, dass eine Lösung für  $y(\mathbf{x})$  lautet:

$$y(\mathbf{x}) = (2\pi)^{n/2} (G * f)(\mathbf{x}) \,.$$

#### Green'sche Funktionen und die Poisson Gleichung

Die in der Elektrodynamik wichtige Poisson-Gleichung ist eine solche partielle Differenzialgleichung:

$$\Delta \phi = -4\pi \varrho(\mathbf{r})$$

Dabei ist  $\phi$  das Potenzial des elektrischen Feldes und  $\rho$  die Ladungsdichteverteilung. An  $\phi$  werden häufig zusätzliche sog. Randbedingungen gestellt. Man unterscheidet hierbei **drei klassische Randwertprobleme:** 

1) Totalraum-Lösung: Man betrachtet ein (unendlich) großes Volumen und fordert:

$$\lim_{r \to \infty} \phi \to 0$$

- 2) **Dirichlet RWP:** Das Potenzial auf der Oberfläche eines Volumens V sei vorgegeben.
- 3) **Neumann RWP:** Die Richtungsableitungen des Potenzials in Richtung des Oberflächenvektors eines Volumens seien gegeben.

#### Green'sche Funktion der Poisson Gleichung

Zur Bestimmung der Greenschen Funktion zur Poissongleichung betrachten wir zunächst die radial symmetrische Gleichung

$$\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left(rG(r)\right) = \delta(r) \,.$$

Durch elementare Integration erhält man für alle Punkte, bis auf den Ursprung die Lösung G(r) = A/r + B. Wir betrachten das erste RWP, sodass  $G(r \to \infty) = 0$  und somit B = 0 gilt. Wir wenden nun den Gaus'schen Integralsatz an und erhalten:

$$1 = \int d^3 r \,\Delta G = \int dV \,\nabla \cdot (\nabla G) = \int_{\partial V} d\mathbf{S} \cdot \nabla G = 4\pi R^2 \left(-\frac{A}{R^2}\right) = -4\pi A$$

Damit ist die vollständige Lösung gefunden. Es könnten noch beliebige harmonische  $(\Delta \psi = 0)$  Funktionen hinzuaddiert werden. Da die Bestimmungsgleichung im Ursprung nicht definiert ist, kann man auch nicht erwarten, dass G im Ursprung definiert oder stetig fortsetzbar ist. Man kann das Ergebnis leicht verallgemeinern:

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

wie man durch Substitution  $\mathbf{u} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$  und umrechnen der partiellen Ableitungen zeigen kann.

Ersetzt man im ersten Green'schen Integralsatz die beliebigen Funktionen  $\psi$  und  $\phi$  durch G und  $\phi$ , wie in:

$$\Delta \phi = 4\pi \rho(\mathbf{r}), \qquad \Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

und integriert über  $\mathbf{r}'$  so folgt:

$$\phi(\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}S' \left(\phi' \partial_{n'} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \partial_{n'} \phi'\right) - \int \mathrm{d}^3 r' \, 4\pi \varrho'(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

Dabei bedeutet eine gestrichene Größe  $f' = f(\mathbf{r}')$ . Je nach Randbedingungen kann man dann Gleichungen für das Feld oder das Potenzial integrieren:

1) **Totalraum:** Für diesen Fall haben wir die Green'sche Funktion bereits bestimmt. Die Green Funktion und das Potenzial müssen mit mindestens einer 1/r Abhängigkeit fallen, sodass das Oberflächenintegral über Terme der Ordnung  $\mathcal{O}(r^{-3})$  verschwindet (Funktionaldeterminante). Daraus ergibt sich dann

$$\phi(\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}^3 r' \, rac{\varrho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \, .$$

2) **Dirichlet:** Damit man aus der obigen Integraldarstellung eine explizite Lösung für  $\phi$  angeben kann fordert man hier  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0$  auf  $\partial V$ , sodass folgt:

$$\phi(\mathbf{r}) = -\int \mathrm{d}^3 r' \, 4\pi \varrho(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \int_{\partial V} \mathrm{d}S' f(\mathbf{r}') \partial_{n'} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \,. \tag{4.1}$$

Dabei ist  $f(\mathbf{r}') = \phi(\mathbf{r}')$  das auf dem Rand des relevanten Volumens vorgegebene Potenzial.

3) **Neumann:** Für ein Neumann-RWP wählt man zusätzlich  $\partial_n G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \text{const.}$  auf  $\partial V$ , sodass dieser Teil bei der Integration irrelevant wird, da er nur von  $\mathbf{r}'$  und nicht von  $\mathbf{r}$  abhängt. Dadurch gilt:

$$\phi(\mathbf{r}) = -\int_{\partial V} \mathrm{d}S' \, G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \partial_{n'} g(\mathbf{r}') - \int \mathrm{d}^3 r' \, 4\pi \varrho'(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \mathrm{const.} \, . \tag{4.2}$$

Dabei ist  $g(\mathbf{r}')$  die auf  $\partial V$  vorgegebene Richtungsableitung von  $\phi$ .

#### Eindeutigkeitssatz

Betrachtet man zwei mögliche Lösungen eines der drei obigen Randwertprobleme und wendet den zweiten Greenschen Satz auf deren Differenzfunktion an (für die dann offenbar gilt  $\Delta \Psi = 0$ ), so erhält man, dass die Lösungen im Dirichlet RWP, sowie in der Forderung  $\lim_{r \to \infty} \phi \to 0$ , eindeutig und im Von Neumann RWP bis auf eine Konstante eindeutig bestimmt sind.

## 4.1.3 Helmholtzscher Hauptsatz der Vektoranalysis

Seien für ein Vektorfeld v<br/> Quellen s und Wirbel $\omega$  von der Form:

$$s = \nabla \cdot \mathbf{v} \qquad \omega = \nabla \times \mathbf{v}$$

Wenn gilt  $\omega \to 0$  und  $s \to 0$  für  $r \to \infty$ , sowie  $\mathbf{v} = \mathcal{O}(r^{-2})$ , dann kann man das Vektorfeld in einen rotationsfreien Anteil  $\mathbf{v}_s$  und einen quellfreien Anteil  $\mathbf{v}_w$  zerlegen, sodass gilt:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_s + \mathbf{v}_w$$
 .

Man erhält die Komponenten über die Integrale:

$$\mathbf{v}_s = \frac{1}{4\pi} \int \mathrm{d}^3 r' \, \frac{s(\mathbf{r}')(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \,, \quad \mathbf{v}_w = \frac{1}{4\pi} \int \mathrm{d}^3 r' \, \frac{\omega(\mathbf{r}') \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \tag{4.3}$$

Zugehörige (Vektor) Potenziale für die gilt:  $\nabla \phi = -\mathbf{v}_s$  und rot  $\mathbf{A} = \mathbf{v}_w$  lauten dann:

$$\phi = \frac{1}{4\pi} \int \mathrm{d}^3 r' \, \frac{s(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \,, \quad \mathbf{A} = \frac{1}{4\pi} \int \mathrm{d}^3 r' \, \frac{\omega(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \tag{4.4}$$

# 4.1.4 Vollständige orthonormierte Funktionensysteme

Ein Funktionensystem  $\{\phi_n\}_{n\in\mathbb{N}}$  ist vollständig orthonormiert (VONS), wenn gilt:

• Ein Funktionensystem heißt vollständig, wenn:

$$\delta(z-z') = \frac{1}{2\pi} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \phi_n^*(z') \phi_n(z)$$

Dann lässt sich jede stetige Funktion durch eine Potenzreihe

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n \phi_n(x)$$

darstellen.

• Die Funktionen sind **orthonormiert**:

$$(\phi_n, \phi_m) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \phi_n^*(z) \phi_m(z) dz = \delta_{mn}.$$

Die Entwicklungskoeffizienten lassen sich dann entsprechend aus der Orthonormiertheit bestimmen. Ein Beispiel eines solchen VONS sind die komplexen Exponentialfunktionen  $\exp(inx)$  mit  $n \in \mathbb{Z}$ , wie sie bei der Fourierentwicklung verwendet werden.

#### Legendre Polynome

Die Legendrepolynome ergeben sich als Lösung der Differenzialgleichung

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\left(1-x^2\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}P(x)\right) + l(l+1)P(x) = 0$$

Diese Gleichung hat Singularitäten bei  $x = \pm 1$ . Die Lösung für  $l \in \mathbb{R}$  ergibt sich durch:

$$P_l = \frac{1}{2^l \, l!} \frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l} (x^2 - 1)^l \,.$$

Die zugeordneten Legendre Polynome ergeben sich aus der Differenzialgleichung:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \left( \left( 1 - x^2 \right) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} P(x) \right) + \left( l(l+1) - \frac{m}{1 - x^2} \right) P(x) = 0 \quad m \in (0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm l) \,.$$

Die Lösungen werden dann mit  $P_l^m$  bezeichnet:

$$P_l^m = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m} P_l(x)$$

Mithilfe der zugeordneten Legendrepolynome definiert man auch die **Kugelflächenfunk**tion:

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos(\theta)) e^{im\varphi}$$

Alle diese Funktionensysteme sind orthonormal und vollständig, was man bei der Separation der Laplace Gleichung benötigt.

# 4.2 Elektrostatik

In diesem Kapitel behandeln wir statische elektrische Felder. Das heißt, dass weder das Feld selbst, noch die Ladungsverteilung sich zeitlich ändern. Dementsprechend existiert kein Magnetfeld. Das elektrische Feld **E** erfüllt die Gleichungen:

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0, \qquad \nabla \cdot \mathbf{E} = -\Delta \phi = 4\pi \varrho(\mathbf{r}).$$
 (4.5)

Das Feld ist somit im mathematischen Sinne konservativ und es existiert stets ein Potenzial  $\phi$ , für das gilt:  $\mathbf{E} = -\nabla \phi$ . In der Mathematik werden solche Potenziale positiv definiert. In der Physik tut man dies nicht um später das Konzept der Energie direkt übertragen zu können.

# 4.2.1 Integraldarstellung der Felder

Mit den bereits dargestellten Methoden kann man diese Gleichungen in Integrale (4.3 und 4.4) umwandeln, wenn man voraussetzt, dass sowohl Ladungsverteilung und Potenzial mindestens eine 1/r-Abhängigkeit besitzen. Die Quelldichte der obigen Gleichungen ist daher nicht zufällig so definiert, dass der Normierungsfaktor  $1/4\pi$  verschwindet:

$$s(\mathbf{r}) = 4\pi \varrho(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad \phi = \int d^3 r' \, \frac{\varrho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{E} = \int d^3 r' \, \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\varrho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}$$

Häufig liegen auch Flächen- und Linienladungsverteilungen vor. Hier wird entsprechend nur entlang der relevanten Struktur integriert, da  $\rho$  sonst überall verschwindet:

Linienladungsdichte: 
$$\lambda$$
  $\mathbf{E} = \int dl' \frac{\lambda(\mathbf{r}')(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}$   
Flächenladungsdichte:  $\sigma$   $\mathbf{E} = \int dA' \frac{\sigma(\mathbf{r}')(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}$ 

#### Gaus'scher Satz

Wendet man den Gaus'schen Integralsatz auf die Poisson Gleichung an, so erhält man den Gaus'schen Satz der Elektrostatik:

$$\int \mathrm{d}V \,\nabla \cdot \mathbf{E} = \int_{\partial V} \mathrm{d}\mathbf{S} \cdot \mathbf{E} = 4\pi Q \,, \qquad Q = \int \mathrm{d}V \,\varrho(\mathbf{r}) \,.$$

Man nennt die linke Seite auch den elektrischen Fluss.

#### Feld einer Punktladung

Eine Punktladung beschreiben wir durch  $\rho(\mathbf{r}) = -q_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$ , sodass das Integral über den ganzen Raum die Ladung q ergibt. Mittels der Poisson Gleichung erhält man dann entsprechend die Lösung:

$$\phi_j(\mathbf{r}) = \frac{q_j}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|}, \quad \Rightarrow \quad \mathbf{E}_j(\mathbf{r}) = q_j \, \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^3}$$

Dies ist das **Coulomb'sche Gesetz**. Man kann auch dieses als die grundlegende Gesetzmäßigkeit voraussetzten und aus ihm die Feldgleichungen der Elektrostatik, d.h. (4.5) herleiten, indem man zunächst über eine Menge von Punktladungen summiert und dies dann als kontinuierliche Ladungsdichte umschreibt. Daraus ergeben sich direkt die Integraldarstellungen der Felder, die zu den entsprechenden Gleichungen gehören.

## 4.2.2 Kräfte

Für die Kraft, die eine Punktladung in einem elektrischen Feld erfährt, gilt wie für Felder üblich, "Kraft = Referenzgröße  $\cdot$  Feldstärke", also hier:

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E}$$
.

Elektromagnetische Kräfte superponieren wie gewohnt, da die Feldgleichungen (4.5) und auch alle weiteren Gleichungen die eingeführt werden linear sind. Das heißt z.B. in einem System aus Punktladungen erfährt eine einzelne Ladung die Kraft:

$$F_i = q_i \sum_{j \neq i} q_j \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3}.$$

Hierüber definiert man auch die elektrostatische Standardeinheit ESE und zwar als die Punktladung, die nötig ist um aufeinander eine Kraft von 1 dyn auszuüben. Es gilt:  $1 e = 4.803 \cdot 10^{-10}$  ESE. Man erkennt, dass hier, analog zur Gravitationskraft der Mechanik, Impuls und Drehimpuls erhalten sind.

#### Kraft auf eine Ladungsverteilung

Ein Feld übt auf eine Ladungsverteilung die Kraft

$$\mathbf{F} = \int \mathrm{d}V \, \varrho(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r})$$

aus. Man nennt den Integranden auch **Kraftdichte**. Man kann zeigen, dass eine Ladungsverteilung auf dich selbst keine Kraft ausübt:

$$\mathbf{F}_{S} = \int \mathrm{d}V \int \mathrm{d}V' \,\varrho(\mathbf{r})\varrho(\mathbf{r}') \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{3}} = \int \mathrm{d}V \int \mathrm{d}V' \varrho(\mathbf{r}')\varrho(\mathbf{r}) \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^{3}} = -F_{S} \,.$$

Daher kann man in der obigen Gleichung  $\mathbf{E}$  auch durch  $\mathbf{E}_{ext}$ , d.h. allein das externe Feld, ersetzen. Ein Drehmoment hat dann analog die Form:

$$\mathbf{N} = \int \mathrm{d}V \, \mathbf{r} \times \varrho(\mathbf{r}) \mathbf{E}_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r}) \,.$$

#### 4.2.3 Elektrische Energie

Achtung: Die Beziehung zwischen Spannung und Energie ist nicht immer gleich definiert. Je nach Literatur muss man hier aufpassen. In unserem Fall ist die Spannung direkt das Kraftpotenzial, d.h. identisch zur Energie. Es gilt also die Beziehung  $\mathbf{E} = -\nabla \phi$  heißt dass für die Kraft:

$$\mathbf{F} = -\nabla U \qquad U = q\phi \,.$$

Daraus folgt dann sofort mit der Definition der Wegarbeit:

$$W = -\int_{\mathbf{a}}^{\mathbf{b}} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = U(\mathbf{b}) - U(\mathbf{a})$$

#### Wechselwirkungsenergie von Punktladungen

Modellhaft betrachten wir ein System, dem *n*-Punktladungen aus dem Unendlichen hinzugefügt werden. Dann braucht man für das erste keine Energie, für die zweite muss man das Potenzial des ersten überwinden, für das dritte das der ersten beiden usw. Das führt zu der Formel:

$$U = \sum_{j < i} U_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij}, \qquad U_{ij} = \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} = U_{ji}.$$

Dies ist die Eigeneneregie eines Systems von Punktladungen.

#### Feldenergie

Geht man zu einem Volumen mit Ladungsverteilung  $\rho(\mathbf{r})$  über bildet man den Kontinuumslimes und erhält:

$$U = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^3 r \varrho(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r})$$

Dies ist die Energie, die eine Ladungsverteilung in ihrem eigenen Potenzial hat. Im Gegensatz zum Kraftdichte-Integral fehlt hier die nötige Symmetrie und somit verschwindet die Eigenenergie nicht. In einem Elektromagnetischen Feld ist also Energie gespeichert. Mit der Voraussetzung, dass bei der Integration über ein genügend großes Volumen das Oberflächenintegral über das Produkt  $\mathbf{E}\phi$  gegen Null geht - das Oberflächenintegral ist von der Ordnung  $\mathcal{O}(1/r)$  - kann man zeigen:

$$U = \int \mathrm{d}V \, u \,, \qquad u = \frac{1}{8\pi} \, \mathbf{E}^2 \,,$$

dabei nennt man u auch die Energiedichte des elektrischen Feldes. Später werden wir dies zu einer Gesamtenergiedichte verallgemeinern.

#### Energie im externen Feld

Bei zusammengesetzten Systemen aus mehreren Feldern kann man die Felder addieren und erhält mit der Binomischen Formel einen Mischterm in der Energiedichte, den man analog umschreiben kann wie oben:

$$U_{12} = \int \mathrm{d}V \, \frac{\mathbf{E}_1 \cdot \mathbf{E}_2}{4\pi} = \int \mathrm{d}V \, \varrho_i \phi_j \,, \quad i, j = 1, 2, \ i \neq j \,. \tag{4.6}$$

Dies ist also die Energie einer Ladungsverteilung im Feld einer anderen bzw. im externen Feld. Anders als bei der Eigenenergie tritt hier kein Faktor 1/2 auf.

## 4.2.4 Multipoletwicklung

In diesem Kapitel entwickeln wir das Feld einer Ladungsverteilung in einem Abstand, der deutlich größer ist, als der Durchmesser der Verteilung. D.h. wir entwickeln die Größe

$$\frac{1}{R} := \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|}$$

im Integranden für r >> r'. Dies lässt sich kartesisch entwickeln. Bis zur Ordnung  $r^{-5}$  ergibt sich:

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{Q}{r} + \sum_{i} p_{i} \frac{x_{i}}{r^{3}} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} Q_{ij} \frac{x_{i} x_{j}}{r^{5}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^{4}}\right)$$

mit den Entwicklungskoeffizienten (auch Multipolmomente):

#### 1) Ladung:

$$Q = \int \mathrm{d}^3 r \,\varrho(\mathbf{r})$$

#### 2) **Dipolmoment:**

$$\mathbf{p} = \int \mathrm{d}^3 r \, \varrho(\mathbf{r}) \mathbf{r}$$

#### 3) Quadrupoltensor:

$$Q_{ij} = \int \mathrm{d}^3 r \,\varrho(\mathbf{r}) (3x_i x_j - r^2 \delta_{ij})$$

Diese Multipolmomente sind, bis auf die Gesamtladung, i.A. abhängig von der Wahl des Ursprunges. Man kann aber zeigen, dass für Q = 0 tatsächlich **p** Ursprungs-unabhängig und für  $Q = \mathbf{p} = 0$  der Quadrupoltensor Ursprungs-unabhängig ist.

Es existiert auch eine Darstellung durch die Legendre Polynome:

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} P_l(\cos(\varphi)) \,.$$

Diese muss auch existieren da es sich bei den Legendre Polynomen ja um ein VONS handelt.  $\varphi$  ist hierbei der Winkel zwischen **r** und **r**'. Eingesetzt in die Gleichung für das Potenzial ergibt sich:

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} \int dV' \, \varrho(\mathbf{r}') \left(\frac{r'}{r}\right)^l P_l(\cos(\varphi)) \,.$$

Da sich die Legendre Polynome auch nach den Kugelflächenfunktionen entwickeln lassen (wieder da es sich um ein VONS handelt) kann man dies auch angeben als:

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \frac{q_{lm}}{r^{l+1}} Y_l^m(\theta,\varphi)$$

mit den sphärischen Multipolmomenten:

$$q_{lm} = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \int \mathrm{d}V' \,\varrho(\mathbf{r}') r'^l (Y_l^m)^*(\theta',\varphi') \,.$$

Aus Linearkombinationen der sphärischen Multipolmomente lassen sich auch die kartesischen bestimmen. Dieses Verfahren ist nützlich, um die Felder beliebiger Ladungsverteilungen im freien Raum zu approximieren. Die auftretenden Integrale sind zwar sperrig aber man verfügt somit über ein Brute-Force-Verfahren zur numerischen Berechnung.

#### Physikalischer Dipol

Bei einem physikalischen Dipol handelt es sich um zwei gegensätzliche Punktladungen an den Punkten **a** und **b**. Es gilt Q = 0 trivial. Es ergibt sich:

$$\mathbf{p} = \int \mathrm{d}V \,\varrho(\mathbf{r})\mathbf{r} = q(\mathbf{a} - \mathbf{b})$$

Das Potenzial ist analog die Summe zweier Punktladungspotenziale:

$$V(r) = q \left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2}\right)$$

Wobei  $R_1$  der Abstand zur positiven und  $R_2$  der zur negativen Ladung ist. Dies widerspricht natürlich nicht der Multipolentwicklung, da wir hier zwei verschiedene Abstände betrachten.

#### Mathematischer Dipol

Ein Grenzübergang von einem physikalischen Dipol, dessen Ladungen bis auf eine infinitesimale Verschiebung  $\mathbf{d}$  ( $\mathbf{R}_2 = \mathbf{R}_1 + \mathbf{d}$ ) beieinander liegen liefert in erster Ordnung:

$$F(\mathbf{R}_1) - F(\mathbf{R}_2) = F(\mathbf{R}_1) - F(\mathbf{R}_1) - \mathbf{d} \cdot \nabla F(\mathbf{R}_1) = -\mathbf{d} \cdot \nabla F(\mathbf{R}_1)$$

Im Falle des mathematischen Dipols wird dies auf die Ladungsdichte angewendet. Man erhält die Ladungsdichte:

$$\varrho(\mathbf{r}) = -\mathbf{p} \cdot \nabla \delta(\mathbf{r}) \,.$$

Mittels der Rechenregeln für Ableitungen der  $\delta$ -Distribution erhält man dann für das Potenzial eines mathematischen Dipols:

$$\phi(\mathbf{r}) = rac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}}{r^3} := rac{p \cos(\theta)}{r^2}$$

Dabei ist  $\theta$  der Winkel zwischen **p** und **r**. Hier wird klar, warum ein mathematischer Dipol seinen Namen trägt: Es ist eine Ladungsverteilung mit einem reinen Dipolfeld ohne Ladungs-, Quadrupol- oder höhere Beiträge. Sein elektrisches Feld lautet:

$$\mathbf{E} = \frac{2p\cos(\theta)}{r^3} \,\mathbf{e}_r + \frac{p\sin(\theta)}{r^3} \,\mathbf{e}_\theta$$

Oder in kartesischen Koordinaten:

$$\mathbf{E} = -\nabla \left(\frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}}{r^3}\right) = -(\mathbf{p} \cdot \nabla) \left(\frac{\mathbf{r}}{r^3}\right) = \frac{3(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \cdot \mathbf{r} - r^2 \mathbf{p}}{r^5}$$

Die Energie, in einem konservativen äußeren Feld, ist dann nach (4.6) gegeben durch:

$$U = \mathbf{p} \cdot \nabla \phi_{\text{ext}} = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}_{\text{ext}}$$

Für die Kraft, die ein Mathematischer Dipol durch ein äußeres Feld erfährt, kann man zeigen das gilt:

$$\mathbf{F} = (\mathbf{p} \cdot \nabla) \mathbf{E}_{\text{ext}} = -\nabla U \,.$$

Die Kraft ist konservativ und nur dann ungleich 0, wenn das Feld inhomogen ist. So existiert auch ein Drehmoment:

$$\mathbf{N} = \mathbf{p} imes \mathbf{E}_{ ext{ext}} + \mathbf{r} imes \mathbf{F}$$

wobei der zweite Term nur existiert, wenn der Koordinatenursprung nicht in der Dipolmitte liegt.

# 4.2.5 Ernshaw Theorem

Das Ernshaw Theorem ist eine Aussage über die Stabilität elektrostatischer Konfigurationen von Ladungen. Betrachtet man ein Gesamtpotenzial dieser Ladungen  $\Phi$ , so ist ein Probekörper nur dann in einem Gleichgewicht, wenn an seinem Ort ein lokales, strenges Minimum von  $\Phi$  vorliegt. Dafür muss der Gradient, d.h. das elektrische Feld an der betreffenden Stelle verschwinden und die Hesse Matrix muss positiv definit sein. Die Spur der Hesse Matrix ist nun aber gerade  $\Delta \Phi$ . Da am Punkt des Testkörpers aber keine Ladung vorliegt, die zu  $\Phi$  beiträgt - sonst wäre es kein Testkörper - ist nach der Poisson Gleichung  $\Delta \Phi = 0$  und somit die Summe der Eigenwerte von  $H\Phi = 0$ . Damit ist die Matrix entweder indefinit oder nur semidefinit<sup>1</sup>, was für ein echtes Minimum nicht ausreicht. Es folgt das

**Ernschaw Theorem:** Es existiert keine statische Konfiguration von Ladungen, d.h. kein statisches Elektrisches Feld, welches eine Probeladung in einem stabilen Gleichgewicht halten kann.

# 4.2.6 Leiter

Bei einem Leiter handelt es sich um ein Material, in dem sich Ladungsträger frei fortbewegen können. Für die Bewegung dieser Ladungsträger gilt das **Ohm'sche Gesetz** 

$$\mathbf{j}=\sigma\mathbf{E}\,,$$

mit der Ladungsstromdichte **j** und der Leitfähigkeit  $\sigma$ . Dies lässt sich auf die Makroskopische Gleichung:

$$U = RI \,, \qquad R = \frac{L}{\sigma A}$$

umformen. Dabei ist R der Widerstand. Ein von außen angelegtes Feld beeinflusst nun die Ladungsverteilung im Leiter und an seiner Oberfläche. Dadurch wird wieder das Gesamtfeld beeinflusst. Eine typische Fragestellung ist es das Feld einer Ladungsverteilung mit einer gegebenen Leiterkonfiguration zu bestimmen. Wir interessieren uns nur für die Situation im Gleichgewicht, da es während dessen Einstellung zu Stromflüssen und somit zu Magnetfeldern kommt, die wir hier nicht betrachten wollen.

### Gleichgewichtseigenschaften

Im Gleichgewicht fließen im Leiter keine Ströme, d.h. nach dem Ohm'schen Gesetz:

- 1) Das Innere eines (möglicherweise geladenen) Leiters ist feldfrei.
- 2) Daher ist das Potenzial ist im Leiter konstant.
- 3) Da das Feld verschwindet, liegt im Innenvolumen des Leiters keine Ladungsverteilung vor. Die Nettoladungen eines Leiters liegen also auf der Oberfläche.

Der erste Punkt wird dadurch erreicht, dass sich beim Anlegen eines äußeren Feldes die Ladungen so anordnen, dass ein Gegenfeld aufgebaut wird, welches das äußere Feld im Inneren exakt kompensiert.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Semidefinit ist  $H\Phi$  für den Fall, dass alle Eigenwerte 0 sind, was einen Sattelpunkt bedeutet.

#### Randbedingungen an einer Leiteroberfläche

Wir betrachten hier die Ladungsverteilung auf der Oberfläche von

$$\sigma = \frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}D} \,.$$

Mithilfe eines passenden Integrationsrechtecks und -Volumens lässt sich unter Verwendung des Stokes'schen und Gaus'schen Integralsatzes die folgende Sprungbedingung herleiten:

$$\mathbf{E} = 4\pi\sigma\mathbf{n}$$

Dabei ist **E** das Feld an der äußeren Oberfläche des Leiters, da im Inneren ja **E** = 0 gilt und **n** der Normalenvektor der Oberfläche. Die Ladung an der Oberfläche von ungeladenen Leitern, die durch äußere Felder entstehen heißen **Influenzladungen**. Die Flächenladungsdichte  $\sigma$  ist die Summe der freien Ladungsdichte und der Influenzladungsdichte.

#### Hohlraum innerhalb eines Leiters

Innerhalb eines Leiters befinde sich ein beliebig geformter Hohlraum, mit einer Ladung +Q. Integriert man über eine Oberfläche, die den Rand des Hohlraums einschließt, erhält man, dass auf dieser inneren Oberfläche des Leiters die Ladung -Q sitzt, da der Leiter selbst Feldfrei ist, das Integral also verschwinden muss. Also trägt die äußere Oberfläche die Ladung +Q. Ein kugelförmiger Leiter, mit beliebig geformtem Hohlraum besitzt also das gewohnte Feld  $\mathbf{E} = q\mathbf{r}/r^3$ .

Bei einem **Faradayschen Käfig** ist der Hohlraum ladungsfrei. Dadurch kann auf der Innenseite des Leiters keine Ladung existieren, da der Leiter sonst nicht Feldfrei wäre. Somit ist auch der Hohlraum feldfrei.

## 4.2.7 Kondensatoren

Bei einem Kondensator handelt es sich schematische um zwei Leiter, die auf einem unterschiedlichen Potenzial liegen. Die Potenzialdifferenz oder auch Spannung V ist proportional zu Ladung, da elektrische Felder proportional zur Ladung sind. Die Potenzialdifferenz zwischen zwei Punkte in einem Feld lautet:

$$V = -\int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} \mathbf{E} \cdot \mathrm{d} \mathbf{l} \,.$$

Es gilt mit Kapazität C:

$$Q = CV, \qquad V = \phi_2 - \phi_1$$

Um die Kapazität zu Bestimmen benötigt man also eine Potenzialdifferenz, die man ggf. noch durch Berechnen des Wegintegrals finden muss. Es folgt z.B. für den Plattenkondensator:

$$C = \frac{A}{4\pi d}$$

Auf einem solchen Kondensator entstehen Influenzladungen usw., wodurch eine Kraft auf die geladene Oberfläche S mit Oberflächenladungsdichte  $\sigma$  entsteht:

$$\mathbf{F} = \int_{S} \sigma \mathbf{E}_{\text{ext}} \cdot \mathbf{dS}$$

Für die Energie eines solchen Kondensators ergibt sich:

$$U = \frac{1}{2} \int dV \rho(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum \phi_i \int dV \rho_i = \frac{1}{2} C V^2 = \frac{Q^2}{2C},$$

da die Ladungsdichte überall außer an den Oberflächen verschwindet und das Potenzial im Leiter konstant ist.

#### System aus Leitern

Für ein System aus N Leitern auf den Potenzialen  $\phi_i$  gilt umgekehrt auch, dass die Ladung eines einzelnen Leiters linear von den Potenzialen abhängen, was bedeutet:

$$Q_i = \sum_{j=1}^n C_{ij} V_j$$

Man nennt  $C_{ij}$  auch die Kapazitätsmatrix. Dadurch ergibt sich für die Energie:

$$U = \frac{1}{2} \int dV \,\rho\phi = \frac{1}{2} \sum_{ij} C_{ij} \phi_i \phi_j$$

Dabei ist zu beachten, dass die Potenziale im Leiter konstant sind und die Ladungsdichten außerhalb der Leiter verschwinden. So lässt sich das Integral leiht lösen.

#### 4.2.8 Lösungsmethoden für Randwertprobleme

Kondensatorkonfigurationen stellen letztlich Randwertprobleme, mit gegebenen Potenzialen (Dirichlet) oder Oberflächenladungsdichten (Neumann) dar. Das heißt wir betrachten ein Gebiet G mit Randflächen  $S_i$ , bzw. dem Unendlichen, auf denen gilt:

**Dirichlet:** 
$$\phi = f_i(\mathbf{r})$$
 auf  $S_i$   
**Neumann:**  $\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} = \nabla \phi \cdot \mathbf{n} = g_i(\mathbf{r})$  auf  $S_i$ 

Im feldfreien Raum erfüllt  $\phi$  die Poisson Gleichung. Lösungen der Poissongleichung mit solchen Randwertanforderungen sind **eindeutig**.

#### Plattenkondensator

Ein einfacher Plattenkondensator kann als leichtes Beispiel für beide diese Randwertprobleme verwendet werden. Die Platten haben in unserer vereinfachten Beschreibung eine sehr viel größere Ausdehnung als Abstand, sodass man effektiv nur eine Koordinate betrachten muss. Betrachten wir zunächst den Fall eines Dirichlet-RWPs, sodass das Potenzial der Platten vorgegeben ist:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi = 0$$
,  $x \in (0, d)$ ;  $\phi(0) = \phi_1$ ,  $\phi(d) = \phi_2$ 

Dieses Randwertproblem besitzt eine eindeutige Lösung, die man leicht durch Integration und Einsetzten der Randbedingungen findet und die auf das bekannte Feld:

$$\mathbf{E} = \frac{\phi_1 - \phi_2}{d} \, \mathbf{e}_x := \frac{V}{d} \, \mathbf{e}_x \, .$$
Aus den Normalkomponenten des Feldes (d.h. hier einfach dem Betrag) erhält man auch die Flächenladungsdichte:

$$\frac{Q}{A} = \frac{\mathbf{E} \cdot \mathbf{n}}{4\pi} = \frac{V}{4\pi d} \,.$$

Bei einem Neumann-RWP sind die Ladungsdichten  $\sigma = Q/A$  der Platten vorgegeben, d.h., da hier wieder  $\mathbf{n} = \pm \mathbf{e}_x$ :

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi = 0, \quad x \in (0,d); \quad \frac{\partial}{\partial x}\phi(0) = -E_n(0) = -4\pi\sigma, \quad \frac{\partial}{\partial x}\phi(d) = -4\pi\sigma.$$

Es muss darauf geachtet werden, dass die Normalenvektoren hier je nachdem + oder  $-\mathbf{e}_x$  sind. Daraus erhält man sofort:

$$\phi = -4\pi\sigma + \text{const.} \Rightarrow \mathbf{E}(x) = 4\pi\sigma\mathbf{e}_x$$

und somit auch für die Potenzialdifferenz  $V = \phi(d) - \phi(0)$ :

$$V = \frac{4\pi Q d}{A} \,,$$

was zum Ergebnis des Dirichlet-RWP identisch ist.

#### Methode der Bildladungen

Häufig lassen sich die Randwertprobleme natürlich nicht so einfach lösen, wie im obigen Beispiel. Eine weitere Möglichkeit bietet die Methode der Bildladungen. Hier wird diese direkt am Beispiel einer Punktladung vor einem leitenden, geerdeten Volumen erklärt.

Gegeben ist ein **geerdetes** Volumen (Potenzial konstant), dass von einem Leiter umgeben ist und ein äußeres Feld, beispielsweise eine Punktladung oder ein Kabel. Dann kann man eine Lösung der Poisson Gleichung für das Potenzial finden, die im Unendlichen verschwindet, die aber **nur** außerhalb des Leitervolumens gilt. Man setzt hierfür eine **Bildladung in** dem Volumen an, sodass die Randwertanforderungen erfüllt sind. Dadurch kann man den Ort und den Wert der Blindladung bestimmen. Die Lösung der Poissongleichung ist dann die Summe aus dem Potenzial der realen Ladung und der Bildladung.

#### Punktladung im Halbraum

In unserem Beispiel befindet sich eine Punktladung q im Abstand a von einer planen, unendlich ausgedehnten geerdeten Platte mit  $\phi(z = 0) = 0$ . Aus Symmetriegründen positioniert man die Bildladung im Abstand -a auf der anderen Seite der Platte und gibt ihr die Ladung q' = -q. Das Zusammengesetzte Potenzial lautet dann:

$$\phi = \frac{q}{|\mathbf{r} - a\mathbf{e}_z|} - \frac{q}{|\mathbf{r} + a\mathbf{e}_z|}$$

Man beachte, dass diese Lösung nur für den leeren Halbraum gilt. Offenbar erfüllt dieses Potenzial im leeren Halbraum die Poisson Gleichung und die Randbedingung.

Man kann die Methode auch verwenden, wenn eine geladene Oberfläche vorliegt. Dann kann man eine Bildladung in das Volumen legen, sodass ihr Potenzial das Randwertproblem und die Poissongleichung erfüllt. Die **Kraft** zwischen der Ladung und dem Leiter kann man dann auch durch die Kraft zwischen der Ladung und der Bildladung beschreiben. Im Falle der Punktladung im Halbraum üben Leiterplatte und Ladung also die Kraft:

$$\mathbf{F} = \pm \frac{q^2}{(2a)^2} \mathbf{e}_z$$

aufeinander aus. Das Vorzeichen ist je nach betrachteter Ladung (Punktladung oder Platte) zu wählen.

Die **Ladungsdichte** der Schale des Volumens ist mit Oberflächenvektor  $\mathbf{n}$  gegeben durch:

$$\sigma = -\frac{1}{4\pi} \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} \phi \Big|_{r=r_i} = -\frac{1}{4\pi} \mathbf{n} \cdot \nabla \phi \Big|_{r=r_i} = \frac{1}{4\pi} \mathbf{n} \cdot \mathbf{E} \,.$$

In unserem Beispiel wird also eine Ladungsdichte von

$$\sigma = \frac{E_z}{4\pi} = \frac{1}{4\pi} \frac{-2qa}{(a^2 + x^2 + y^2)^{3/2}}$$

auf der Leiterplatte induziert. Man kann durch explizite Integration zeigen, dass daraus für die gesamte Influenzladung folgt:  $\int \sigma \, dS = -q$ .

Die **Energie** in der Konfiguration entspricht bis auf einen Faktor der Wechselwirkungsenergie der Blindladung mit der realen Ladung, analog zur Feldenergie. Im Beispiel ist die Potenzielle Energie über die Kraft bestimmbar, die nur vom Abstand zur Platte abhängt:

$$U = -\int_{\infty}^{a\mathbf{e}_z} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = q^2 \int_{\infty}^{a} \frac{dz}{2z} = -\frac{q^2}{4a}.$$

Dies entspricht der halben Bindungsenergie von 2 Punktladungen im Abstand 2a.

#### Methode der Greenschen Funktionen

Wie in Abschnitt 4.1.2 gezeigt kann man Differenzialgleichungen mithilfe von Greenschen Funktionen lösen. Für uns sind insbesondere Potenziale von Interesse, die die Poisson-Gleichung und gegebene Neumann oder Dirichlet Randwertbedingungen erfüllen. Dann liefern (4.1) und (4.2) direkt explizite Lösungen der Probleme.

#### Green'sche Funktion des Halbraums

Bisher haben wir nur die Green'sche Funktion der freien Laplace-Gleichung, d.h ohne Randbedingungen kennengelernt. Wir betrachten nun noch das Dirichlet-RWP:

$$\begin{aligned} \Delta \phi(\mathbf{r}) &= -4\pi \varrho(\mathbf{r}) , \quad z > 0 ,\\ \phi(\mathbf{r}) &= f(\mathbf{r}) , \qquad z = 0 ,\\ \phi(\mathbf{r}) &\to 0 , \qquad \text{ für } \mathbf{r} \to \infty . \end{aligned}$$

Die Bedingungen an die Green'sche Funktion lauten also, wie bereits im Mathematik Teil angesprochen:

$$\begin{split} \Delta G(\mathbf{r}', \mathbf{r}) &= \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}), \quad z > 0, \\ \Delta G(\mathbf{r}', \mathbf{r}) &= 0, \quad \text{für } z = 0 \text{ und } \mathbf{r} \to \infty. \end{split}$$

Tatsächlich haben wir die Green'sche Funktion bereits gefunden. Aufgrund des Eindeutigkeitssatzes ist sie durch die Lösung des Bildladungsproblemes von oben gegeben, wobei hier der entsprechende Vektor **r** der Ort der Punkt- und der Bildladung ist. Mit Polarvektor  $\rho = (x, y)^T$  erhält man dann:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \left( \frac{1}{\sqrt{(\rho - \rho')^2 + (z - z')^2}} - \frac{1}{\sqrt{(\rho - \rho')^2 + (z + z')^2}} \right)$$

Mit diesem Ergebnis kann man jetzt also das Problem für beliebige Vorgegebene Potenziale auf der Platte bis auf ein Integral lösen.

#### Separationsansatz

Wir betrachten hier den Fall, dass keine Ladungsdichte vorliegt, sondern nur eine gegebene Geometrie mit vorgegebenen Potenzialen. Im freien Raum erfüllt das gesuchte Potenzial also die Laplace Gleichung. Häufig erfüllt das betrachtete Problem gewisse Symmetrien die ausgenutzt werden können, um das Problem zu separieren. Im Folgenden werden einige faktorische Separationsansätze angesprochen.

#### Kartesische Koordinaten in 2D

Betrachten wir hier direkt ein Beispiel: 2 plan parallele, unendlich ausgedehnte, geerdete  $(\phi = 0)$  Platten liegen im Abstand *a* in der *x*-*z*-Ebene. Bei x = 0 sind sie durch einen isolierenden Streifen des Potenziales  $\phi_0(y)$  gegeneinander isoliert. Dieses Problem hängt offenbar nicht von der *z*-Koordinate ab, sodass unser Ansatz lautet:

$$\phi(x,y) = X(x)Y(y) \quad \Rightarrow \quad Y(y)\frac{\partial^2}{\partial x^2}X(x) + X(x)\frac{\partial^2}{\partial y^2}Y(y) = 0$$

Insgesamt lauten die Randbedingungen der oben beschriebenen Konfiguration:  $\phi(y = 0) = \phi(y = a) = 0$ ,  $\phi(x = 0, y) = \phi_0(y)$  und  $\phi(x \to \infty) \to 0$ . Dadurch ergibt sich nach dem Separationsschritt ein oszillierender und ein hyperbolischer Term. Insgesamt ergibt sich mit den Randbedingungen:

$$\phi(x,y) = Ce^{-kx}\sin(ky), \qquad k = \frac{n\pi}{a} \quad n \in \mathbb{N}$$

Nun müssen alle diese elementaren Lösungen superponiert werden, um auch die letzte Randbedingung erfüllen zu können. Das heißt die allgemeine Lösung lautet:

$$\phi(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-n\pi x/a} \sin(n\pi y/a)$$

Die  $C_n$  können bestimmt werden, indem man an die gesamte Entwicklungsreihe für x = 0 einen Faktor  $\sin(n'\pi y/a)$  multipliziert und von 0 bis *a* integriert:

$$\begin{split} \phi(0,y) &= \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin(n\pi y/a) = \phi_0(y) \\ \Rightarrow &\sum_{n=1}^{\infty} C_n \underbrace{\int_0^a \sin(n\pi y/a) \sin(n'\pi y/a) \, \mathrm{d}y}_{=a\delta_{nn'}/2} = \int_0^a \phi_0(y) \sin(n'\pi y/a) \, \mathrm{d}y \\ \Rightarrow & C_n = \frac{2}{a} \int_0^a \phi_0(y) \sin(n\pi y/a) \, \mathrm{d}y \,. \end{split}$$

Ein solches oder ähnliches Verfahren lässt sich stets anwenden, wenn die Lösung eines Separationsproblemes auf ein VONS als Lösung führt.

#### Kugelkoordinaten

Hier lautet der Ansatz

$$\phi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)Q(\varphi)$$

• Für den **Winkelanteil** Q ergeben sich die Lösungen:

$$Q_m = e^{\mathrm{i}m\varphi} \,,$$

wobei man ausnutzt, dass aus der Struktur des Raumes eine Periodizitätsbedingung folgt:  $Q(\varphi) = Q(\varphi + 2\pi)$ .

• Für den Radialanteil R folgt eine Differenzialgleichung mit den Lösungen:

$$R = a_l r^l + \frac{b_l}{r^{l+1}}$$

• Der zweite **Winkelanteil** Θ ergeben sich als Lösungen die zugeordneten Legendre Polynome:

$$\Theta = P_l^m(\cos(\theta)) \,.$$

Alle diese Funktionen bilden bezüglich ihrer Koordinate ein VONS und können somit beliebige Randwertprobleme durch den Integrationstrick wie im vorangegangenen Beispiel lösen.

Allgemeiner Fall: Im allgemeinen Fall werden meist der erste und zweite Winkelanteil zur, entsprechend normierten, Kugelflächenfunktion zusammengefasst:

$$\phi(r,\varphi,\theta) = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \left( a_{ml} r^{l} + \frac{b_{ml}}{r^{l+1}} \right) Y_{l}^{m}(\theta,\varphi)$$

**Zylindersymmetrischer Fall:** Für  $\phi = \phi(r, \theta)$  ergibt sich, damit die Lösung unabhängig von  $\varphi$  ist automatisch m = 0. So sind die Lösungen des zweiten Winkelanteils durch die einfachen und nicht die zugeordneten Legendrepolynome gegeben:

$$\phi(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \left( a_l r^l + \frac{b_l}{r^{l+1}} \right) P_l(\cos\theta)$$

Aus dieser Struktur ergibt sich eine einfache Lösungsmethode, wenn man das Potenzial auf der Symmetrieachse, also V(R, 0) analytisch bestimmen kann. Hat man eine solche Lösung gefunden, z.B. mittels (4.4), kann man diese in eine Potenzreihe entwickeln und so die entsprechenden Koeffizienten der allgemeinen Lösung bestimmen.

# 4.3 Elektrostatik mit Dielektrika

Bisher wurde das Verhalten von statischen Elektromagnetischen Feldern von Ladungsverteilungen im Vakuum und unter Wechselwirkung mit Leiteroberflächen besprochen. Dabei stellen Leiteroberflächen letzten Endes für das Problem eine Randwertbedingung dar. Anders sieht es bei Nichtleitern, d.h. Isolatoren / Dielektrika aus. Auch in solchen Materialien kann es natürlich Felder geben, diese können hier (mögliche) vorhandene Ladungen aber nicht bewegen, sondern höchstens influenzieren oder ausrichten. Man spricht von **influenzierter / elektronischer Polarisation**, wenn Dipole durch das äußere Feld erst erzeugt werden und von **Orientierungspolarisation**, wenn bereits im Dielektrikum vorhandene Dipole ausgerichtet werden.

Wir werden hier den Effekt der Polarisation hauptsächlich makroskopisch betrachten. Makroskopisch wurde der Effekt der Polarisation von Faraday entdeckt. Er stellte fest, dass sich die Kapazität eines Plattenkondensators änderte, wenn ein Dielektrikum zwischen die Platten geführt wurde. Empirisch führte man hierfür die **Dielektrizitäts**konstante  $\epsilon$  ein:

$$C = \epsilon \frac{A}{4\pi d} \,.$$

Daraus folgt für das elektrische Feld

$$E = \frac{Q}{Cd} = \frac{4\pi\sigma}{\epsilon}$$

Das elektrische Feld des Plattenkondensators nimmt also bei einer hohen Dielektrizitätskonstante ab, da die Ladung der Platten teilweise durch die Polarisationsladungen abgeschwächt wird.

## 4.3.1 Polarisationsvektor

Das Anlegen eines elektrischen Feldes an ein Dielektrikum verursacht eine Ausrichtung der Ladungsträger. Insgesamt ergibt sich dadurch makroskopisch eine Verschiebung der Ladung, die durch den Polarisationsvektor  $\mathbf{P}$  beschrieben wird.

### Oberflächenpolarisierung

Eine solche Verschiebung der effektiven Gesamtladung erzeugt auf einem Flächenelement d $\mathbf{S}$  eine Ladungsansammlung von d $Q_p$  der Größe:

$$\mathrm{d}Q = \mathbf{P} \cdot \mathrm{d}\mathbf{S} \quad \Rightarrow \quad Q_{\mathrm{p}} = \int \mathrm{d}\mathbf{S} \cdot \mathbf{P}$$

#### Volumenpolarisation

Mithilfe des Gaus'schen Integralsatzes kann man hiervon auf die, durch ein beliebiges Oberflächenelement tretende, Polarisierung bestimmen und erhält eine dieser entsprechende Ladungsdichte von:

$$\varrho_p = -\nabla \cdot \mathbf{P}$$
.

Das "—" wird hier gesetzt, da ein Durchfluss von Q durch das entsprechende Element einer Ladungsabnahme von -Q im entsprechenden Volumen bedeutet, da die Gesamtladung erhalten (= 0) bleiben muss.

#### Mikroskopische Interpretation

Diese Definition des Polarisationsvektors ist recht abstrakt, es wird sich aber im Folgenden zeigen, dass sie sich auf eine leichte mikroskopische Interpretation zurückführen lässt. Wir betrachten ein Dielektrikum mit angelegtem Feld, sodass viele mikroskopische Dipole der Größe  $\mathbf{p} = q\boldsymbol{\delta}$  erzeugt werden. Diese erzeugen die Dipoldichte  $\tilde{\mathbf{P}} = n\mathbf{p}$  (Teilchenanzahldichte n). Das infinitesimale Dipolmoment  $\tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{r}')d^3r'$ , welches somit am Ort  $\mathbf{r}'$  erzeugt wird führt auf das infinitesimale Potenzial:

$$\mathrm{d}\phi = \mathrm{d}^3 r' \frac{\mathbf{P}(\mathbf{r}') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} = \mathrm{d}^3 r' \tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{r}') \cdot \nabla \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|},$$

wobei das Potenzial des mathematischen Dipols verwendet wurde. Mit einer der Rechenregel für die Differenzialoperatoren und dem Gaus'schen Integralsatz folgt dann:

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_{\partial V} \frac{\mathrm{d}\mathbf{S}' \cdot \tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \int_{V} \mathrm{d}V' \frac{-\nabla' \cdot \tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

Das zeigt im Vergleich mit den Eigenschaften der Polarisation, dass diese genau der Dichte der vorliegenden Dipole entspricht. Zusammenfassend erhält man, dass eine Polarisation  $\mathbf{P}$  durch eine Ladungsdichte bzw. Oberflächenladungsdichte von

$$\varrho_p = -\nabla \cdot \mathbf{P}, \qquad \sigma_p = \mathbf{P} \cdot \mathbf{n}$$

zur Folge hat.

## 4.3.2 Homogene Polarisation

Wir betrachten zunächst eine homogene Polarisation von  $\mathbf{P} = \rho \boldsymbol{\delta}$ , sodass  $\nabla \cdot \mathbf{P} = -\rho_P = 0$  gilt. Relevant ist also nur die Oberflächenladungsdichte  $\sigma_p$ .

#### Homogen polarisierte Schicht

Verschiebt man in einer homogenen, ebenen Schicht  $-d/2 \le x \le d/2$  die positive Ladungsdichte  $\rho_+$  um eine kleine Strecke  $\delta$  gegenüber der negativen in x-Richtung, so bedeutet dies eine Polarisation von:

$$\mathbf{P} = \varrho_+ \delta \mathbf{e}_x$$
.

Damit lässt sich die Oberflächenladungsdichte an den Rändern der Schicht leicht bestimmen. Durch die durch Polarisation entstehenden Ladungsdichten entsteht zudem ein Feld welches sich in diesem Fall wegen  $\rho_p = 0$ , d.h.  $\nabla \cdot \mathbf{E}_{\pm} = 4\pi \rho_{\pm}$  für  $x \in (-d/2, d/2)$  leicht bestimmen lässt:

$$\mathbf{E}_p = \mathbf{E}_+ + \mathbf{E}_- = -4\pi\varrho_+\delta\mathbf{e}_x = -4\pi\mathbf{P}.$$

#### Homogen polarisierte Kugel

Analog gehen wir bei einer Kugel vor und verschieben hier die positive Ladungsdichte um  $\delta$ . Dadurch ergibt sich

$$\sigma_p = \mathbf{P} \cdot \mathbf{n} = \varrho_+ \delta \, \cos \theta$$

mit dem Winkel  $\theta$  zwischen  $\delta$  und der Oberflächennormalen **n**. Dies ergibt wieder ein Neumann-RWP, welches für die Felder leicht zu integrieren ist und auf:

$$\mathbf{E}_p = \mathbf{E}_+ + \mathbf{E}_- = rac{4\pi}{3}\,\mathbf{P}$$

innerhalb der Kugel führt. Der Faktor 1/3 taucht Aufgrund der Richtungsabhängigkeit von  $\sigma_p$  auf.

## 4.3.3 Feldgleichungen mit Dielektrika

Im Falle eines Dielektrikas liegt neben der externen / felderzeugenden Ladungsdichte  $\rho_f$  ("freie" Ladungsdichte) die Polarisierte Ladungsdichte  $\rho_p$  vor. Beide tragen zum elektrischen Feld bei, sodass:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi(\varrho_f + \varrho_p) \quad \Leftrightarrow \quad \nabla \cdot (\mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}) = 4\pi \varrho_f$$

Um somit dies Ladungsdichten besser zu trennen führt man daher die sog. **Dielektrische** Verschiebung

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P} \tag{4.7}$$

ein. Dadurch lauten die Feldgleichungen der Elektrostatik nun:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi \varrho_f \qquad \nabla \times \mathbf{E} = 0 \tag{4.8}$$

#### Lineare Response

Häufig nähert man, dass die Polarisation in erster Ordnung proportional zum elektrischen Feld **E** ist. Die Proportionalitätskonstante nennt man in diesem Fall die elektrische Suszeptibilät  $\chi$ :

$$\mathbf{P} = \chi \mathbf{E}$$
,  $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$  mit  $\epsilon = 1 + 4\pi \chi$ 

Man nennt dies auch die Materiegleichungen in linearer Response.

#### Homogenes Dielektrikum

Im allgemeinen Fall ist  $\epsilon$  eine Funktion des Ortes weshalb rot  $\mathbf{D} \neq 0$ . Betrachtet man aber ein homogenes Dielektrikum, bzw. einen homogenen Ausschnitt so reduzieren sich die Gleichungen auf:

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0, \qquad \nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi \frac{\varrho_f}{\epsilon}.$$

#### Plattenkondensator mit homogenem Dielektrikum

Aus den obigen Feldgleichungen für ein homogenes Dielektrikum folgt für den Plattenkondensator mit entsprechenden Randbedingungen:

$$E = 4\pi \frac{\sigma}{\epsilon}$$

Umgestellt wird dies zu:

$$C = \frac{Q}{V} = \frac{\sigma A}{Ed} = \epsilon C_0$$

Somit hängt auch die Gesamtenergie

$$U = \frac{1}{2}C(\epsilon)V^2 = \frac{1}{2}\frac{Q^2}{C(\epsilon)}$$

von  $\epsilon$  ab. Der erste Term beschreibt die Energie Korrekt bei konstantem Potenzial, d.h. mit Energiequelle, der zweite bei konstanter Ladung, also ohne Quelle. Die Polarisation kann man mit (4.8) bestimmen. Dadurch wird die Gesamtoberflächenladung erniedrigt:

$$\sigma_g = \sigma + \sigma_p = \frac{\sigma}{\varepsilon}$$

## 4.3.4 Dielektrika und Grenzflächen

An Grenzflächen zwischen zwei Medien der Dielektrizitätskonstanten  $\epsilon_1$  und  $\epsilon_2$  lassen sich mit den Sätzen von Gaus und Stokes, ähnlich zu den ursprünglichen Randbedingungen an Leitern, folgende Gleichungen herleiten:

$$(\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) \cdot \mathbf{n} = 4\pi\sigma$$
$$(\mathbf{E}_1 - \mathbf{E}_2) \cdot \mathbf{t} = 0$$

Da rot **D** aufgrund des Polarisationsterms nicht zwingen verschwindet, ist die Tangentialkomponente von **D** nicht zwingend 0.  $\sigma$  ist hier die Ladungsdichte der Grenzfläche **ohne Influenzladungen**. Die Influenzierte Ladungsdichte erhält man durch die Differenz der zur Grenzfläche senkrechten Polarisation:

$$\sigma_p = -(\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_1) \cdot \mathbf{n} \, .$$

Für den Winkel zwischen dem Normalenvektor der Grenzfläche und dem elektrischen Feld **E** gilt tan  $\alpha = E_t/E_n$ . Daraus folgt mit der 2-ten Grenzbedingung das Brechungsgesetz für Feldlinien:

$$\frac{\tan \alpha_2}{\tan \alpha_1} = \frac{E_{n,1}}{E_{n,2}} = \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} \,.$$

## 4.3.5 Energie und Kräfte in Dielektrika

Im Vakuum ist die Elektrische Energie in einer Ladungskonfiguration durch die Gleichungen aus Kapitel 4.2.3 gegeben. In einem linearen Medium ergibt sich als ein Analogon:

$$U = \frac{1}{8\pi} \int \mathrm{d}^3 r \, \left( \mathbf{E} \cdot \mathbf{D} \right)$$

Für die Energie eines Dielektrikums in einem äußeren Feld  $\mathbf{E}_{ext}$  ergibt sich mit Polarisation

$$U = -\frac{1}{2} \int \mathrm{d}^3 r \, \mathbf{P}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r})$$

analog zur Energie eines Dipols.

## 4.3.6 Polarisierbarkeit von Atomen und Molekülen

In vielen Fällen kann das Dipolmoment von Atomen und Molekülen in erster Näherung als proportional zum angelegten elektrischen Feld angesetzt werden:

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}$$
.

Dabei nennt man  $\alpha = ca_B^3$ , wobei  $a_B$  der Bohrsche Atomradius ist auch die Polarisierbarkeit. Die Gesamtheit der Dipolmomente ergibt die Dipoldichte und somit die Polarisierung:

$$\mathbf{P} = n\mathbf{p} = n\alpha\mathbf{E}$$
.

Hier ist also  $\chi = n\alpha$ .

#### Orientierungspolarisation

Permanente Dipolmomente von Molekülen in einem elektrischen Feld tragen die Energie  $U = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E} = -pE \cos \theta$ . Mit dieser Energie folgen sie bei einer gegebenen Temperatur T einer Boltzmann-Verteilung (siehe Statistische Physik). Für kleine Energien, d.h. schwache Felder und Dipolmomente lässt sich diese in erster Ordnung angeben als:

$$n(\theta) = \frac{n_0}{4\pi} \left( 1 - \frac{U}{kT} \right), \qquad n_0 = \int \mathrm{d}\Omega \, n(\theta)$$

wobei k die Boltzmann-Konstante ist. Integriert über die Richtung des Dipolmoments in Feldrichtung ergibt sich das Dipolmoment:

$$P = \int \mathrm{d}\Omega \, n(\theta) p \cos \theta = \frac{n_0 p^2}{3kT} \, E \, .$$

Dies nennt man auch das Curie-Gesetz.

# 4.4 Magnetostatik

## 4.4.1 Ladungserhaltung und Feldgleichungen

In der Elektrostatik sind stationäre Ladungen die Quelle des Feldes. In der Magnetostatik wird diese Quelle des Feldes durch einen konstanten Ladungsfluss beschrieben. Die Stromdichte j beschreibt diesen Ladungsfluss. Makroskopisch gilt für den Fluss *I*:

$$I = -\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t}, \qquad I = \int_{S} \mathbf{j} \cdot \mathrm{d}\mathbf{S}$$

Fügt man diese beiden Gleichungen zusammen und ersetzt Q durch das entsprechende Integral, so erhält man mit dem Gaus'schen Integralsatz die:

Kontinuitätsgleichung:  $\frac{\partial}{\partial t} \varrho(t) + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$ 

Allgemein garantiert diese Gleichung die Gesamtladungserhaltung. Magnetische Felder resultieren aus den Feldgleichungen:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \qquad \nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}.$$

Wendet man den Stokes'schen Integralsatz auf die 2te Gleichung an erhält man das Ampère'sche Gesetz:

$$\int_{\partial S} \mathbf{B} \cdot \mathrm{d}\mathbf{r} = \frac{4\pi}{c} I \,.$$

Dabei ist I der Stom der durch die Fläche S tritt.

#### Magnetischer Fluss

Die erste Feldgleichung der Magnetostatik besagt anschaulich, dass es keine magnetischen Monopole gibt. Magnetische Feldlinien sind daher immer geschlossen. Außerdem folgt aus dem Gaus'schen Integralsatz, dass der Magnetische Fluss durch eine beliebige geschlossene Oberfläche stets verschwindet:

$$\int_{\partial V} \mathrm{d}\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \int_{V} \nabla \cdot \mathbf{B} \,\mathrm{d}V = 0$$

## 4.4.2 Vektorpotenzial

Mathematisch garantiert  $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$  die Existenz eines Vektorpotenziales A für B:

$$\mathbf{B}=\nabla\times\mathbf{A}$$

Zu diesem Potenzial lassen sich nun beliebige Gradientenfelder hinzuaddierenn  $\mathbf{A} = \mathbf{A}' + \nabla \chi$ , wodurch sich das Magnetische Feld, also die Physik, nicht ändert, da rot  $\nabla \chi = 0$  immer gilt. Ein solches Vorgehen nennt man auch Eichung. In der Magnetostatik verwendet man meist die **Coulomb Eichung**:

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta \chi = -\nabla \cdot \mathbf{A}'$$

Das Magnetfeld von  $\mathbf{A}$  und  $\mathbf{A}'$  ist aber identisch. In dieser Eichung erfüllt das Vektorpotenzial dann komponentenweise die Poisson-Gleichung:

$$\Delta \mathbf{A} = -\frac{4\pi}{c} \,\mathbf{j}\,.$$

#### Integraldarstellung

Das Vektorpotenzial ist also durch die Lösung von 3 Poisson Gleichungen gegeben. Für das einfachste Randwertproblem  $\mathbf{A}(\mathbf{r} \to \infty) \to 0$  kann man analog zur Elektrodynamik die Integraldarstellungen

$$\mathbf{A} = \frac{1}{c} \int d^3 r' \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \qquad \Rightarrow \qquad \mathbf{B} = \frac{1}{c} \int d^3 r' \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}') \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}$$

ableiten.

### **Biot-Savart-Gesetz**

Für einen dünnen Leiter über den ein konstanter Strom I fließt, kann man in der Integraldarstellung des magnetischen Feldes den Querschnitt vernachlässigen. Dann integriert man nur noch entlang der Linie des dünnen Leiters:

$$\mathbf{B} = \frac{I}{c} \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{l} \times (\mathbf{r} - \mathbf{l})}{|\mathbf{r} - \mathbf{l}|^3}$$

Dies nennt man auch das Biot-Savart-Gesetz. Manchmal wird auch die direkte Integralform von oben Biot-Savart-Gesetz genannt.

## 4.4.3 Kräfte auf Ladungsstromdichten

Geladenen Teilchen wechselwirken mit Magnetfelder durch die Lorentzkraft:

$$\mathbf{F} = \frac{q}{c} \, \mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

Die Lorentzkraft ist immer senkrecht zu Bewegungsrichtung, wirkt also wie eine Zentripetalkraft. Aus diesem Grund verrichten Magnetfelder **keine Arbeit**:

$$W_B = -\int \mathrm{d}\mathbf{r} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}) \propto \int \mathrm{d}t \underbrace{\mathbf{v} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{B})}_{=0} = 0.$$

Verschiedene Konfigurationen an Ladungsstromdichten erfahren ebenfalls die Lorentzkraft. Man kann sich jeweils überlegen, wie das jeweilige Integral aussehen muss:

• Volumen: Eine Beliebige Stromdichte lässt sich durch eine Ladungsdichte verknüpft mit einem (möglicherweise auch Ortsabhängigen) Geschwindigkeitsfeld beschreiben:  $\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \varrho(\mathbf{r})\mathbf{v}(\mathbf{r})$ . Dadurch ergibt sich die Kraftdichte:

$$\mathrm{d}\mathbf{F} = \frac{1}{c}\varrho\,\mathbf{v}\times\mathbf{B}\,\mathrm{d}V\,.$$

Das heißt integriert:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{c} \int \mathbf{j} \times \mathbf{B} \, \mathrm{d}V$$

• Oberfläche: Im Falle, dass der Strom nur auf der Oberfläche eines Volumens fließt, beschreibt man die Oberflächenflussdichte  $\mathbf{K}$  durch die Oberflächenladungsdichte und schränkt das Integrationsgebiet entsprechend auf die Fläche ein:  $\mathbf{K} = \sigma \mathbf{v}$ . Es folgt das Integral:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{c} \int \mathbf{K} \times \mathbf{B} \, \mathrm{d}A \, .$$

• Leiter: Hier verwendet man die Linienstromdichte  $\mathbf{I} = \lambda \mathbf{v}$  mit der Linienladungsdichte  $\lambda$  und erhält analog:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{c} \int_{l} \mathbf{I} \times \mathbf{B} \, \mathrm{d}l$$

## 4.4.4 Magnetisches Dipolmoment

Analog zur Multipolentwicklung in der Elektrostatik kann man auch in der Magnetostatik vorgehen. Da es keine Monopole gibt, beginnt die Entwicklung mit der Dipol-Ordnung. Mit der Entwicklung

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{r} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{r'}{r}\right)^n P_n(\cos\theta) \approx \frac{1}{r} + \frac{\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}}{r^3}$$

kann man die Integrale umschreiben. Es gilt generell für den zeitunabhängigen Fall ( $\partial_t \varrho = 0$ ) aufgrund der Kontinuitätsgleichung:

$$\int_V \mathrm{d}V\,\mathbf{j} = 0\,,$$

wenn man voraussetzt, dass es keine Quellen auf der Oberfläche von V gibt. Dadurch ergibt sich für das Potenzial in der Entwicklung in zweiter Ordnung:

$$\mathbf{A} = \frac{\mathbf{r}}{2cr^3} \times \int \mathrm{d}^3 r' \left( \mathbf{j}(\mathbf{r}') \times \mathbf{r}' \right)$$

Diesen ersten Term der Entwicklung nennt man entsprechend auch das **magnetische** Dipolmoment:

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2c} \int \mathrm{d}^3 r \, \mathbf{r} \times \mathbf{j}(\mathbf{r}) \,.$$

Mit diesem kann man dann eine Näherung für das Vektorpotenzial und das Feld in der Ordnung  $\mathcal{O}(r'/r)$  angeben:

$$\mathbf{A} = \frac{\mathbf{m} \times \mathbf{r}}{r^3}, \qquad \mathbf{B} = \frac{3\mathbf{r}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{m}) - r^2 \mathbf{m}}{r^5}$$

### Kraft, Energie und Drehmoment

Analog zum elektrischen Dipol wirkt auch auf einen magnetischen im konstanten Magnetfeld das Drehmoment

$$\mathbf{T} = \mathbf{m} \times \mathbf{B}$$

und in einem inhomogenen Magnetfeld wirkt die Kraft:

$$\mathbf{F} = \nabla(\mathbf{m} \cdot \mathbf{B})$$

woraus sich die Energie ergibt:

$$U = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}$$
.

#### Zusammenhang zum Drehimpuls

Zwischen dem magnetischen Dipolmoment einer starr rotierenden Ladungsverteilung, d.h. einer Stromdichte  $\mathbf{j} = nq\mathbf{v}$ , mit der Ladungsträger- / Teilchendichte n = const., und dem mechanischen Drehimpuls besteht ein linearer Zusammenhang:

$$\mathbf{m} = \frac{q}{2c} \int \mathrm{d}V n\mathbf{r} \times \mathbf{v} = \underbrace{\frac{q}{2mc}}_{\gamma} \mathbf{L}$$

Man nennt  $\gamma$  das gyromagnetische Verhältnis.

## 4.4.5 Magnetostatik in Materie

Man identifiziert wie schon in der Elektrostatik die Dipoldichte als die Magnetisierung:

$$\mathbf{M} = n\mathbf{m}$$
.

Wobei *n* die Volumenteilchendichte ist. Die Reaktion des Materials, also die Magnetisierung hängt vom Typ des Materials an. Man unterscheidet zwischen **Para-**, **Ferro-** und **Diamagneten**. Mikroskopisch entstehen Magnetisierungsphänomene durch Ausrichtung von Spins. Man betrachtet sog. **Domänen**, also gleich magnetisierte Bereiche. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich Domänen ausrichten hängt mit dem Boltzmann Faktor zusammen. Die genauere Beschreibung folgt in der statistischen Physik.

Die Magnetisierung erzeugt makroskopisch einen **Linienstrom** um ein Linienelement dl:

$$\mathrm{d}I_m = \mathbf{M} \cdot \mathrm{d}\mathbf{I}$$

D.h. man kann analog zur Elektrostatik eine Magnetisierungsstromdichte  $\mathbf{j}_m$  definieren, sodass gilt:

$$\mathbf{j}_m = c \, \nabla \times \mathbf{M}$$
 .

Man erhält die Feldgleichungen in Materie, indem man auf die externe Stromdichte  $\mathbf{j}_f$  (auch "freie" Stromdichte) die Magnetisierungsstromdichte  $\mathbf{j}_m$  addiert. Man nennt dann

$$\mathbf{H} = \mathbf{B} - 4\pi\mathbf{M}$$

auch die **magnetische Erregung** (es gibt unterschiedliche Benennungen). Dadurch ergeben sich folgende, modifizierte **magnetische Feldgleichungen im Medium:** 

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_f, \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

In erster Ordnung (linearer Response) gelten wie in der Elektrostatik die linearen Zusammenhänge:

$$\mathbf{M} = \kappa \mathbf{B} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{H} = \frac{1}{\mu} \mathbf{B}, \quad \mu = \frac{1}{1 - 4\pi\kappa}.$$

Man nennt  $\kappa$  auch die magnetische Suszeptibilität und  $\mu$  die magnetische Permeabilität (Diamagnetika  $\mu < 1$ , Paramegnetika  $\mu > 1$ , Ferroelektrika  $\mu >> 1$ ).

#### 4.4.6 Magnetostatik an Grenzflächen

#### Ohne Strömen auf Grenzfläche

In analoger Herleitung zu den Sprungbedingungen in der Elektrostatik (Stokes/Gauß) erhält man in einem Raum ohne externe Ströme ( $\mathbf{j}_f = 0$ ):

• Stetigkeit der Tangentialkomponente von **H**:

$$\Delta H_t = 0$$

• Stetigkeit in der Normalkomponente von B:

$$\Delta B_n = 0$$

Wichtig bei der Betrachtung ist, dass sich **H** für  $\mathbf{j}_f = 0$  durch ein **skalares Potenzial** beschreiben lässt. Zudem gilt mit  $\nabla \cdot \mathbf{H} = 0$ , dass dieses Potenzial die Laplace Gleichung lösen muss. Die Lösungsmethode ist also analog zu den elektrostatischen Problemen.

#### Mit Ströme auf Grenzfläche

[0.2cm] Liegt eine freie Stromdichte  $\mathbf{j}_f$  auf der Grenzfläche vor, so ergibt sich:

• Stetigkeit der Normalkomponente von B:

$$\Delta B_n = 0$$

• Sprung der Tangentialkomponente von H

$$\Delta H_t = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}, \quad \text{mit} \quad \mathbf{J} = \frac{\mathbf{j}_f \mathrm{d}A}{l}.$$

# 4.5 Elektrodynamik

Die bisherigen Kapitel beschränkten sich auf die unabhängige Beschreibung von elektrischen und magnetischen Feldern. Im folgenden soll dies nun auf die vereinheitlichte elektromagnetische Theorie verallgemeinert werden. Es wird sich sogar heraus stellen, dass die Grundgleichungen der Elektrodynamik kovariant unter Lorentztransformation sind und somit der speziellen Relativitätstheorie genügen.

## 4.5.1 Maxwell-Gleichungen

Die Gleichungen die wir bisher betrachtet haben sind:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \qquad \nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}$$
$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho, \qquad \nabla \times \mathbf{E} = 0$$

Man nennt diese auch die Prä-Maxwell-Gleichungen. Sie sind für zeitabhängige Stromund Ladungsdichten nicht konsistent, wie man an den folgenden Beispielen erkennen kann:

1) Betrachten wir div  $\nabla \times \mathbf{B} = 0$  so folgt immer  $\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$ , was für eine zeitabhängige Ladungsdichte der Kontinuitätsgleichung und somit der Ladungserhaltung widerspricht.

2) Betrachten wir einen Plattenkondensator in einem Wechselstromkreis. Die stromdurchflossenen Kabel umgibt ein Magnetfeld da hier offenbar eine Stromdichte vorliegt. Im Kondensator baut sich währenddessen ein Feld auf. Berechnet man anhand des Ampère'schen Gesetztes die Magnetfeldstärke, wobei die Integrationsfläche ein Kabel schneidet, so ergibt sich ein nicht verschwindendes Feld. Beult man die Integrationsfläche aber so aus, dass ihre Randkurve identisch bleibt, sie aber nun kein Kabel mehr schneidet, sondern zwischen den Kondensatorplatten hindurch verläuft so verschwindet das Feld, da dort ja kein Strom fließt.

Allgemein müssen somit die Gleichungen um Therme ergänzt werden, die die zeitliche Änderung der Felder enthalten, und zwar in einer Form, die dazu führt, dass sich für  $\partial_t \mathbf{E} = \partial_t \mathbf{B} = 0$  die Gleichungen von oben ergeben. Man macht den Ansatz, dass dieses gesuchte Differenzialgleichungssystem von erster Ordnung in der Zeit ist, sodass die Felder durch gegebene Anfangsbedingungen  $\mathbf{E}(t = 0, \mathbf{x}), \mathbf{B}(t = 0, \mathbf{x})$  und  $\varrho(t = 0, \mathbf{x})$  eindeutig bestimmt sind<sup>2</sup>. Wir erhalten die geforderten Eigenschaften mit dem Ansatz:

$$\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \alpha \left(\nabla \times \mathbf{B} - \frac{4\pi}{c}\mathbf{j}\right)$$
$$\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \beta \nabla \times \mathbf{E}.$$

Die Proportionalitätskonstante  $\alpha$  muss 1 sein, da nur dann die erste dieser Gleichungen in Übereinstimmung mir der Kontinuitätsgleichung sein kann. Aus der später behandelten Induktion und der Wellengleichung erhält man zudem  $\beta = -1$ . Die vollständigen Maxwell-Gleichungen lauten dann:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \qquad \nabla \times \mathbf{H} = \frac{1}{c} \left( 4\pi \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right)$$
$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi \varrho, \qquad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}.$$

Hierbei gilt  $\mathbf{H} = \mathbf{B} - 4\pi \mathbf{M}$  und  $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi \mathbf{P}$ . Im Vakuum ist  $\mathbf{M} = \mathbf{P} = 0$ . Die linken Gleichungen nennt man auch die **Zwangsbedingungen**, da sie keine zeitlichen Ableitungen enthalten, sondern "nur" Randbedingungen stellen, die unabhängig von der zeitlichen Entwicklung immer erfüllt sein müssen.

Die Wechselwirkung mit Materie findet dann über die gesamte **Lorentzkraft** mit elektrischem und magnetischem Anteil statt:

**Lorentz-Kraft:** 
$$\mathbf{F} = q\left(\mathbf{E} + \frac{1}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B}\right)$$
.

## 4.5.2 Potenzialgleichungen

Die 1. und 4. Maxwell-Gleichung (auch homogene Maxwell-Gleichungen) garantieren weiterhin, dass die Felder aus Potenzialen abgeleitet werden können. Dabei gilt:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Dies ist zunächst einmal nur ein Ansatz, dessen Korrektheit dann anhand der Experimente und dem Vergleich mit anderen Theorien überprüft werden muss.

für das Vektorpotenzial A und somit:

$$\nabla \times \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = 0$$

woraus insgesamt folgt:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \qquad \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi.$$
(4.9)

#### Eichtransformationen

Wir für die Coulomb-Eichung bereits angesprochen kann man das Vektorpotenzial ändern, ohne, ohne dass sich das Magnetfeld ändert. Dies gilt auch im Falle der kompletten Maxwell-Gleichungen, allerdings muss hier auch  $\phi$  geändert werden:

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f, \qquad \phi' = \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}$$
(4.10)

Man kann leicht nachrechnen, dass diese Transformation beide Felder invariant lässt.

#### Feldgleichungen für die Potenziale

Aus den übrigen (inhomogenen) Maxwell-Gleichungen ergeben sich Gleichungen für die Potenziale. Um diese möglichst kompakt zu halten, verwendet man meist man zwei verschiedene Eichungen:

• Coulomb-Eichung  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ : Diese Eichung vereinfacht die Gleichung für  $\phi$  entscheidend:

$$\Delta \phi = -4\pi \varrho$$

• Lorenz-Eichung  $\frac{1}{c}\partial_t \phi + \nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ : Diese Eichung führt auf eine symmetrische, voneinander unabhängig Form der Gleichungen für  $\mathbf{A}$  und  $\phi$ :

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \mathbf{A} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}$$
(4.11)

$$\Delta \phi - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \phi = -4\pi \varrho \tag{4.12}$$

Jede Eichung ergibt natürlich eine **Nebenbedingung**, die die Potenziale dann zusätzlich erfüllen müssen. Die tatsächliche Form der Eichfunktion f ist allerdings unwesentlich.

## 4.5.3 Erhaltungssätze

#### Ladungserhaltung

Wie bereits besprochen folgt aus der 4. Maxwell-Gleichung die Kontinuitätsgleichung.

## Energieerhaltung

Die Änderung der kinetischen Energie ergibt sich durch:

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = \sum_{i} \mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_{i} \to \int \mathrm{d}V \,\mathbf{j} \cdot \mathbf{E} \,.$$

Durch Multiplikation der 2. Maxwell-Gleichung mit **E** und der 4. mit **B** erhält man durch Addition der erhaltenen Gleichungen unter Verwendung der Kettenregel  $(\partial_t f(t)^2 = 2f(t)\dot{f}(t))$  das:

**Poynting-Theorem:** 
$$\partial_t w + \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} = -\nabla \cdot \mathbf{S}$$
. (4.13)

Dabei nennt man S auch den Poynting-Vektor

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} \, \mathbf{E} \times \mathbf{H}$$

und w ist offenbar die Energiedichte der Felder:

$$w = \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{H}) \,.$$

Eine Deutung des Poynting Vektors ergibt sich in erster Linie aus der integralen Version des Poynting-Theorems:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(W_{\mathrm{kin}} + W_{\mathrm{Feld}}) = \int \mathrm{d}V \left(\mathbf{j} \cdot \mathbf{E} + \partial_t w\right) = -\int \mathrm{d}\mathbf{A} \cdot \mathbf{S}$$

Der Poynting-Vektor beschreibt also den Energiefluss aus einem gegebenen Volumen. Für ein unendlich großes Volumen gibt es keinen solchen Fluss durch die Oberfläche und die Gesamtenergie ist erhalten.

#### Impulserhaltung

In ähnlicher Art und Weise ergibt sich die **Impulsbilanz** in der Form:

$$\partial_t \mathbf{\Pi} + \mathbf{f} = \nabla \cdot \mathbf{T}$$
.

mit der Impuls- und der Kraftdichte:

$$\mathbf{\Pi} = \frac{\mathbf{S}}{c^2}, \qquad \mathbf{f} = \rho \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{j} \times \mathbf{B}, \qquad (4.14)$$

sowie dem Maxwell'schen Spannungstensor

$$\mathbf{T} = \frac{1}{4\pi} \left[ \mathbf{E}\mathbf{E} + \mathbf{B}\mathbf{B} - \frac{1}{2} (E^2 + B^2) \right] \,.$$

## 4.5.4 Induktion

**Faraday** beschrieb erstmalig ein Phänomen der **Elektromotorischen Kraft**, die eine Leiterschleife, mit einer Ladungsquelle in der Form

$$\varepsilon = \oint \mathbf{f} \cdot d\mathbf{l}$$

ausübt, wobei **f** eine Kraft pro Ladung ist. Ist die Leiterschleife geschlossen, verschwindet dieses Integral mit Stokes wegen  $\nabla \times \mathbf{E} = 0$ . Im Experiment erkannte Faraday, dass in einem relativ zu einem Magnetfeld bewegten Leiter ein Strom hervorgerufen wird. Selbes gilt für einen Leiter in einem sich zeitlich ändernden Magnetfeld. Den Strom in einem, im Magnetfeld bewegten, Leiter kann man schon durch die Lorentzkraft auf die Elektronen im Leiter, die sich ja verhalten, wie eine bewegte Ladung verhalten beschreiben:

$$\oint \mathbf{f} \cdot \mathrm{d}\mathbf{l} = \frac{1}{c} v B h$$

Hier für ein Leiterrechteck, das senkrecht zum Feld B steht. Es ist intuitiv, dass der gleiche Effekt auftreten muss, wenn das Magnetfeld bewegt ist.

Insgesamt ergibt sich aus der Betrachtung, auch des veränderlichen Magnetfeldes das Induktionsgesetz:

$$\varepsilon = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\int \mathbf{B} \cdot \mathrm{d}\mathbf{S}$$

#### Farayday-Gesetz

Mit Kenntnis der Maxwell-Gleichungen sieht man, dass die Ursache für die von Faraday beobachtete elektromotorische "Kraft" in Wahrheit eine Spannung zum Ursprung hat, die sich durch Integration der 4ten Maxwell-Gleichung ergibt. Dabei nennt man  $\Phi$  auch den **magnetischen Fluss** und erhält das Faraday-Gesetz:

$$V = -\frac{1}{c} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \Phi, \qquad \Phi = \int \mathbf{B} \cdot \mathrm{d}\mathbf{S}.$$

Für ein bewegtes Drahtelement am Ort d $\mathbf{l}$  mit Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  gilt:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Phi = -\oint_{\partial S}\mathrm{d}\mathbf{l}\cdot(\mathbf{v}\times\mathbf{B})$$

Das Vorzeichen des Induktionsgesetzes hat tatsächlich einen eigenen Namen: die Lentz'sche Regel: Das von einem Induktionsstrom erzeugte Magnetfeld ist stets dem ursprünglichen Magnetfeld entgegen gerichtet.

## 4.5.5 Magnetische Energie

#### Feldenergie

Die Energie und die Energiedichte eines Magnetischen Feld ergibt sich aus dem Poynting-Theorem zu:

$$U_m = \int \mathrm{d}V \, u_m \,, \qquad u_m = \frac{1}{8\pi} B^2 \,.$$

#### Potenzielle Energie

Dieser Ausdruck lässt sich für ein, im unendlichen auf einer Oberfläche verschwindendem, Magnetfeld umschreiben zu:

$$U_m = \frac{1}{2c} \int \mathrm{d}V \,\mathbf{A} \cdot \mathbf{j} \tag{4.15}$$

#### Induktivität

Wir betrachten hier noch einmal den Fall einer statischen Stromdichte. Schreibt man in (4.15) das Vektorpotenzial **A** in seiner Integralform so erhält man für ein System von Leitern mit  $\mathbf{j}_k = I_k \mathbf{i}_k$ 

$$U_m = \frac{1}{2} \sum_{m,n} L_{mn} I_m I_n, \qquad L_{mn} = \frac{1}{c^2} \int \mathrm{d}V_m \int \mathrm{d}V_n \frac{\mathbf{i}_m \cdot \mathbf{i}_n}{|\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n|}.$$

Man nennt die Koeffizienten  $L_{mn}$  für  $m \neq n$  Gegeninduktivitäten und für m = n Selbstinduktivität. Mit der Selbstinduktivität kann man auch eine Beziehung zwischen dem magnetischen Fluss und dem Strom einer Leiterschleife herleiten:

$$\Phi = cLI.$$

# 4.6 Elektrodynamik in relativistischer Form

## 4.6.1 Kovariante Gleichungen

Die Gleichungen der Elektrodynamik, d.h. die Maxwell Gleichungen, sind, wie sich herausstellen wird, bereits kovariant. Die Lorentzkraft führt auf eine 4er Impulsableitung nach der Eigenzeit von:

$$rac{\mathrm{d}p^0}{\mathrm{d} au} = rac{q}{c} u^i E^i \,, \qquad rac{\mathrm{d}p^i}{\mathrm{d} au} = rac{q}{c} u^0 E^i + rac{q}{c} \epsilon^{ijk} u^i B^k \,,$$

mit den räumlichen Komponenten der Vierer-Geschwindigkeit  $u^i$ . Die Kontinuitätsgleichung kann man durch die Definition einer Dies kann man zur Definition einer

**Vierer-Stromdichte:**  $j^{\mu} = (c \, \varrho, j^i)$ .

verwenden. Die Kontinuitätsgleichung lautet dann:

Kontinuitätsgleichung: 
$$\partial_{\mu}j^{\mu} = 0$$

und ist **kovariant**. Dieser Umstand ist sehr wichtig, da es sonst Inertialsysteme geben könnte, in denen die Ladungserhaltung verletzt ist. Die **Lorentz-Eichung**, die auf die symmetrische Form der Potenziale (4.11) führt lässt sich mit der Definition eines

Vierer-Potenzial:  $A^{\mu} = \left(\phi, A^{i}\right)$ 

ebenfalls in eine kovariante Form bringen:

**Lorentz-Eichung:** 
$$\partial_{\mu}A^{\mu} = 0$$
 (4.16)

Mit dem d'Alembert-Operator kann man dies dann zudem zu einer kovarianten, inhomogenen Gleichung für das 4er-Potenzial zusammenfassen:

**Potenzialgleichungen:** 
$$\Box A^{\mu} = -\frac{4\pi}{c}j^{\mu}$$
 (4.17)

Einige Autoren definieren den d'Alembert-Operator mit umgekehrtem Vorzeichen, weshalb dann in dieser Gleichung ein zusätzliches "—" auftritt. Da die gesamte Theorie der Elektrodynamik aus dieser Gleichung bzw. aus ihrem Ursprung, d.h. den Maxwell-Gleichungen abgeleitet wird, ist diese Theorie somit vollständig kompatibel mit der speziellen Relativitätstheorie.

#### Feldstärke Tensor

Aus dem 4er-Potenzial kann man eine Größe bilden, die ein antisymmetrischer Lorentz-Tensor ist und alle Feldkomponenten enthält:

**Feldstärketensor:** 
$$F^{\mu\nu} = -F^{\nu\mu} = \partial^{\mu}A^{\nu} - \partial^{\nu}A^{\mu}$$

Dabei gilt:

$$F^{0i} = -E^i, \quad F^{ij} = -\epsilon^{ijk}B^k, \quad F^{\mu\mu} = 0.$$

Dies lässt sich natürlich auch als  $4 \times 4$  Matrix schreiben:

$$F^{\mu\nu} \doteq \begin{pmatrix} 0 & -E^1 & -E^2 & -E^3 \\ E^1 & 0 & -B^3 & B^2 \\ E^2 & B^3 & 0 & -B^1 \\ E^3 & -B^2 & B^1 & 0 \end{pmatrix}.$$

## Eichtransformation in kovarianter Form

Eichtransformationen sind nun Transformationen des 4er Potenziales, welche den Feldstärketensor nicht ändern. Man kann die kovariante Form direkt aus den bereits bekannten Eichtransforamtionen bestimmen und durch einsetzten sehr leicht zeigen, dass der Felstärketensor unverändert bleibt. Es gilt:

**4er-Eichtransformation:** 
$$A'^{\mu} = A^{\mu} - \partial^{\mu} f(x)$$
.

## Dualer Feldstärke Tensor

Um in einem nächsten Schritt die Maxwell-Gleichungen möglichst kompakt zu einer kovarianten Form umzuschreiben, definieren wir eine weitere Größe. Dazu verwenden wir den 4-dimensionalen  $\epsilon$ -Tensor:

$$\epsilon^{\alpha\beta\gamma\delta} = \begin{cases} +1 & \text{für } (\alpha, \beta, \gamma, \delta) = (0, 1, 2, 3) \text{ und gerade Permutationen} \\ +1 & \text{für } (\alpha, \beta, \gamma, \delta) = (0, 1, 2, 3) \text{ und ungerade Permutationen} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Dabei gilt:

$$\epsilon^{lphaeta\gamma\delta} = \epsilon_{lphaeta\gamma\delta} \,.$$

Damit definieren wir den:

**Dualer Feldstärketensor:** 
$$\mathcal{F}^{\mu\nu} = \frac{1}{2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\rho\sigma}$$
.

Dieser hat in Matrixschreibweise dann die Form:

$$\mathcal{F}^{\mu\nu} \doteq \begin{pmatrix} 0 & -B^1 & -B^2 & -B^3 \\ B^1 & 0 & E^3 & -E^2 \\ B^2 & -E^3 & 0 & E^1 \\ B^3 & E^2 & -E^1 & 0 \end{pmatrix}.$$

## 4.6.2 Maxwell Gleichungen

Die inhomogenen Maxwell Gleichungen:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi \varrho, \qquad \nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \left( 4\pi \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right)$$

lassen sich durch den Feldstärke Tensor ausdrücken:

inhomogene Maxwell-Gleichungen: 
$$\partial_{\mu}F^{\mu\nu} = \frac{4\pi}{c} j^{\nu}$$
.

Die beiden homogenen Maxwell Gleichungen

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \qquad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

lassen sich mittels des dualen Feldstärketensors umschreiben:

homogene Maxwell-Gleichungen: 
$$\partial_{\mu} \mathcal{F}^{\mu
u} = 0$$
.

Die homogenen Maxwell-Gleichungen sind aufgrund der Eigenschaften von  $\mathcal{F}^{\mu\nu}$  stets erfüllt. Die inhomogenen Maxwell-Gleichungen folgen auch aus der Lagrangedichte:

**Lagrangedichte des E.-M.-Feldes:** 
$$L = -\frac{1}{16\pi}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} - \frac{1}{c}A^{\sigma}j_{\sigma}$$
.

Dabei hängt nur  $j_{\sigma}$  explizit von den Koordinaten x ab, die anderen Größen sind alle Ausdrücke der Felder  $A^{\mu}$ .

#### Lorentzkraft

Als letztes müssen wir nun die Lorentzkraft ebenfalls in einer kovarianten Form schreiben:

$$\frac{\mathrm{d}p^{\mu}}{\mathrm{d}\tau} = m \frac{\mathrm{d}u^{\mu}}{\mathrm{d}\tau} = \frac{q}{c} F^{\mu\nu} u_{\nu} \,.$$

All diese Beziehungen, d.h. zwischen den Tensoren und den Feldern, sowie den Maxwellgleichungen und auch der Lorentz Kraft kann man durch explizites nachrechnen komponentenweise zeigen. Der räumliche Anteil der Lorentzkraft hat dann die Form:

$$\mathbf{F}_L = q\gamma \left( \mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right) \,.$$

Wir verwenden hier den Index L, um sie vom Feldstärketensor zu unterscheiden. Im nichtrelativistischen Grenzfall  $\gamma \rightarrow 1$  stimmt dies mit der gewohnten Lorentzkraft überein.

## 4.6.3 Transformation der Felder

Aus den Transformationseigenschaften des Feldstärketensors als Lorentz-Tensor kann man die der Felder leicht herleiten. Vektoriell gilt mit  $\beta = \mathbf{v}/c$ :

$$\mathbf{E}' = \gamma \left( \mathbf{E} + \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{B} \right) + (1 - \gamma) \frac{\left( \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\beta} \right) \boldsymbol{\beta}}{\beta^2}$$
$$\mathbf{B}' = \gamma \left( \mathbf{B} - \boldsymbol{\beta} \times \mathbf{E} \right) + (1 - \gamma) \frac{\left( \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\beta} \right) \boldsymbol{\beta}}{\beta^2}.$$

Offensichtlich sind elektrisches und magnetisches Feld in verschiedenen Inertialsystemen also verknüpft. Es lässt sich also z.B. ein Inertialsystem wählen, in dem das elektrische oder das magnetische Feld verschwindet. Wir betrachten nun einige Konsequenzen.

#### Beziehung zwischen E und B

Angenommen es existiere kein magnetisches Feld in  $\mathcal{K}'$ , dann ließe sich die Beziehung zwischen den beiden Feldern in jedem beliebigen anderen System durch:

$$B^i = \frac{1}{c} \epsilon^{ijk} v^k \frac{E^k}{c}$$

ausdrücken. Analoges gilt natürlich umgekehrt. D.h. findet man ein System in dem entweder  $E'^i = 0$  oder  $B'^i = 0$ , so sind **elektrisches und magnetisches Feld in allen** anderen Inertialsystemen senkrecht zueinander.

## Lorentz Skalare des Felstärketensors

Mit den Definitionen von  $F^{\mu\nu}$  und  $\mathcal{F}^{\mu\nu}$  lässt sich zeigen:

$$F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} = 2\left(B^iB^i - E^iE^i\right) = -\mathcal{F}_{\mu\nu}\mathcal{F}^{\mu\nu}$$
$$F_{\mu\nu}\mathcal{F}^{\mu\nu} = -4E^iB^i.$$

Dabei ist die zweite Größe ein **pseudo Skalar**, d.h. sie ändert ihr Vorzeichen unter Parität. Man kann zeigen, dass diese beiden Skalare tatsächlich **die einzigen beiden unabhängigen** Skalare der Felder sind.

# 4.6.4 Lagrangeformalismus für Teilchen im elektromagnetischen Feld

In der klassischen Mechanik ist L = T - V. In einem elektrischen Feld ist somit  $V = q\phi$ . Da die Lagrangefunktion translations- und lorentzinvariant (poincareinvariant) sein muss, darf sie nicht explizit von den Koordinaten  $x^{\mu}$  abhängen. Insgesamt findet man:

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} + qv^i A^i - q\phi \,.$$

Daraus erhält man den korrekten nichtrelativistischen Grenzfall für kleine v. Dies lässt sich dadurch bestätigen, dass sich mit dieser Definition die Lorentz Kraft korrekt reproduzieren lässt. Zudem erhält man die kanonischen Impulse (die zudem auch zyklische Koordinaten sind):

$$p^i = \frac{\partial L}{\partial v^i} = m\gamma v^i + qA^i.$$

Daraus ergibt sich zudem die Energie mittels  $E = p^i v^i - L$  die Energie:

$$E = m\gamma c^2 + q\phi \,.$$

Aus der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung für freie Teilchen ergibt sich dann mit  $E_{\text{frei}} = E - q\phi$  und  $p_{\text{frei}}^i = p^i - qA^i$  zudem die Hamiltonfunktion:

$$H = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 (p^i - qA^i)^2} + q\phi.$$

Dies unterscheidet sich von der Hamiltonfunktion für freie Teilchen durch die Ersetzung  $p^i \rightarrow p^i - qA^i$  und den zusätzlichen Term  $q\phi$ . Dies lässt sich offenbar als Transformation des Viererimpulses schreiben:

$$p^{\mu} = \left(\frac{E - q\phi}{c}, p^i - qA^i\right) \,.$$

Dadurch ergibt sich dann mittels  $p^{\mu}p_{\mu} = m^2c^2$  die korrekte Gleichung für die Energie. Dieses Prinzip der **minimalen Ersetzung** spielt eine Wichtige Rolle in der Quantenfeldtheorie und relativistischen Quantenmechanik. In Ausdrücken von Vierervektoren lautet dies also:

$$p^{\mu} \rightarrow p^{\mu} - qA^{\mu}$$

Man erhält allein durch diese Ersetzung aus der Beschreibung des freien Teilchens die Beschreibung der Wechselwirkung mit einem elektromagnetischen Feld.

## 4.6.5 Energie-Impuls-Tensor

Aus dem Felstärketensor kann man einen weiteren Lorentztensor 2ter Stufe einführen, der sich aus der Energiedichte w und dem Poynting-Vektor **S** zusammen setzten wird. Aus diesem Grund nennt man ihn auch den Energie-Impuls-Tensor. Er lautet:

**Energie-Impuls-Tensor:** 
$$T^{\alpha\beta} = \frac{1}{4\pi} \left( F^{\alpha}_{\ \gamma} F^{\gamma\beta} + \frac{1}{4} g^{\alpha\beta} F_{\gamma\delta} F^{\gamma\delta} \right)$$

In der Matrix-Darstellung ergibt sich:

$$T^{lphaeta} \doteq \begin{pmatrix} w & \mathbf{S}/c \\ \mathbf{S}/c & T^{ik} \end{pmatrix}$$

Mithilfe der Maxwellgleichungen kann man zeigen, dass gilt

$$\partial_{\alpha}T^{\alpha\beta} = -\frac{1}{c}F^{\beta\gamma}\,j_{\gamma}\,.$$

Dies ist identisch zu den Energie und Impulsbilanzen (4.13) ( $\beta = 0$ ) und (4.14) ( $\beta = 1, 2, 3$ ). Integriert man diese Gleichung für  $j^{\gamma} = 0$  über ein Volumen so erhält man:

$$p_{\rm em}^{\mu} = \frac{1}{c} \int_V {\rm d}^3 r \, T^{0\mu} = {\rm const.}$$

Energie und Impulserhaltung ergeben sich hier also direkt aus dem Energie-Impuls-Tensor. In einer Lagrangen Feldtheorie ergibt sich der Energie-Impuls-Tensor tatsächlich als Erhaltungsgröße zur Translation von  $x^{\mu}$  aus dem Satz von Noether.

# 4.7 Elektromagnetische Wellen im Vakuum

Wir betrachten hier zunächst den strom- und ladungsfreien Fall. Dann kann man die Gleichungen (4.11) vereinfachen zu:

Wellengleichung in Lorentz-Eichung: 
$$\Box A^{\mu} = 0$$

## 4.7.1 Die monochromatische ebene Welle

Man kann durch einfaches Ableiten zeigen, dass die Funktion:

$$A^{\mu} = A^{\mu}_0 \exp\left(-\mathrm{i}k^{\mu}x_{\mu}\right), \quad \mathrm{mit} \quad k^{\mu} := \left(\frac{\omega}{c}, \mathbf{k}\right)$$

mit der Bedingung:

$$k_{\mu}k^{\mu} = \frac{\omega^2}{c^2} - |\mathbf{k}|^2 = 0$$

die Wellengleichung erfüllt. Man könnte im Exponenten noch eine beliebige reelle Phase hinzuaddieren. Die Lorentz-Eichung setzt zudem die Nebenbedingung  $\partial_{\mu}A^{\mu} = 0$  voraus, was auf die weitere Bedingung:

$$k_{\mu}A^{\mu} = 0$$

führt. Diesen Ansatz nennt man die monochromatische, ebene Welle mit der Kreisfrequenz  $\omega$  und dem Wellenvektor **k**. Diese enthalten die Frequenz  $f = \omega/2\pi$  und die Wellenlänge  $\lambda = 2\pi/|\mathbf{k}|$ . Die Felder erhält man durch (4.9) zu:

$$\mathbf{E} = \mathrm{i}\mathbf{k} A^0 - \mathrm{i}k^0 \mathbf{A}, \qquad \mathbf{B} = \mathrm{i}\mathbf{k} \times \mathbf{A}$$

Unter Verwendung der zyklischen Vertauschbarkeit des Spatproduktes kann man zeigen, dass gilt:

$$\mathbf{E} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{E} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{B} = 0$$

Die Felder  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{B}$  stehen also senkrecht aufeinander und zur Ausbreitungsrichtung. Mit einiger Rechnung kann man zudem zeigen, dass dann gilt:

$$\mathbf{S} = \frac{\omega}{4\pi} \mathbf{k} \, A^{\mu} A_{\mu} \, .$$

Der Wellenvektor gibt also nicht nur die Ausbreitungsrichtung, sondern auch die Energieflussrichtung der Welle vor.

#### Strahlungseichung

Für die Behandlung von Wellen wird häufig eine andere Eichung verwendet, die sog.

**Strahlungseichung:** 
$$\phi = 0$$
, und  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ .

Diese reduziert letzten Endes die 4-dimensionalen Rechnungen von oben auf einen 3dimensionalen Fall, die Beziehungen bleiben aber bestehen. In der Strahlungseichung reduziert sich die Wellengleichung dann auf:

$$\Box \mathbf{A} = \phi = 0.$$

Für  $\phi = 0$  ist die Nebenbedingung  $\partial_{\mu}A^{\mu} = 0$  zudem identisch zu  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ . Daher kann man in den obigen Gleichungen einfach  $A^0 = 0$  setzten, anstatt alles neu auszurechnen. So erhält man zusätzlich:

$$|\mathbf{E}| = |\mathbf{B}| = |\mathbf{k}||\mathbf{A}|,$$

wodurch sich zudem ergibt:

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi\omega} |\mathbf{E}|^2 \mathbf{k} = c \underbrace{\left(\frac{1}{4\pi} |\mathbf{E}|^2\right)}_{=w_{\text{em}}} \mathbf{e}_k.$$

## 4.7.2 Zu komplexen Feldern

Bis dato haben wir immer mit komplexen Feldern gerechnet. Dies ist mathematisch angenehm, da es sich leicht mit der Exponentialfunktion rechnen lässt. Das physikalisch reale Feld ist jedoch stets nur der **Realteil**. Der Realteil einer komplexen Zahl lässt sich stets als die Summe der Zahl und ihrem Komplex-Konjugierten ausdrücken: Re (a) = a + a\*. Da die verwendeten Gleichungen linear sind, ist es erlaubt zunächst die gesamte komplexe Lösung anzusetzen und erst am Ende den Realteil zu betrachten. Relevant wird der Unterschied aber besonders bei der Betrachtung der **gemittelten Energie und Energiestromdichte**. Dazu betrachten wir harmonische Zeitabhängigkeiten (vgl. ebene Welle):

$$\mathbf{a}(\mathbf{r},t) = \mathbf{a}_0(\mathbf{r}) e^{i\omega t}, \qquad \mathbf{b}(\mathbf{r},t) = \mathbf{b}_0(\mathbf{r}) e^{i\omega t}$$

wobei  $\mathbf{a}_0$  und  $\mathbf{b}_0$  durchaus komplex sein können. Daher ist es sinnvoll in Zeitmittlungen über eine Periode, d.h.  $T = 2\pi/\omega$  zu integrieren. Es fällt auf, dass:

$$\int_{t_0}^{t_0+T} e^{2i\omega t} \, dt = 0 \quad \text{und} \quad \int_{t_0}^{t_0+T} e^{i\omega t} e^{-i\omega t} \, dt = T$$

gilt. Daher folgt für die Zeitmittlung der Realteile:

$$\overline{\left(\operatorname{Re}\left(\mathbf{a}\right)\left(t\right)\right)\cdot\operatorname{Re}\left(\mathbf{b}\right)\left(t\right)} = \frac{1}{2}\operatorname{Re}\left(\mathbf{a}_{0}\cdot\mathbf{b}_{0}^{*}\right),$$
$$\overline{\left(\operatorname{Re}\left(\mathbf{a}\right)\left(t\right)\right)\times\operatorname{Re}\left(\mathbf{b}\right)\left(t\right)} = \frac{1}{2}\operatorname{Re}\left(\mathbf{a}_{0}\times\mathbf{b}_{0}^{*}\right).$$

Dabei könnte man auch  $\mathbf{a}_0^*$  verwenden. Daraus folgt, falls alle Felder ebenfalls eine harmonische Zeitabhängigkeit aufweisen:

$$\overline{w} = \frac{1}{16\pi} \operatorname{Re} \left( \mathbf{H}_0 \cdot \mathbf{B}_0 + \mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{D}_0 \right), \quad \overline{\mathbf{S}}(\mathbf{r}, t) = \frac{c}{8\pi} \operatorname{Re} \left( \mathbf{E}_0 \times \mathbf{H}_0^* \right)$$

#### Polarisation einer Welle

Als die Polarisation einer Welle versteht man die Richtung ihres Amplitudenvektors. Wir machen uns dies hier am Beispiel einer monochromatischen Welle, die sich in z-Richtung ausbreitenden Welle deutlich. Deren elektrisches Feld hat die Form:

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} \hat{E}_x \cos(kz - \omega t + \varphi_x) \\ \hat{E}_y \cos(kz - \omega t + \varphi_y) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Man unterscheidet 3 wesentliche Polarisationsformen:

- Lineare Polarisation: Die Amplitude zeigt konstant in die selbe Richtung:  $\varphi_x = \varphi_y$ .
- Elliptische Polarisation: Die Amplitude rotiert mit konstanter Rotationsgeschwindigkeit um die Ausbreitungsrichtung:  $\varphi_x - \varphi_y = \pi/2$ .
- Zirkulare Polarisation: Dies ist ein Spezialfall der elliptischen Polarisation mit  $\hat{E}_x = \hat{E}_y$ . Hier ist eine Besonderheit, dass  $|\mathbf{E}| = \text{const.}$

Überlagerungen verschiedener Polarisationsformen nennt man unpolarisiert. Man kann die zirkulare Polarisation auch sehr komfortabel auf einem unitären Vektorraum, d.h. für diesen Fall mit den beiden komplexen Vektoren:

$$\mathbf{e}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \mathbf{e}_x \pm \mathrm{i} \mathbf{e}_y \right)$$

beschreiben. Dann gilt:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \operatorname{Re}\left(E_0 e^{\mathrm{i}(kz-\omega t)} \mathbf{e}_{\pm}\right) = \frac{E_0}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos(kz-\omega t) \\ \mp \sin(kz-\omega t) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Man kann dies mit den Spin-Einstellungen des Photons vergleichen, welche sich tatsächlich ähnlich darstellen lassen.

## 4.7.3 Allgemeine Lösung

Monochromatische ebene Wellen treten in der Realität nicht auf. Dies kann man sich zum Beispiel dadurch verdeutlichen, dass die Gesamtenergie

$$U = \frac{1}{4\pi} \int |\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)|^2 \,\mathrm{d}V$$

divergiert, da eine solche Welle den gesamten Raum ausfüllt. Eine reale Lösung der Wellengleichung erhält man durch **Überlagerung** der ebenen Wellen. Diese bilden ein kontinuierliches VONS, sodass jede reale Lösung nach ihnen entwickelt werden kann. Man betrachtet zudem nur die Realteile der Lösungen, da Imaginäre Felder ebenfalls keine physikalische Realität besitzen. Insgesamt also:

$$A^{\mu}(\mathbf{r},t) = \operatorname{Re}\left(\int \mathrm{d}^{3}k \,\left(A_{1}^{\mu}(\mathbf{k})\,e^{\mathrm{i}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + A_{2}^{\mu}(\mathbf{k})\,e^{-\mathrm{i}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}\right)\right), \quad \omega = c|k|\,. \tag{4.18}$$

Die Amplituden  $A_i^{\mu}$  nennt man in diesem Zusammenhang auch **Wellenpaket**, da durch sie vorgegeben wird, welche möglichen **k**-Vektoren in der Welle auftreten. Man überprüft leicht, dass diese Form die Wellengleichung löst.

## 4.7.4 Gruppengeschwindigkeit

Im Falle einer monochromatische, ebnen Welle breiten sich Flächen gleicher Phase mit der

Phasengeschwindigkeit: 
$$v_{\rm ph} = rac{\omega}{k}$$

aus. Dies sieht man daran, dass für Flächen gleicher Phase gilt:  $\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = \text{const.}$ . Im Vakuum ist diese Phasengeschwindigkeit gleich der Lichtgeschwindigkeit c. Tatsächlich gibt es aber noch eine weitere Interessante Geschwindigkeit, die etwas über die Fortpflanzung eines Wellenpaketes aussagt. Dazu betrachten wir eine allgemeine Lösung (hier exemplarisch ein einzelner Summand in einer Dimension):

$$A(x,t) = \int \mathrm{d}k \, A_0(k) e^{\mathrm{i}(kx - \omega t)}$$

 $A_0(k)$  könnte hier beispielsweise eine Gaußglocke sein. Eine Taylorentwicklung von  $\omega$  um ein  $k_0$  führt zu:

$$\omega \approx \omega(k_0) + \underbrace{\frac{\partial \omega}{\partial k}}_{:=v_{\rm gr}} (k - k_0) + \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2}}_{:=\beta} (k - k_0)^2 + \mathcal{O}\left((k - k_0)^3\right)$$

Eingesetzt liefert dies in erster Ordnung:

$$A(x,t) = e^{i(k_0 v_{\rm gr} - \omega_0)t} \int \mathrm{d}k \, A(k) e^{i(k(x - v_{\rm gr}t))}$$
$$= e^{i(k_0 v_g - \omega_0)t} A(x - v_{\rm gr}t, 0)$$

Ein Wellenpaket bewegt sich also in erster Näherung unter Beibehaltung seiner Form mit der

**Gruppengeschwindigkeit:** 
$$v_{\rm gr} = \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{k_0}$$

fort. Der quadratische Koeffizient wird auch als **Dispersionskoeffizient**  $\beta$  bezeichnet und sorgt für ein Verformen des Wellenpaktes mit der Zeit. Für Lichtwellen im Vakuum ist immer  $\omega = kc$ . Das heißt es existierten keine höheren Terme und das Wellenpaket verformt sich nicht, verhält sich sogar exakt wie in der obigen Rechnung. Im Medium kann sich dies durch die, von der Wellenlänge abhängige Lichtgeschwindigkeit  $c' = n(\lambda)c$  jedoch ändern, wie sich unten zeigen wird. Allgemein sagt man, dass im Falle  $v_{\rm ph} \neq v_{\rm gr}$  **Dispersion** vorliegt. Für Masse-behaftete Teilchen der nichtrelativistischen Quantenmechanik gilt beispielsweise:

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \Rightarrow \quad v_{\rm gr} = \frac{\hbar k}{m} = v_{\rm kl} \,.$$

Hier liegt auch im Vakuum Dispersion vor. Eine schöne Animation um den Unterschied zwischen Gruppen und Phasengeschwindigkeit zu verdeutlichen findet man bei Wikipedia. Die Phasengeschwindigkeit kann allgemein sogar **größer als die Lichtgeschwindigkeit** sein. Dies steht aber nicht in Konflikt mit der speziellen Relativitätstheorie, da die Ausbreitung von Quanten oder auch Information mit der Gruppengeschwindigkeit erfolgt.

## 4.7.5 Hohlraumresonator

Wir betrachten nun bestimmte sog. **stationäre** Lösungen der Wellengleichung in Strahlungseichung:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \mathbf{A}^0(\mathbf{r}) \exp(\mathrm{i}\omega t)$$
.

Eine solche Lösung nennt man stationär, da hier das räumliche Profil  $\mathbf{A}_0(\mathbf{r})$  von der zeitlichen Modulation abgekoppelt ist. Die Wellengleichung wird mit Nebenbedingung den Nebenbedingungen  $\nabla \cdot \mathbf{A} = k - \omega/c = 0$  dadurch zur:

Helmholtz-Gleichung:  $\Delta \mathbf{A} + k^2 \mathbf{A} = 0$ .

Wir betrachten nun ein kartesisches Koordinatensystem in welchem diese Gleichung komponentenweise  $\Delta A_m^0 + k^2 A_m^0 = 0$  lautet. Betrachtet man anstatt der Komponenten  $A_m^0$ die Variablen  $\psi_m = \partial_m A_m^0$  so vereinfacht sich die Nebenbedingung auf eine algebraische Gleichung und die  $\psi_m$  erfüllen trotzdem die Helmholtzgleichung (Vertauschung der Ableitungen):

$$\Delta \psi_m + k^2 \psi_m = 0 \,, \qquad \sum_m \psi_m = 0 \,.$$

Die einzelnen Gleichungen für die  $\psi_m$  kann man durch den kartesischen Separationsansatz

$$\psi(\mathbf{r}) = \prod_i X_i(x_i)$$

auf die Gleichungen:

$$\frac{X_i''(x_i)}{X_i} = -k_i^2 \quad \text{mit} \quad k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} = \sum_i k_i^2$$

zurückführen. Die Lösungen dieser Gleichung sind bekannt:

$$X_i(x_i) = c_i \sin(k_i x_i + \alpha_i), \quad c_i, \alpha_i = \text{const.} \in \mathbb{R}.$$

Aufgrund der algebraischen Nebenbedingung müssen alle  $\psi_m$  dieselbe funktionale Abhängigkeit von den Koordinaten haben nur die Amplituden  $C_m = (c_1 c_2 c_3)_m$  dürfen sich unterscheiden erfüllen aber:

$$\sum_{m} C_{m} = 0$$

Da jeweils eine Funktion  $\psi_x$  integriert werden muss folgt für das elektrische Feld:

$$\mathbf{E}(\mathbf{x},t) = \begin{pmatrix} \hat{E}_1 \cos(k_1 x_1 + \alpha_1) \sin(k_2 x_2 + \alpha_2) \sin(k_3 x_3 + \alpha_3) \\ \hat{E}_2 \sin(k_1 x_1 + \alpha_1) \cos(k_2 x_2 + \alpha_2) \sin(k_3 x_3 + \alpha_3) \\ \hat{E}_3 \sin(k_1 x_1 + \alpha_1) \sin(k_2 x_2 + \alpha_2) \cos(k_3 x_3 + \alpha_3) \end{pmatrix} e^{-i\omega t}$$

 $\operatorname{mit}$ 

$$\hat{E}_{=} - \mathrm{i}k\frac{C_m}{k_m}, \quad \Rightarrow \quad \sum k_m \hat{E}_m = 0$$

Für die 3 beliebigen  $E_m$  gibt es also eine Bestimmungsgleichung für gegebenes  $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3)$ , d.h. 2 freie Möglichkeiten. Dies sind die beiden **Polarisationsrichtungen**.

Nun betrachten wird das Problem in einem quaderförmigen leitenden Hohlraum. Hier müssen die **Tangentialkomponenten** von **E** in den Wänden und somit aufgrund der Stetigkeitsbedingung auch direkt davor, verschwinden. Dies führt auf die Nebenbedingungen:

$$\begin{aligned} x_1 &= 0, x_1 = L_1 : & E_2 = E_3 = 0 , \\ x_2 &= 0, x_2 = L_2 : & E_1 = E_3 = 0 , \\ x_3 &= 0, x_3 = L_3 : & E_1 = E_2 = 0 . \end{aligned}$$

Dadurch werden die Konstanten  $\alpha_i$ , sowie  $k_i$  genauer festgelegt:

$$\alpha_i = 0, \qquad k_i L_i = n_i \pi, \quad n_i \in \mathbb{N}.$$

Daraus folgt für die Frequenz:

$$\omega = c\pi \sqrt{\left(\frac{n_1}{L_1}\right)^2 + \left(\frac{n_2}{L_2}\right)^2 + \left(\frac{n_3}{L_3}\right)^2}.$$

# 4.8 Elektromagnetische Wellen im Medium

Wir können hier leider nicht die bereits bestimmten Potenzialgleichungen verwenden, da diese nur für das Vakuum gültig sind. Daher müssen wir die Wellengleichung neu herleiten. Wir betrachten direkt die Maxwell-Gleichungen 2 und 4. Im Allgemeinen lassen sich diese beiden Gleichungen nur schlecht vereinen, daher betrachten wir folgende Spezialfälle:

## 4.8.1 Homogenes, nichtleitendes Medium

In einem homogenen, nichtleitenden ( $\mathbf{j} = 0$ ), ungeladenen ( $\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi \rho = 0$ ) Medium sind  $\epsilon$ und  $\mu$  nicht ortsabhängig. Dadurch kann man sie beliebig durch die Differenzialoperatoren ziehen. Durch bilden der Rotation der 4. Maxwell-Gleichung und einsetzten der 2. erhält man die Gleichung:

$$\Delta \mathbf{E} - \frac{\epsilon \mu}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E} = 0.$$

Die Welle breitet sich also genauso aus wie im Vakuum, hat nun aber die veränderte Phasengeschwindigkeit

Phasengeschwindigkeit im Medium: 
$$u = \frac{c}{\sqrt{\epsilon(\omega)\mu(\omega)}}$$
.

Die Konstanten können von der Wellenlänge abhängen, d.h. u.U liegt **Dispersion** vor. Man führt hier eine neue Größe, den

**Brechungsindex** 
$$n$$
:  $u := \frac{c}{n(\omega)}$ 

ein. Für den Wellenvektor gilt dann:

$$k = \frac{\omega}{u} = \frac{\omega n}{c} = k_0 n \,.$$

## 4.8.2 Leitfähiges, homogenes Medium

In einem leitfähigen Medium kann die Stromdichte **j** nicht mehr vernachlässigt werden. In der Näherung der linearen Response ( $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ , was dem Ohmschen Gesetz entspricht) erhält man jedoch unter demselben Ansatz wie oben die Gleichung:

$$\Delta \mathbf{E} = \frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{E} + \frac{4\pi\sigma}{c^2} \mathbf{E} \cdot$$

Hierbei wurde  $\mu \approx 1$  genähert, da für die meisten Materialien  $\epsilon$  ausschlaggebend ist. Wendet man hier ebenfalls den Ansatz einer monochromatischen, ebenen Welle, so erhält man für k die Bedingung:

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left( \epsilon + 4\pi \frac{\sigma}{\mathrm{i}\omega} \right) \,.$$

Der Brechungsindex lautet also:

$$n^2 = \epsilon + 4\pi \frac{\sigma}{\mathrm{i}\omega}$$

und ist somit **komplex**. Man teilt ihn häufig in Real- und Imaginärteil mit den Bezeichnungen:

komplexer Brechungsindex: 
$$n = n' + i\kappa$$
.

Dadurch ergibt sich für die Welle im Medium die Form:

$$\mathbf{E}(z,t) = \mathbf{E}_0 \exp\left[i\left(k_0n' - \omega t\right)\right] \exp\left(-\kappa k_0 z\right)$$

Die Phasengeschwindigkeit wird also durch den Realteil des Brechungsindizes bestimmt. Zusätzlich gibt es eine exponentielle Abschwächung der Welle, sodass der Energiefluss betragsmäßig  $\propto \exp(-2\kappa k_0 z)$  sinkt. Daher nennt man  $A = 2\kappa k_0$  auch den **Abschwächungskoeffizient**.

## 4.8.3 Lorentz-Modell

Zuletzt betrachten wir ein homogenes Medium, das nichtleitend ist, dessen Atome und Moleküle aber zu Schwingungen angeregt werden können. In erster Näherung betrachten wir diese Schwingung als **harmonisch**:

$$\ddot{\mathbf{d}} + \omega_0^2 \mathbf{d} = \frac{q^2}{m} \mathbf{E} \,. \tag{4.19}$$

Dies nennt man auch das Lorentz-Modell. Eine spezielle Lösung, die vom äußeren Feld abhängt lautet, wieder für den Fall einer monochromatischen, ebenen Welle mit Frequenz  $\omega$ :

$$\mathbf{d} = \alpha(\omega)\mathbf{E}(t)$$
, mit  $\alpha(\omega) = \frac{q^2/m}{\omega_0^2 - \omega^2}$ .

Tatsächlich ist  $\alpha$  die Polarisierbarkeit der Teilchen und die Polarisation ergibt sich durch  $\mathbf{P} = n\mathbf{d}$  mit der Teilchendichte *n*. Setzt man diese Polarisation nun in den Maxwell-Gleichungen bei **D** ein, so erhält man durch analoges vorgehen wie oben:

$$n^2 = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2}$$
, mit  $\omega_p^2 = \frac{4\pi q^2 n}{m}$ .

Man nennt  $\omega_p$  auch die **Plasmafrequenz**. Man kann zusätzlich einen **Dämpfungsterm**  $-2\gamma \dot{\mathbf{d}}$  in (4.19) berücksichtigen, der die Polarisierbarkeit verändert und man erhält:

$$n^2 = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 + \mathrm{i}\gamma\omega}$$

Eine Dämpfung der Schwingung der Teilchen des Mediums führt also erneut zu einem komplexen Brechungsindex und somit zu einer Abschwächung des Energieflusses.

## 4.8.4 Brechung und Reflexion

Zur Bestimmung der Brechungseigenschaften einer elektromagnetischen Welle an der ebenen Grenzfläche zwischen zwei Medien mit Brechungsindex  $n_1$  und  $n_2$  verwendet man die bekannten Stetigkeits- und Sprungbedingungen für **D** und **E**. Man setzt zur Lösung der Wellengleichung in den verschiedenen Teilräumen jeweils Monochromatische Wellen mit entsprechendem Wellenvektor (d.h. entsprechender Phasengeschwindigkeit) an:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-\mathrm{i}\omega t} \begin{cases} \exp(\mathrm{i}\mathbf{k}_e \cdot \mathbf{r}) + r \exp(-\mathrm{i}\mathbf{k}_r \cdot \mathbf{r}) & \text{im Medium } n_1 \\ t \exp(\mathrm{i}\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}) & \text{im Medium } n_2 \end{cases}$$

an. Dabei ist die Bedeutung der Konstanten r und t aus der Anschauung heraus gegeben: r bezeichnet den reflektierten, t den transmittierten Anteil der Welle. Die Frequenz der Welle muss dabei in allen Bereichen die gleiche bleiben (Energie der Photonen bleibt gleich). Es ergibt sich, dass  $\mathbf{k}_e$ ,  $\mathbf{k}_r$  und  $\mathbf{k}_t$  in einer gemeinsamen Ebene, der **Einfallsebene** liegen. Durch das Lösen dieses Systems erhält man Beziehungen für den Winkel zwischen den Wellenvektoren, die man als das

Snellius'sches Brechungsgesetz:  $\frac{n_2}{n_1} = \frac{\sin \alpha}{\sin \beta}$ ,  $\alpha = \alpha'$ .

kennt. Dabei bezeichnet  $\alpha$  den Einfallswinkel,  $\alpha'$  den Reflexionswinkel und  $\beta$  den Transmissionswinkel zum Lot. Die Gleichungen für r und t hängen von der Ausrichtung der Welle ab: Für den Anteil des elektrischen Feldes parallel zur Einfallsebene gilt:

$$r_p = \frac{\tan(\alpha - \beta)}{\tan(\alpha + \beta)}, \qquad t_p = \frac{2\cos(\alpha)\sin(\beta)}{\sin(\alpha + \beta)\cos(\alpha - \beta)}$$

und für den Anteil senkrecht zur Einfallsebene:

$$r_s = \frac{\sin(\alpha - \beta)}{\sin(\alpha + \beta)}, \qquad t_s = \frac{2\cos(\alpha)\sin(\beta)}{\sin(\alpha + \beta)}.$$

Man nennt dies auch die Fesnel'schen Formeln.

# 4.9 Inhomogene Wellengleichung

## 4.9.1 Retardierte Potenziale

Im Vakuum führen die Maxwell Gleichungen unter Lorentz-Eichung (4.16) auf die kovariante Gleichung (4.17). Diese gilt es nun zu lösen. Die Allgemeine Lösung der homogenen Gleichung ist durch (4.18) gegeben. Wir stellen nun zunächst  $A^{\mu}(x^{\alpha})$  und  $j^{\mu}(x^{\alpha})$  als Fouriertransformation dar:

$$A^{\mu}(x^{\alpha}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}\omega \, A^{\mu}_{\omega}(\mathbf{r}) \, e^{-\mathrm{i}\omega t}$$

und analog für  $j^{\mu}(x^{\alpha})$ . Dann setzten wir dies in die inhomogene Wellengleichung ein und erhalten:

$$(\Delta + k^2) A^{\mu}_{\omega}(\mathbf{r}) = -4\pi j^{\mu}_{\omega}(\mathbf{r}) \quad \text{mit} \quad k = \frac{\omega}{c}.$$

Tatsächlich findet man, dass der Differenzial operator  $\mathcal{L} := \Delta + k^2$  die folgende Green'sche Funktion besitzt:

$$G_{\mathcal{L}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp(\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

Dies kann man mit der bekannten Green'schen Funktion des Laplace Operators durch Einsetzten zeigen. Mit dieser Green'schen Funktion kann man nun eine Lösung für  $A^{\mu}_{\omega}(\mathbf{r})$  angeben:

$$A^{\mu}_{\omega}(\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}^3 r \, j^{\mu}_{\omega}(\mathbf{r}) \frac{\exp(\pm \mathrm{i}k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \,.$$

Die Rücktransformation führt auf die

**Retardierte Potenziale:** 
$$A^{\mu}(t, \mathbf{r}) = \frac{1}{c} \int d^3 r' \frac{j^{\mu}(\mathbf{r}', t')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$
 (4.20)

wobei gilt:

Retardierte Zeit: 
$$t' = t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'(t')|}{c} := t - \frac{\mathbf{R}(t')}{c}$$

Hierbei ist **r** der Ort, an dem das Potenzial zur Zeit **t** den Wert  $A^{\mu}(\mathbf{r}, t)$  hat. Dazu tragen aber die Anteile von  $j^{\mu}(\mathbf{r}, t)$  zur Zeit t' bei, da die **endliche Ausbreitungsgeschwindigkeit der Wechselwirkung** hier erfüllt ist. Dabei ist  $\mathbf{r}'(t')$  der Ort der Ladungsdichte zur Zeit t', der eben dann genau zu  $A^{\mu}(\mathbf{r}, t)$  beitragen kann.

Es gibt auch sog. **avencierten Potenziale**, in welchen die Zeit mit t'' = t + R/c transformiert. Man muss die korrekte Lösungen je nach kausalem Zusammenhang auswählen.

## 4.9.2 Liénard-Wiechert-Potenziale

Für die Strom- und Ladungsdichte einer Punktladung, die sich entlang einer Bahnkurve  $\mathbf{r}_0(t)$  mit  $\mathbf{v}_0(t)$  bewegt gilt offenbar:

$$\varrho(\mathbf{r},t) = q\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0(t)), \qquad \mathbf{j}(\mathbf{r},t) = q\mathbf{v}_0(t)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0(t)),$$

Die Retardierung lassen wir nun von einer  $\delta$ -Distribution durchführen und ziehen die Integration nach  $d^3r'$  vor. Dann erhalten wir:

$$A^{\mu} = \frac{1}{c} \int \mathrm{d}^3 r' \int \mathrm{d}s \, \frac{j^{\mu}(\mathbf{r}',s)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \delta\left(s - (t - R(t')/c)\right)$$
$$= \frac{q}{c} \int \mathrm{d}s \, \frac{(c,\mathbf{v}_0(s))}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0(s)|} \delta\left(s - (t - R(t')/c)\right) \,.$$

Daraus folgen mithilfe der Rechenregel für  $\delta(h(x))$  die Liénard-Wiecher-Potenziale:

$$\phi(\mathbf{r},t) = \frac{q}{R(t') - \frac{\mathbf{v}_0(t') \cdot \mathbf{R}(t')}{c}}, \qquad \mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \frac{q}{c} \frac{\mathbf{v}_0(t')}{R(t') - \frac{\mathbf{v}_0(t') \cdot \mathbf{R}(t')}{c}}.$$

Hier werden die alle Größen auf der rechten Seite zur retardierten Zeit t' ausgewertet. Eine alternative Herleitung betrachtet das Feld einer unbewegten Punktladung in einem Koordinatensystem, welches gerade mit  $\mathbf{v}_0$  mitbewegt ist. Dort gilt die gewohnte Beziehung:

$$\phi = \frac{q}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \,.$$

Mithilfe der 4er-Geschwindigkeit und dem neu definierten 4er Vektor:  $R^{\beta} = (R, \mathbf{R})$ , lässt sich dies für das konkrete Koordinatensystem in die Form:

Liénard-Wiechert-Potenzial: 
$$A^{\mu}(\mathbf{r},t) = rac{q \ u^{\mu}(t')}{u^{\beta}R_{\beta}(t')}$$

bringen. Da diese kovariant ist haben wir damit die Form der Potenziale in allen Inertialsystemen gefunden. Diese Darstellung ist äquivalent zu der obigen.

## 4.9.3 Dipolstrahlung

Wir wollen nun die retardierten Potenziale verwenden, um die Strahlung einer Oszillierenden Ladungsverteilung zu bestimmen. Dafür trennen wir den räumlichen Anteil in der Form:

$$j^{\mu}(\mathbf{r},t) = \operatorname{Re}\left(j^{\mu}(\mathbf{r}) e^{-\mathrm{i}\omega t}\right)$$

Das Re (·)-Symbol werden wir im Folgenden erst einmal weg lassen und erst bei der Betrachtung der realen Felder wieder anfügen. Zudem gehen wir davon aus, dass die Stromdichte auf einen endlichen Bereich  $R_0$  begrenzt ist. Wir verwenden nun die Strahlungseichung, sodass wir nur betrachten:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{c} \int \mathrm{d}^3 r' \, \mathbf{j}(\mathbf{r}') \frac{\exp\left(\mathrm{i}(k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|-\omega t)\right)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} := \mathbf{A}(\mathbf{r}) \exp\left(-\mathrm{i}\omega t\right),$$

wobei  $k = \omega/c$ . Wir wollen nun das **Fernfeld** betrachten, daher machen wir die Näherung:

$$R_0 << \lambda << r \,,$$

wobei  $\lambda = 2\pi/k = 2\pi c/\omega$  ist. Dies schränkt die Ladungsverteilung auf einen kleinen Ort und zudem die maximal zulässige Oszillationsgeschwindigkeit auf  $v_{\max} \ll c$  ein. Nun entwickeln wir

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = r - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r} + \mathcal{O}\left(r'/r\right) \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{r} \left(1 + \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r} + \mathcal{O}\left((r'/r)^2\right)\right).$$

Daraus folgt zudem:

$$\exp(\mathbf{i}k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = e^{\mathbf{i}kr}e^{-\mathbf{i}k\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'/r}\left(1 + \mathcal{O}(r'/r)\right)$$

Da auch  $\lambda >> r'$  sein soll kann man den zweiten Faktor direkt auf 1 setzen (Langwellennäherung). Dann folgt:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} \frac{\exp(\mathrm{i}kr)}{r} \int \mathrm{d}^3 r' \, \mathbf{j}(\mathbf{r}') \,.$$

Das Integral kann man unter Verwendung der harmonischen Zeitabhängigkeit unter partieller Integration durch das Dipolmoment ersetzten wodurch wir erhalten:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = -\mathrm{i}k\mathbf{p}\frac{e^{\mathrm{i}kr}}{r}e^{-\mathrm{i}\omega t}$$

Hierbei handelt es sich um eine **auslaufende Kugelwelle**. Im Gegensatz zu ebenen Wellen ist diese ein physikalisch realistischer Zustand, da ihre Intensität in Übereinstimmung mit der Energieerhaltung abnimmt. Aufgrund der Rotationssymmetrie kann der Nabla-Operator hier alleine durch die Ableitung nach  $\mathbf{r}$  ausgedrückt werden. Erneut in den obigen Näherungen erhält man für die Felder:

$$\mathbf{B}(\mathbf{r},t) = k^2(\mathbf{e}_r \times \mathbf{p}) \frac{e^{i(kr-\omega t)}}{r}, \qquad \mathbf{E}(\mathbf{r},t) = k^2(\mathbf{e}_r \times \mathbf{p}) \times \mathbf{e}_r \frac{e^{i(kr-\omega t)}}{r}$$

Das verhalten der Felder Wir wollen nun die Leistung die in ein bestimmtes Raumwinkelelement d $\Omega$  abgestrahlt wird bestimmen. Dazu verwenden wir:

$$P_{\Omega} = \int_{\Omega} \mathbf{S} \cdot r^2 \mathbf{e}_r \, \mathrm{d}\Omega \, .$$

Unter einiger Rechnerei mit den Kreuzprodukten folgt unter der Annahme eines reellen **p**:

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{\omega^4}{8\pi c^3} |\mathbf{p}|^2 \sin^2\theta \,.$$

Dabei ist  $\theta$  der Winkel zwischen **p** und **e**<sub>r</sub>. Ein oszillierender Dipol strahlt also offenbar nur senkrecht zu seiner Schwingungsrichtung.

# Kapitel 5

# Quantenmechanik

## Zur Notation

Operatoren werden bei der Behandlung ihrer rein mathematischen Eigenschaften mit  $\mathbf{A}$ und im physikalischen Kontext mit  $\hat{A}$ , bzw. bei Vektoroperatoren  $\hat{\mathbf{A}}$  bezeichnet. Einige Operatoren, wie die z.B. Permutation und die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren werden ohne besondere Notation verwendet, um nicht von dem Hauptteil der Literatur abzuweichen.

# 5.1 Einführung: Grenzen der klassischen Physik

In der Entwicklung der Physik im ausgehenden 19ten und beginnenden 20ten Jahrhundert traten mehr und mehr Phänomene und Effekte auf, die man mit den klassischen Theorien (insb. Elektrodynamik und newtonsche Mechanik) nicht mehr erklären konnte. Auf der einen Seite führte dies zur Entwicklung der Relativitätstheorie auf der anderen Seite zur Formulierung der Quantenmechanik. Im Wesentlichen löst die Theorie der Quantenmechanik das Paradoxon, dass Teilchen mal als Welle und mal als diskrete Energie/Masse-Pakete angesehen werden *müssen* um das Ergebnis von Experimenten zu deuten. Analog müssen (Licht-) Wellen mal als "echte" Wellen im Hugens' und Maxwell'schen Sinne Betrachtet werden und mal als Teilchen in diskreten Energiepaketen. Als Beispiele für Experimente bzw. Effekte, die sich nur im "Teilchenbild" deuten lassen, seien hier die Schwarzkörperstrahlung, der photoelektrische und der Compton-Effekt genannt. Gleichzeitig erfordert besonders das Doppelspaltexperiment eine Deutung im Wellenbild. Zusätzlich ist die Stabilität von Atomen nicht im reinen Teilchenbild erklärbar. Die Begriffe Teilchen- und Wellenbild können missverständlich sein. Tatsächlich gibt es so etwas wie "reine" Teilchen oder Wellen nicht.

## 5.1.1 Schwarzkörperstrahlung

Im frühen 20ten Jahrhundert stellte man fest, dass mittels der klassischen Thermo- und Elektrodynamik die Strahlung eines perfekt absorbierenden schwarzen Körpers der Temperatur T nicht schlüssig erklärt werden konnte. Die klassische Betrachtung, das Rayleigh-Jeans-Gesetz, führte zur sog. **Ultraviolettkatastrophe**, da die Gleichungen eine unendliche Strahlungsleistung im Bereich kleiner Wellenlängen vorhersagten (Ex. III). Auch das empirische Stefan-Boltzmann-Gesetz, welches aus den Gleichungen hätte folgen sollen, konnte man nicht erklären. Max Planck löste dieses Problem, indem er annahm, dass
Elektromagnetische Strahlung auch als diskrete Energiepakete "Teilchen" der Energie

$$E = hf := \hbar \,\omega \tag{5.1}$$

betrachtet werden kann.  $h = 6.62 \cdot 10^{-34}$  Js  $= 4.14 \cdot 10^{-15}$  eVs ist hierbei das **Planck'sche** Wirkungsquantum. Die Definition  $\hbar = h/2\pi$  ist lediglich eine Abkürzung.

## 5.1.2 Doppelspaltexperiment

In der Optik deckte sich das Doppelspaltexperiment, bzw. die sich ergebende Intensitätsverteilung exakt mit der Erwartung, da Licht ja ohnehin als Welle im klassischen Sinne betrachtet wurde. Führt man denselben Versuch aber mit einem Elektronenstrahl durch erhält man analoge Ergebnisse, die nicht mit dem Teilchenbild der Elektronen vereinbar sind. Insbesondere bleibt das Interferenzbild unverändert, wenn man die Intensität so lange reduziert, dass von einzelnen Elektronen, die auf den Spalt treffen, ausgegangen werden kann. Dadurch wird eine Erklärung durch Wechselwirkung der Elektronen untereinander ausgeschlossen. Allgemein kann dieses Phänomen für Teilchen gedeutet werden, denen man eine sog. **de-Broglie-Wellenlänge** zuordnet:

$$\lambda = \frac{h}{p} \,, \tag{5.2}$$

Analog zur Energie kann man auch diese Gleichung in Beziehung zu einer anderen für die Wellentheorie wichtigen Größe setzten, was im Folgenden eine Rolle spielen wird:

$$\mathbf{p} = \hbar \, \mathbf{k} \,. \tag{5.3}$$

## 5.1.3 Stern-Gerlach Versuch I

Beim Stern-Gerlach Versuch wird ein Strahl aus Atomen mit magnetischem Moment  $\mu$ durch ein Magnetfeld geleitet. Damit die Atome hierbei auch eine Kraft erfahren ist das Magnetfeld bewusst nicht einfach homogen, sondern weist (vorzugsweise in eine bestimmte Richtung) einen Gradienten auf. Klassisch würde man erwarten, dass das magnetische Moment statistisch (je nach zufälliger Drehung des Atoms) auf einem Kreis mit Radius  $|\mu|$ verteilt ist und somit ein breiter Fleck auf dem Detektorschirm auftreten würde. Tatsächlich konzentriert sich die Verteilung aber an Orten, die zu einem diskreten magnetischen Moment  $\mu_0$ , bzw.  $-\mu_0$  gehören. Anscheinend ist also auch das **magnetische Moment quantisiert**.

Der Stern-Gerlach Versuch verdeutlicht aber noch eine weitere Eigenschaft des magnetischen Momentes. Filtert man aus dem Atomstrahl einen der sich ergebenden Teilstrahlen heraus, so würde man erwarten, dass wenn man ihn erneut durch einen identischen Stern-Gerlach-Apparat (SG) führt, weiterhin nur ein Strahl, z.B. der zur Region um  $\mu_0$ , existiert, und nicht plötzlich wieder Atome ein magnetisches Moment in der Region  $-\mu_0$ besitzen. Tatsächlich trifft dies auch zu. Schaltet man aber einen dritten SG zwischen die beiden Ursprünglichen, der eine andere Vorzugsrichtung aufweist, so ergibt sich tatsächlich nach Durchlaufen aller SG wieder ein Strahl in der magnetischen-Moment Region die vorher ausgefiltert wurde. Auch diese "Wiederbelebung" des ausgefilterten Strahles ist mit klassischen Methoden nicht zu erklären. Es fällt allerdings eine große Ähnlichkeit zum Phänomen der **Polarisation** von elektromagnetischen Wellen auf.

# 5.2 Unitäre Räume

In der Quantenmechanik sind komplexe Vektorräume von zentraler Bedeutung. Daher hier noch einmal eine Zusammenfassung der wichtigsten Konzepte.

Eine Menge V zusammen mit einer Verknüpfung  $\oplus : V \times V \to V$  (Addition) und einer Verknüpfung  $\odot : K \times V \to V$  (Multiplikation), bezeichnet man als **Vektorraum über dem Körper** K, wenn gilt:

A: Für die Addition gilt: Assoziativgesetz, Kommutativgesetz, Existenz eines neutralen und eines Inversen Elementes

M: Für die Multiplikation gilt:

$$\begin{aligned} \alpha \odot (u \oplus v) &= (\alpha \odot u) \oplus (\alpha \odot v) \,, \\ (\alpha + \beta) \odot v &= (\alpha \odot v) \oplus (\beta \odot v) \,, \\ (\alpha \cdot \beta) \odot v &= \alpha \odot (\beta \odot v) \,, \end{aligned}$$

sowie Existenz eines Neutralen Elementes<sup>1</sup>

Wir bezeichnen im Folgenden der Einfachheit halber  $\mathcal{H}$  als den komplexen Vektorraum, mit gewohnter Addition und Multiplikation mit Elementen aus  $\mathbb{C}$ . Die Elemente von  $\mathcal{H}$  bezeichnen wir mit  $|a\rangle$ ,  $|b\rangle$ , ... (sprech: "ket"-Vektor). Einen komplexen Vektorraum mit einem Skalarprodukt nennt man unitär. Dieses muss die folgenden Eigenschaften erfüllen:

- (i)  $\langle a | b \rangle = \langle b | a \rangle^*$
- (*ii*)  $\langle a | a \rangle \geq 0$ , wobei die Gleichheit genau dann gilt, wenn  $|a\rangle = 0$ . Hierbei stellt (*i*) sicher, dass  $\langle a | a \rangle \in \mathbb{R}$ .
- (*iii*)  $\langle a | \lambda b + c \rangle = \lambda \langle a | b \rangle + \langle a | c \rangle$ ,  $\lambda \in \mathbb{C}$  (Linearität im zweiten Argument)

Hierbei ist  $a^*$  das komplex konjugierte zu a. Aus (i) und (iii) folgt sofort, dass das Skalarprodukt *antilinear* im ersten Argument ist, in dem Sinne, dass:

$$\langle \lambda b + c | a \rangle = \lambda^* \langle b | a \rangle + \langle c | a \rangle.$$
(5.4)

Wie gewohnt wird  $||a|| := \sqrt{\langle a | a \rangle} \geq 0$  als die Norm (Länge) des Vektors bezeichnet. Wenn  $|a\rangle$  Element eines Vektorraumes  $\mathcal{H}$  ist und eine Orthonormalbasis  $\{|e_i\rangle\}_{i\in\mathbb{N}}$  zu diesem Raum existiert<sup>2</sup>, dann kann man den Vektor  $|a\rangle$  als Linearkombination der  $|e_i\rangle$  darstellen:

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^{N} a_i |e_i\rangle, \qquad a_i = \langle e_i |a\rangle$$
(5.5)

Sind zwei Vektoren in der gleichen Basis gegeben so folgt aus den Definitionsgleichungen für das Skalarprodukt und der Orthonormierung:

$$\langle a | b \rangle = \sum_{j=1}^{N} a_j^* b_j \tag{5.6}$$

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Insbesondere wird *nicht* die Existenz eines inversen Elementes gefordert.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Zur Erinnerung: Eine Orthonormalbasis erfüllt:  $\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij}$  und ist vollständig.

Es fällt natürlich auf, dass all diese Definitionen und Eigenschaften sich, bis auf die komplexe Konjugation an einigen Stellen, nicht von der Definition für gewöhnliche  $\mathbb{R}$ -Vektorräume unterscheiden. Trotzdem ist es spätestens bei der Einführung des Hilbertraumes hilfreich über eine neue, praktische Notation und entsprechenden Formalismus zu verfügen.

# 5.2.1 Der Duale Raum

Betrachten wir  $\mathbb{C}$ -lineare<sup>3</sup> Funktionen  $\varphi : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ . Diese sind aufgrund ihrer Linearität durch ihre Wirkung auf alle Basisvektoren  $|e_i\rangle$  eindeutig gegeben. Gilt beispielsweise  $\varphi(|e_j\rangle) = f_i$ , so folgt offenbar  $\varphi(|a\rangle) = \sum a_i f_i$ . Nun ist die Summe zweier linearer Funktionen<sup>4</sup> wieder eine lineare Funktion und man kann die **Gesamtheit aller linearen und beschränkten Funktionen** auf  $\mathcal{H}$  selbst mit einem Vektorraum, den man den **dualen Raum**  $\mathcal{H}^*$  nennt, identifizieren. Dieser Raum hat ebensoviele Dimensionen wie  $\mathcal{H}$  selbst. Die Wirkung von  $\varphi = \sum f_i \varphi^{\{|e_i\rangle\}}$  (dargestellt in der Basis  $|e_i\rangle$ ) lässt sich offenbar durch das Skalarprodukt von  $|\varphi\rangle := \sum f_i^* |e_i\rangle$  mit  $|a\rangle$  schreiben. Allgemein gilt der **Rieszsche Darstellungsatz:** 

**Rieszscher Darstellungssatz:** Sei  $\mathcal{H}$  ein Hilbertraum (wird später genauer erläutert) und  $\varphi \in \mathcal{H}^*$ . Dann existiert ein eindeutiges Element  $|y_{\varphi}\rangle$  des  $\mathcal{H}$ , sodass gilt:

$$\varphi(|x\rangle) = \langle y_{\varphi} \, |x\rangle$$

Allgemein können wir somit dem zu  $|a\rangle$  umgekehrten Objekt  $\langle a|$  ebenfalls eine Bedeutung zuordnen. Man bezeichnet  $\langle \cdot |$  auch als einen **bra**-Vektor:

$$|a\rangle = \sum \lambda_i |a_i\rangle \in \mathcal{H} \quad \leftrightarrow \quad \langle a| = \sum \lambda_i^* \langle a_i| \in \mathcal{H}^*$$
 (5.7)

Alle bra-Vektoren sind also Elemente des Dualen Raumes. Zusammen mit einem ket-Vektor im Skalarprodukt ergibt sich also ein **bracket**. Im gewohnten Spaltenvektorenbild ist der bra-Vektor einfach der komplex konjugiert transponierte, auch **adjungierte**, Vektor.

$$(\mathbf{a}^*)^T = (\mathbf{a}^T)^* := \mathbf{a}^\dagger \quad \rightarrow \quad \langle a |$$
 (5.8)

#### **Beispiel:**

In dieser Notation überzeugt man sich leicht, dass

$$\langle b| = (b_1^*, ..., b_N^*) \quad \leftrightarrow \quad |b\rangle = (b_1, ..., b_N)^T \quad \Rightarrow \quad \langle b|a\rangle = \sum b_j^* a_j.$$
 (5.9)

Die bra-ket-Notation nennt man auch *Dirac-Notation*. Der Vektor  $\mathbf{a}^{\dagger}$  heißt auch *dualer Vektor*.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>C-linear: für beliebige  $|a\rangle, |b\rangle \in \mathcal{H}$ , sowie  $\lambda \in \mathbb{C}$  gilt:  $\varphi(\lambda|a\rangle + |b\rangle) = \lambda \varphi(|a\rangle) + \varphi(|b\rangle)$ 

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>also  $\lambda \varphi_1(|a\rangle) + \mu \varphi_2(|a\rangle)$ 

## 5.2.2 Operatoren

Als nächsten Schritt betrachten wir lineare Abbildungen  $\mathbf{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$  (also, im Gegensatz zu oben, nicht nach  $\mathbb{C}$ ). Die Linearität ist definiert durch:

$$\mathbf{A}(\lambda |a\rangle + |b\rangle) = \lambda \mathbf{A}|a\rangle + \mathbf{A}|b\rangle.$$

Wir bezeichnen solche Abbildungen im Folgenden auch als **Operator**. Man kann die **Koeffizienten** von **A** bezüglich einer (nicht zwingend orthogonalen) Basis  $\{|g_i\rangle\}$  angeben als:

$$A_{ij} = \langle g_i \, | \mathbf{A} g_j \rangle$$

Dabei wirkt der Operator im Skalarprodukt auf den ket mit dem er zusammen geschrieben wird. Man kann jede Abbildung dieser Art als **Matrix** darstellen, dann aber immer bezüglich einer bestimmten Basis. Man kann sich leicht klarmachen, dass  $\langle a | \mathbf{A} b \rangle$  linear in  $|b\rangle$  ist. Somit kann man auch  $\langle a | \mathbf{A}$  als einen bra aus dem dualen Raum  $\mathcal{H}^*$  auffassen. Man definiert dafür den zu **A adjungierten Operator A**<sup>†</sup>, der durch

$$\langle b | \mathbf{A}^{\dagger} a \rangle := \langle a | \mathbf{A} b \rangle^*$$
(5.10)

definiert ist. Daraus folgt  $\left(\mathbf{A}^{\dagger}\right)^{\dagger} = \mathbf{A}$ . Insgesamt erhält man die Identifizierung

$$|c\rangle = \mathbf{A}|a\rangle \quad \leftrightarrow \quad \langle c| = \langle a|\mathbf{A}^{\dagger}\rangle$$

Ein adjungierter Operator wirkt also nach links, so wie der Operator selbst nach rechts.

#### Identitätsoperator

Aus der Darstellung eines ket in einer orthonormalen Basis  $\{|e_i\rangle\}$  kann man sofort ablesen:

$$\mathbf{1} = \sum_{k=1}^{N} |e_k\rangle \langle e_k|,$$

denn dann gilt  $\mathbf{1}|a\rangle = |a\rangle$ .

Einen Operator der Form  $\mathbf{A} = |a\rangle\langle b|$  kann man auch **adjungieren** und erhält nach kurzer Rechnung:

$$(|a\rangle\langle b|)^{\dagger} = |b\rangle\langle a|.$$

## 5.2.3 Endlichdimensionale Spektraltheorie

Man bezeichnet  $|\lambda_n, \mu\rangle \neq 0$  als einen Eigenvektor zum Eigenwert  $\lambda_n$ , falls gilt:

$$\mathbf{A}|\lambda_n,\mu\rangle = \lambda_n|\lambda_n,\mu\rangle.$$
(5.11)

Man bezeichnet diese Gleichung auch als **Eigenwertgleichung**. Diese Gleichung hat genau dann eine Lösung, wenn det $(\mathbf{A}-\lambda_n\mathbf{1})=0$ . Das sich hierdurch ergebende Polynom in  $\lambda_n$  nennt man auch das **charakteristische Polynom**. Kommt ein **Eigenwert mehrfach** (m-mal) vor (bzw. kann man ihm mehrere Eigenvektoren zuordnen) so heißt er *m*-fach entartet. Daher auch der zusätzliche "Index"  $\mu$  des Eigenvektors. Manchmal wird der Eigenvektor auch direkt nach dem Index des Eigenwertes benannt, also  $|\lambda_n\rangle \rightarrow |n\rangle$ .

# Selbstadjungierte Operatoren

Man bezeichnet einen Operator, für den

$$\mathbf{A}^{\dagger} = \mathbf{A} \tag{5.12}$$

gilt, als **selbstadjungiert**. Diese Eigenschaft bewirkt, dass das für das Skalarprodukt gilt:

$$\langle a | \mathbf{A} b \rangle = \langle \mathbf{A}^{\dagger} a | b \rangle = \langle b | \mathbf{A} a \rangle^* := \langle a | \mathbf{A} | b \rangle$$

Man schreibt ein solches doppeltes bracket, da es ja egal ist, ob der Operator nach links oder rechts wirkt. Diese Schreibweise wird oft beibehalten, auch wenn der Operator nicht selbstadjungiert ist, was aber selten vorkommt, um die Struktur des ket nicht durcheinander zu bringen. Für einen solchen Operator ist die Darstellungsmatrix bezüglich einer Orthonormalbasis gemäß (5.10) **hermitesch**. Hermitesch bedeutet, dass die Matrix gleich ihrer komplex Konjugiert- und Transponierten ist.

Man kann relativ leicht zeigen, dass ein selbstadjungierter Operator  $\mathbf{A} \in \mathcal{H}$ , wobei dim  $\mathcal{H} = N$ , *immer* N orthogonale Eigenvektoren zu reellen Eigenwerten besitzt.

**A** selbstadjungiert  $\Leftrightarrow$  EW:  $\lambda_n \in \mathbb{R}$ , EV:  $\langle \lambda_n, \mu | \lambda_{n'}, \mu' \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\mu,\mu'}$ .

Es existiert als eine sog. **Spektraldarstellung** ( $\approx$  Diagonalmatrix). Da die Eigenvektoren orthogonal und vollständig sind stellen sie eine Basis des  $\mathcal{H}$  dar. Mit dem Identitätsoperator  $\mathbf{1} = \sum |\lambda_n, \mu\rangle \langle \lambda_n, \mu|$  wird klar:

$$\mathbf{A} \doteq \sum_{n,\mu} \mathbf{A} |\lambda_n, \mu\rangle \langle \lambda_n, \mu| = \sum_{n,\mu} \lambda_n |\lambda_n, \mu\rangle \langle \lambda_n, \mu| \doteq \operatorname{diag} \left(\lambda_1, \dots, \lambda_N\right).$$
(5.13)

## Unitäre Operatoren

Man bezeichnet einen Operator, für den

$$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^{\dagger}$$

gilt, als **unitär**. Solche Operatoren erhalten wegen:

$$\langle a | b \rangle = \langle a | \mathbf{U}^{\dagger} \mathbf{U} | b \rangle = \langle \mathbf{U} a | \mathbf{U} b \rangle$$

das Skalarprodukt. Führt man selbige Rechnung mit einem (potenziellen) normierten Eigenvektor zu U durch, so erhält man, dass die Eigenwerte eines unitären Operators immer den Betrag 1 haben:

**U** unitär 
$$\Rightarrow$$
 EW:  $|\lambda_n| = 1$ .

Wichtig ist, dass daraus folgt, dass selbstadjungierte unitäre Operatoren somit nur die Eigenwerte  $\pm 1$  haben können (Beispiel: Paritätsoperator).

# 5.2.4 Kommutator und Spektraltheorie

Man bezeichnet die Größe

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] := \mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A} \tag{5.14}$$

als den **Kommutator** von **A** und **B**. Ist dieser gleich 0 so *kommutieren* **A** und **B**. Es gilt die Rechenregel:

$$[\mathbf{A}, \mathbf{BC}] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]\mathbf{C} + \mathbf{B}[\mathbf{A}, \mathbf{C}].$$
(5.15)

Analog nennt man

$$\{\mathbf{A},\mathbf{B}\}:=\mathbf{A}\mathbf{B}+\mathbf{B}\mathbf{A}$$

den Antikommutator von A und B. Man kann zeigen, dass man zu kommutierenden, selbstadjungierten Operatoren immer eine Basis findet, in denen beide Spektralzerlegungen der Operatoren eine diagonale Form besitzen. Da zu einem einzelnen Eigenwert  $\lambda$  eines Operators A aufgrund der Entartung auch m Eigenvektoren<sup>5</sup> gehören können, ist dieser wegen:

$$\mathbf{A}\left(\sum_{\mu}\alpha_{\mu}|\lambda_{n},\mu\right) = \sum_{\mu}\lambda_{n}\alpha_{\mu}|\lambda_{n},\mu\rangle = \lambda_{n}\left(\sum_{\mu}\alpha_{\mu}|\lambda_{n},\mu\right)$$

auch in einer anderen Basis des Eigenraumes zu  $\lambda_n$  als Diagonalmatrix darstellbar. Man kann die Koeffizienten  $\alpha_{\mu}$  ja frei wählen. Das bedeutet, dass nur ein Operator mit paarweise verschiedenen Eigenwerten eine Basis zur Diagonalform eindeutig festlegt. Da aber kommutierende Operatoren eine gemeinsame Diagonalform besitzen kann man immer weitere Operatoren hinzufügen, die die Eigenräume gleicher Eigenwerte des vorherigen Operators weiter bestimmen:

Ein Satz von selbstadjungierten, paarweise kommutierenden Operatoren  $\{A, B, C, ...\}$ , der eine gemeinsame Basis aus Eigenvektoren eindeutig festlegt, heißt vollständiger Satz kommutierender Operatoren.

Hier bedeutet "eindeutig festgelegt", dass am Ende der Kette keine Eigenräume mehr übrig sind, die mehr als 1-dimensional sind.

## 5.2.5 Funktionen von Operatoren

Man definiert Funktionen von Operatoren über Potenzreihen der Form:

$$f(\mathbf{A}) := \sum_{n=0}^{\infty} a_n \mathbf{A}^n \,,$$

wobei die Potenz eines Operators einfach durch mehrfaches hintereinander-Ausführen definiert ist. Die Ableitung einer Funktion nach dem Operator ist analog zur Ableitung nach

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>Hier wird klar, wie nützlich die Notation der ket-Nummerierung ist.

einer Variablen, allerdings muss man bei der **Produktregel aufpassen**, da die Operatoren ja i.A. nicht kommutieren. Man kann auch Operatoren wie z.B.  $\mathbf{A} = \exp(b\mathbf{B})$  auch nach einem Parameter, hier *p* differenzieren:

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{A}}{\mathrm{d}p} = \mathbf{B}e^{p\mathbf{B}}$$

Mittels vollständiger Induktion kann man zudem zeigen, dass gilt:

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0 \quad \Rightarrow \quad [\mathbf{B}, f(\mathbf{A})] = 0.$$

### Exponentialgesetz

Das Exponentialgesetz gilt (leider) nur für kommutierende Operatoren wie gewohnt. Allgemeiner gilt im Fall, dass die Operatoren mit ihrem eigenen Kommutator kommutieren  $[\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] = [\mathbf{B}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] = 0$ :

$$e^{\mathbf{A}+\mathbf{B}} = e^{\mathbf{A}} e^{\mathbf{B}} e^{-[\mathbf{A},\mathbf{B}]/2} = e^{\mathbf{B}} e^{\mathbf{A}} e^{[\mathbf{A},\mathbf{B}]/2}.$$

Im erstgenannten Fall  $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0$  folgt also das gewohnte Exponentialgesetz. Kommutieren die Operatoren nicht einmal mit ihrem Kommutator so existiert kein einfacher geschlossener Ausdruck mehr.

### Nützliche Formeln

Mittels vollständiger Induktion kann man beweisen, dass im Fall einer gegebenen analytischen Funktion<sup>6</sup> eines Operators und Operatoren mit der Eigenschaft:  $[\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] = [\mathbf{B}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] = 0$  gilt:

$$[f(\mathbf{A}), \mathbf{B}] = -[\mathbf{A}, \mathbf{B}]f'(\mathbf{A})$$
(5.16)

Man kann eine Matrix A ggf. mittels einer Transformationsmatrix T, die die Eigenvektoren von A als Spalten enthält mittels

$$T^{-1}AT = D = \operatorname{diag}(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n)$$

auf eine Diagonalform bringen. Diese Aussage ist analog zu (5.13) nur in Matrixformulierung ausgedrückt. Nun kann man über Potenzreihen definierte Funktionen mittels  $A = T D T^{-1}$  einfach ausrechnen:

$$f(A) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (TDT^{-1})^n = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \underbrace{TDT^{-1} \cdot TDT^{-1} \cdot \dots \cdot TDT^{-1}}_{n-\text{mal}} = Tf(D)T^{-1}$$

## 5.2.6 Stern-Gerlach-Versuch II - Operatormethode

Wir beschreiben das magnetische Moment eines entsprechenden Teilchen beim Durchgang durch einen SG-Apparat mittels eines ket  $|\psi\rangle$ . Dabei fassen wir die möglichen Ausrichtungen  $\mathbf{e}_1$  und  $\mathbf{e}_3$ , bei Ausbreitung in *y*-Richtung, ebenfalls als kets  $|1\rangle$  und  $|3\rangle$  auf. Damit beschreibt  $|\psi\rangle = \psi_1 |1\rangle + \psi_3 |3\rangle$  einen normierten Zustand, wenn  $\psi_1$  und  $\psi_2$  entsprechend

 $<sup>^{6}\</sup>mathrm{Analytisch}$  be deutet, "sich in eine Potenzreihe entwickeln lassend".

normiert sind. Die Energie ergibt sich nun zu  $E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$ , welche nur zwei diskrete Werte  $\pm \mu_0 B$  annehmen kann, wie das Experiment gezeigt hat. Um die Energieaufspaltung zu beschreiben wird ein Operator konstruiert, der im Hilbertraum  $\mathbb{C}^2$  auf  $|\psi\rangle$  wirkt. Dafür spalten wir den Faktor  $\mu_0$  ab und erhalten mit Magnetfeldrichtung  $\mathbf{n}$  und  $\boldsymbol{\mu} = \mu_0 \boldsymbol{\sigma}$  den Operator:

$$\hat{H} = -\mu_0 B(\sigma_1 n_1 + \sigma_2 n_2 + \sigma_3 n_3) := -\mu_0 B \sigma_\mathbf{n}$$

Diesen nennen wir in Anlehnung an die Gesamtenergie, die in der klassischen Mechanik durch die Hamilton-Funktion beschrieben wird, auch **Hamiltonoperator**. Wir wissen, dass die zwei Basiszustände (die zu den Energien  $\pm \mu_0 B$  führen) Eigenvektoren des Operators  $\sigma$  sein müssen. Wir bezeichnen sie mit  $|\mathbf{n}, \pm\rangle$ . Daraus folgt eine Spektraldarstellung für  $\hat{H}$ :

$$\hat{H} = -\mu_0 B\left(\left|\mathbf{n},+\right\rangle \left\langle \mathbf{n},+\right| - \left|\mathbf{n},-\right\rangle \left\langle \mathbf{n},-\right|\right.\right)$$

Aus dieser Spektralzerlegung wird schnell ersichtlich, dass  $\sigma^2 = \mathbf{1}$ . Aus  $\sigma^2 = (\sigma_1 n_1 + \sigma_2 n_2 + \sigma_3 n_3)^2 = \mathbf{1}$  ergibt sich:

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} \mathbf{1} \quad \Rightarrow \quad \{\sigma_i, \sigma_n\} = 2n_i \mathbf{1}$$

Aus den Eigenschaften der Spurerhaltung (Sp $(\sigma_i) = 0$  aufgrund der Eigenwerte), der Selbstadjungiertheit, den Eigenwerten und Vektoren sowie der Bedingung von oben kann man Matrixdarstellungen der  $\sigma_i$  bezüglich der  $|\mathbf{z}, \pm\rangle$ -Basis herleiten:

$$\sigma_1 \doteq \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 \doteq \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 \doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Man nennt diese Matrizen auch **Pauli-Spinmatrizen**. Man geht hierbei von der  $\sigma_3$  Matrix in z-Richtung aus. Daher ist dies die Darstellung in der Basis  $|\mathbf{z}, \pm\rangle$ . Für einen allgemeinen Einheitsvektor **n** (Kugelkoordinaten) ergibt sich (ebenfalls bezüglich der Basis  $|\mathbf{z}, \pm\rangle$ ):

$$\sigma_{\mathbf{n}} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & e^{-\mathrm{i}\varphi}\sin(\theta) \\ e^{\mathrm{i}\varphi}\sin(\theta) & -\cos(\theta) \end{pmatrix} \,,$$

mit den zugehörigen Eigenvektoren:

$$\begin{aligned} |\mathbf{n},+\rangle &= \cos(\theta/2)|\mathbf{z},+\rangle + e^{i\varphi}\sin(\theta/2)|\mathbf{z},-\rangle \\ |\mathbf{n},-\rangle &= -\sin(\theta/2)|\mathbf{z},+\rangle + e^{i\varphi}\cos(\theta/2)|\mathbf{z},-\rangle \,. \end{aligned}$$

Die Eigenvektoren in die  $\mathbf{x}$ - und  $\mathbf{y}$ -Richtung ergeben sich durch entsprechende Wahl der Winkel.

#### Wahrscheinlichkeit und Spin

Analog zum Malus'schen Gesetz bei polarisiertem Licht<sup>7</sup> interpretiert man das Skalarprodukt

$$w_{\mathbf{n},\pm}(|\psi\rangle) = |\langle \mathbf{n},\pm|\psi\rangle|^2$$

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>Die Intensität linear Polarisierten Licht in einem Winkel  $\theta$  zur Polarisationsachse eines Linearpolarisators ist nach Durchlaufen  $I = I_0 \cos^2(\theta)$ .

als die Wahrscheinlichkeit eines, durch den Zustandsvektor  $|\psi\rangle = \psi_+ |\mathbf{z}, +\rangle + \psi_- |\mathbf{z}, -\rangle$ beschriebenen Teilchens, durch eine SG-Apparatur  $|\mathbf{n}, \pm\rangle$  zu gelangen. Man erkennt hier erneut die enge Beziehung zwischen Polarisation in der klassischen Wellenmechanik und dem magnetischen Moment der Teilchen. Tatsächlich wird dieses durch den sog. **Spin** (~ Eigendrehimpuls) des Teilchens erzeugt. Bei Licht entspricht die Polarisation der Welle letzten Endes der Spin-Einstellung der Photonen. In der, hier besprochenen, nichtrelativistischen Quantenmechanik folgt der Spin nicht direkt aus der Theorie.

#### Kommutator der Operatoren

Im Folgenden werden wir feststellen, dass die "Unsicherheit", mit denen zwei Operatoren gleichzeitig bestimmbar sind von ihrem Kommutator abhängt. Daher soll hier bereits erwähnt sein, dass man kompakt schreiben kann:

$$[\sigma_l, \sigma_j] = 2 \,\mathrm{i}\,\varepsilon_{ljk}\,\sigma_k \tag{5.17}$$

Im Folgenden wird auch der Vektorwertige Spinoperator von Bedeutung sein:

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \qquad \Rightarrow \qquad [s_l, s_j] = \mathrm{i} \, \hbar \, \varepsilon_{ljk} \, s_k \,.$$
 (5.18)

# 5.3 Konzepte der Statistik

Im vorherigen Kapitel ist bereits der Begriff der Wahrscheinlichkeit aufgetaucht. In der Quantenmechanik spielen solche statistischen Begriffe eine große Rolle.

## 5.3.1 Erwartungswert und Varianz

Der Erwartungswert einer Funktion h(x) zu einer diskreten Verteilung  $p(x_k)$  bzw. zu einer kontinuierlichen Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(x)$  ist allgemein als die Summe bzw. das Integral

$$E[h(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)h(x) \,\mathrm{d}x \qquad \text{bzw.} \qquad E[h(x)] = \sum_{k} h(x_k) \,p(x_k) \tag{5.19}$$

definiert. Man nennt  $\langle x \rangle = E[x]$  auch **Mittelwert** oder einfach Erwartungswert. Als **Varianz** bezeichnet man die quadratische Abweichung von ebendiesem Mittelwert:

$$\operatorname{Var}(x) = E[(x - \langle x \rangle)^2] = E[x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2] = E[x^2] - \langle x \rangle^2$$

Die Wurzel der Varianz wird Unsicherheit oder auch **Unschärfe** zur entsprechenden Größe genannt. Sie wird mit  $\Delta(G)$  bezeichnet, wobei G für eine beliebige Größe steht. Wir haben beim Stern-Gerlach-Versuch bereits ein Beispiel für einen diskreten Wahrscheinlichkeitsraum in der Quantenmechanik gesehen. Der Erwartungswert des Hamilton-Operators kann hier ganz einfach durch die jeweiligen Eigenwerte  $\pm 1$  und die Zugehörigen Wahrscheinlichkeiten  $\mu_0 B w_{n,\pm}$  wie in Gl. 5.19 bestimmt werden:

$$\langle \hat{H} \rangle_{|\psi\rangle} = -\mu_0 B \left( \langle \psi | \mathbf{n}, + \rangle \langle \mathbf{n}, + | \psi \rangle - \langle \psi | \mathbf{n}, - \rangle \langle \mathbf{n}, - | \psi \rangle \right) = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$$

Wir werden sehen, dass auf jedem Hilbertraum mit entsprechendem Skalarprodukt die Wahrscheinlichkeit eines Operators A bezogen auf einen Systemzustand  $|\psi\rangle$  gegeben ist durch:

$$\langle \mathbf{A} \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi \, | \mathbf{A} | \psi \rangle$$

### Hellmann-Feynman Identität

Sei  $\mathbf{A}(\lambda)$  ein selbstadjungierter Operator, der von einem Parameter  $\lambda$  abhängt. Wir bezeichnen seine Eigenvektoren zum Eigenwert a mit  $|a\rangle$ . Für den Erwartungswert  $\langle a | \partial_{\lambda} \mathbf{A} | a \rangle$ ergibt sich gemäß der Produktregel der Ableitung:

$$0 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda} \langle a | \mathbf{A} - a | a \rangle = \langle \partial_{\lambda} a | \mathbf{A} - a | a \rangle + \langle a | \mathbf{A} - a | \partial_{\lambda} a \rangle + \langle a | \partial_{t} \mathbf{A} | a \rangle + \langle a | - \partial_{\lambda} a | a \rangle$$

Die ersten beiden Terme fallen bei Anwendung von A auf  $|a\rangle$  weg und man erhält:

$$\langle a | \partial_{\lambda} \mathbf{A} | a \rangle = \partial_{\lambda} a \,.$$

## 5.3.2 Heisenbergsche Unschärferelation

Aus der höheren Mathematik kennen wir die Cauchy-Schwarze Ungleichung für die Elemente eines Vektorraums:

$$|\langle a | b \rangle| \le ||a|| \cdot ||b||, \qquad (5.20)$$

Hiermit kann man zeigen, dass für zwei selbstadjungierte Operatoren A und B gilt:

$$\operatorname{Var}_{|\psi\rangle}(\mathbf{A})\operatorname{Var}_{|\psi\rangle}(\mathbf{B}) \geq \left| \left\langle \left(\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle_{|\psi\rangle}\right) \psi \right| \left(\mathbf{B} - \langle \mathbf{B} \rangle_{|\psi\rangle}\right) \psi \right\rangle \right|^2$$

Nach einiger weiterer Rechnung und weglassen eines quadratischen Terms (über einer reellen Zahl) erhält man die Heisenbergsche Unschärferelation:

$$\Delta_{|\psi\rangle}(\mathbf{A})\Delta_{|\psi\rangle}(\mathbf{B}) \ge \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \psi \rangle \right|$$
(5.21)

für beliebige Operatoren. Nur Messgrößen, deren Operatoren (siehe Postulate der QM Kapitel 6) kommutieren sind also gleichzeitig exakt messbar / vorhersagbar und werden **kommensurabel** genannt.

# 5.4 Wellenpakete und Schrödingergleichung

Für die entsprechenden Experimente verweise ich auf die Inhalte der Vorlesung Experimentalphysik III - Optik und Quantenphysik. Wie bereits besprochen verlangen die Ergebnisse verschiedener Experimente nach den Beziehungen (5.1) und (5.3) zwischen

den Teilchen- und Welleneigenschaften von Materie. Licht wird durch Überlagerungen<sup>8</sup> von monochromatischen, ebenen Wellenfunktionen beschrieben:

$$\mathbf{E}(z,t) = \mathbf{E}_0 \int_{-\infty}^{\infty} f(k) e^{\mathbf{i}k(x-ct)} \,\mathrm{d}k \,, \qquad \omega = kc$$

Man kann dies auch als (Rück-)Fouriertransformation interpretieren. Den Zusammenhang zwischen  $\omega$  und k nennt man auch die Dispersionsrelation.

## 5.4.1 Materiewellen

In der Quantenmechanik übersetzt man genau umgekehrt zur Vorgehensweise bei Lichtwellen die Teilcheneigenschaften Energie und Impuls in eine Wellenfunktion. Eine monochromatische Ebene "Materiewelle" hat dann die Form:

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x},t) = c \cdot \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m}t\right)\right],$$

wobei c eine noch zu bestimmende Konstante ist. Die Wellenfunktion wird nach Max Born (1926) so interpretiert, dass die **Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte** des Teilchens gerade durch

$$\rho(\mathbf{x},t) = |\psi(\mathbf{x},t)|^2 = \psi \psi^*$$

gegeben ist. Dies nennt man auch die Kopenhagener Interpretation. Eine andere Interpretation ist die "Viele-Welten-Hypothese". In dieser Interpretation ist klar, dass eine monochromatische, ebene Welle kein reales Teilchen beschreibt, da sie nicht normierbar ist, was man aber für eine Wahrscheinlichkeitsdichte fordert:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \mathrm{d}\mathbf{x} = 1.$$

Man muss also auch hier, wie schon in der Elektrodynamik, zu Wellenpaketen übergehen. In der Quantenmechanik spielt dann bei der Überlagerung der Impuls eine ähnliche Rolle wie der Wellenvektor in der Elektrodynamik:

$$\psi(\mathbf{x},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\psi}(\mathbf{p}) \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} t\right)\right] \,\mathrm{d}\mathbf{p}$$
(5.22)

Die Impulsdichte  $\tilde{\psi}(\mathbf{p})$  tritt hier an die Stelle der k-Verteilung der Elektrodynamik. Der Vorfaktor ist hier aus Normierungsgründen gewählt. In enger Anlehnung an die Parseval-Identität kann man zeigen, dass für alle Zeiten gilt:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{x},t)|^2 \, \mathrm{d}\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^3} |\tilde{\psi}(\mathbf{p})|^2 \, \mathrm{d}\mathbf{p} \, .$$

Aus diesem Zusammenhang kann man  $|\tilde{\psi}(\mathbf{p})|^2$  als die **Wahrscheinlichkeitsverteilung** der Impulse im Wellenpaket auffassen. Die Dispersionsrelation ist hierbei aufgrund der nicht-relativistischen Energie-Impuls Beziehung dann offenbar gegeben durch:

$$\omega = \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m}$$

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup>Monochromatische, ebene Wellen selbst sind nicht physikalisch, da sie unendlich im Raum ausgebreitet sind und unendlich viel Energie transportieren.

## 5.4.2 Orts- und Impulsdarstellung

Allgemein gilt, wie oben beschrieben, das Parsevalsche Theorem für Fouriertransformationen. Tatsächlich wird sich herausstellen, dass (5.22) die allgemeine Lösung der freien Schrödingergleichung darstellt. Hier stimmen die Normen von  $\psi(\mathbf{x}, t)$  und  $\tilde{\psi}(\mathbf{p})$  überein, da sich der Phasenterm  $-i\mathbf{p}^2 t/2m$  nach einem Schritt aus kürzt. Hier ist darauf zu achten, dass  $\tilde{\psi}(\mathbf{p})$  keine Zeitabhängigkeit besitzt. Allgemein macht das Parseval Theorem aber plausibel, Zeitabhängigkeiten, wie den erwähnten Phasenterm, in die Impulswellenfunktion zu absorbieren, d.h. man identifiziert:

$$\psi(\mathbf{x},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}} \int \tilde{\psi}(\mathbf{p},t) e^{+i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \,\mathrm{d}\mathbf{p} \,,$$
  
$$\tilde{\psi}(\mathbf{p},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}} \int \psi(\mathbf{x},t) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \,\mathrm{d}\mathbf{x} \,,$$
  
(5.23)

wobei d die Dimension des Raumes ist. Dies ist aufgrund der Fourierinversen eine konsistente Zuordnung. Das Parseval Theorem sichert für alle Zeiten die Normierung. Die Identifikation von  $\tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)$  als die tatsächliche **Impulsdichte** wird in Lehrbüchern oft als *plausible Spekulation*<sup>9</sup> beschrieben, die sich aber durch bisher alle Experimente bestätigt hat. Tatsächlich folgt aus dieser Zuordnung auch die Ortsdarstellung des Impulsoperators. Diese wird dann in der Schrödingergleichung verwendet, die sich als äußert gute Theorie erwiesen hat.

#### Gaußförmiges Wellenpaket:

Eine häufige Verteilung ist das gaußsche Wellenpaket der Form:

$$\tilde{\psi}(p) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\tilde{\sigma}}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{(p-p_0)^2}{4\tilde{\sigma}^2}\right) \,.$$

Man erkennt leicht, dass dann  $|\tilde{\psi}(p)|^2$  eine Gauß-Verteilung mit Mittelwert  $p_0$  und Standardabweichung  $\Delta p = \tilde{\sigma}$  ist. Mittels der Fouriertransformation der Gaußfunktion zeigt man, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte dann gegeben ist durch:

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(t)} \exp\left(-\frac{(x-v_0t)^2}{2\sigma^2(t)}\right)$$

wobei

$$v_0 = p_0/m$$
,  $\sigma(t) = \frac{\hbar}{2\tilde{\sigma}}\sqrt{1 + \left(\frac{2t\tilde{\sigma}^2}{\hbar m}\right)^2}$ 

Man erkennt also, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Teilchens mit wachsender Zeit verschmiert, da die Unschärfe  $\sigma(t)$  größer wird. Mit etwas Wissen um die Gauß-Verteilung sieht man, dass  $d\langle x \rangle/dt = p_0/m = v_0$  ist. Dies wird später verallgemeinert. Man erkennt hier bereits, dass für t = 0 die kleinste Ortsunschärfe vorliegt. Man kann also die Abschätzung machen:

$$\Delta x \cdot \Delta p \ge \frac{\hbar}{2}$$

was der Heisenbergschen Unschärferelation entspricht.

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup>z. B. in Nolting, W. (2013). Grundkurs Theoretische Physik 5/1. (8. Aufl.). Springer Spektrum.

# 5.4.3 Schrödingergleichung

Man kann leicht nachrechnen, dass ein allgemeines Wellenpaket (5.22) die Differenzialgleichung

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{x},t)$$

erfüllt.<sup>10</sup> Wir haben bisher von einem freien Teilchen, analog zur freien Elektromagnetischen Welle gesprochen. Allgemeiner werden wir sehen, dass

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

der selbstadjungierte **Operator der kinetischen Energie** ist. Dies macht eine Erweiterung der Gleichung um einen Potenzialterm plausibel:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{x},t) + V(\mathbf{x},t) \,\psi(\mathbf{x},t) \,.$$
(5.24)

Diese Gleichung wird **zeitabhängige Schrödingergleichung** genannt. Man kann sie zwar aus einem Energieansatz herleiten aber nur, indem man den "Guess" einer Materiewellenfunktion mit den Darstellungen  $E = \hbar \omega$  und  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$  schon hineinsteckt. Daher wirkt diese Gleichung wie "vom Himmel gefallen". Tatsächlich kann man sagen, dass dies mehr oder weniger zutrifft, sich die Gleichung aber seit fast einem Jahrhundert als zuverlässige Theorie bewährt hat und daher ganz klar ihre fundamentale Berechtigung besitzt. Es ist sogar eines der *Postulate* der Quantenmechanik, dass man die Dynamik jedes Quantensystem in einem Hilbertraum durch einen selbstadjungierten Hamilton Operator  $\hat{H}$ (Energie) beschreiben kann (vgl. Stern-Gerlach-Versuch). Die Schrödingergleichung hat dann die kompakte Form:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle.$$
(5.25)

# 5.5 Seperable Hilberträume

Ein seperabler Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ist ein (möglicherweise unendlichdimensionaler), vollständiger, unitärer Vektorraum, sodass ein dichter abzählbarer Unterraum existiert (seperabel)<sup>11</sup>. Dementsprechend besitzt  $\mathcal{H}$  ein Skalarprodukt  $\langle \cdot | \cdot \rangle$  und eine Norm  $||x|| = \sqrt{\langle x | x \rangle}$ . Die Vollständigkeit wird durch die Konvergenz jeder Cauchy-Folge in  $\mathcal{H}$  definiert. Man kann zeigen, dass ein ein seperabler Hilbertraum immer eine abzählbare Orthonormalbasis { $|\varphi_n\rangle|n \in \mathbb{N}$ } besitzt. Dann gilt für alle  $x \in \mathcal{H}$ :

$$|x\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i |\varphi_i\rangle \tag{5.26}$$

<sup>&</sup>lt;sup>10</sup>Hier wird davon ausgegangen, dass der Integrand hinreichend gutmütig ist, um Ableitung und Integral zu vertauschen.

 $<sup>^{11}\</sup>mathrm{F\ddot{u}r}$ nähere Informationen: Siehe Höhere Mathematik IV - Funktionalanalysis (für Physiker).

# Der Raum $L^2(\mathcal{U})$

Sei  $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^d$ ,  $d \in \mathbb{N}$ . Dann nennen wir  $L^2(\mathcal{U})$  den Raum aller der bezüglich des Lebesgue-Integral quadratintegrablen Funktionen  $\varphi(\mathbf{x})$ . D.h.

$$\int_{\mathcal{U}} |\varphi(\mathbf{x})|^2 \, \mathrm{d}\mathbf{x} \quad \text{existiert und ist endlich.}$$

Man kann zeigen: Mit dem Skalarprodukt

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int_{\mathcal{U}} \varphi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mathbf{x}$$
 (5.27)

bildet  $L^2(\mathcal{U})$  einen Hilbertraum. Um hiermit aber eine vernünftige Norm zu definieren, muss man die Äquivalenz zweier Funktionen so definieren, dass man sagt: Zwei Funktionen sind äquivalent, wenn sie sich nur bis auf eine Menge vom Maß 0 unterscheiden.

Man sieht sofort, dass alle Wahrscheinlichkeitswellenfunktionen der Quantenmechanik aufgrund der Normierung Teil des  $L^2(\mathcal{U})$  sind.

# Der Raum $l^2(\mathbb{C})$

Der Raum  $l^2(\mathbb{C})$  ist die Menge aller Folgen  $\{a_i\}_{i\in\mathbb{N}}$ , für die gilt:

$$\sum_{i=1}^{\infty} |a_i|^2 < \infty \,.$$

Das Skalarprodukt ist dann gegeben als  $\langle \alpha | \beta \rangle = \sum \beta_i^* \alpha_i$ . Man kann zeigen, dass jeder separable Hilbertraum isomorph zu  $l^2(\mathbb{C})$  ist, da die Basisfaktoren  $\alpha_i$  aus Gl. 5.26 immer auch summierbar sein müssen.

# 5.5.1 Funktionale auf Hilberträumen

#### Stetigkeit

Lineare, beschränkte Funktionale F (analog zu Kapitel 2) auf einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  erfüllen die Stetigkeitsbedingung:

$$|\psi_n\rangle \to |\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad F(|\psi_n\rangle) \to F(|\psi\rangle) \quad \forall \ |\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

Dies ist im endlichdimensionalen Fall sofort klar, aber es ist wichtig dies im unendlichen Fall noch einmal zu betonen.

### Der Duale Raum

Analog existiert auch eine Familie stetiger<sup>12</sup> Funktionale die man wieder einem Raum  $\mathcal{H}^*$ , den man dualen Raum nennt, zuordnen kann, für die gilt:

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H} \iff \langle \psi| \in \mathcal{H}^* \qquad \Rightarrow \qquad \langle \psi| (|\varphi\rangle) := \langle \psi|\varphi\rangle$$

## 5.5.2 Lineare Operatoren

Es existieren genauso lineare Operatoren  $\mathbf{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ , wie im endlichdimensionalen Fall. Der Definitionsbereich des Operators ist hier i.A. nicht ganz  $\mathcal{H}$ , sondern es gilt  $D(\mathbf{A}) \subset \mathcal{H}$ .

 $<sup>^{12}\</sup>text{Die}$ Stetigkeit ist wichtig, da sonst der Raum $\mathcal{H}^*$ nicht mehr isomorph zu $\mathcal{H}$  wäre.

### **Adjungierter Operator**

Der adjungierte Operator erfüllt dieselbe Eigenschaft, wie im endlichdimensionalen Fall:

$$\langle \mathbf{A}^{\dagger} \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi | \mathbf{A} \psi \rangle \quad (= \langle \varphi | \mathbf{A} | \psi \rangle)$$

Hierbei muss gelten:  $D_{\mathbf{A}} \subset D_{\mathbf{A}^{\dagger}}$ . Ein Operator  $\mathbf{A} = \mathbf{A}^{\dagger}$  heißt hermitesch. Gilt auch noch  $D_{\mathbf{A}} = D_{\mathbf{A}^{\dagger}}$  so heißt der Operator selbstadjungiert.

#### Unitäre Operatoren

Wir betrachten wie im endlich dimensionalen Fall unitäre Operatoren mit der Eigenschaft:

 $\mathbf{U}^{\dagger}=\mathbf{U}^{-1}$ 

Hierbei ist U surjektiv ist und der Definitionsbereich ist der gesamte Hilbertraum  $\mathcal{H}$ . Wie vorher erhält ein unitärer Operator das Skalarprodukt.

### 5.5.3 Ortsoperator I

Man definiert den Ortsoperator konsistent zum Erwartungswert des Ortes. Also (in der Ortsdarstellung):

$$\mathbf{\hat{x}}: \ \psi(\mathbf{x}) \to \mathbf{x}\psi(\mathbf{x})$$

wobei  $D_{\hat{\mathbf{x}}} = \{ \psi(\mathbf{x}) \in L^2(\mathbb{R}^d) | \mathbf{x}\psi(\mathbf{x}) \in L^2(\mathbb{R}^d) \}.$  Daraus ergibt sich:

$$\langle \psi | \mathbf{\hat{x}} | \psi \rangle = \int \psi^* \mathbf{x} \psi \, \mathrm{d}\mathbf{x} = \langle \mathbf{x} \rangle$$

Der Operator ist zudem offensichtlich linear und selbstadjungiert:

$$\langle \varphi | \mathbf{\hat{x}} \psi \rangle = \int \varphi^*(\mathbf{x}) \mathbf{x} \psi(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mathbf{x} = \int [\mathbf{x} \varphi(\mathbf{x})]^* \, \psi(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mathbf{x} = \langle \mathbf{\hat{x}} \varphi | \psi \rangle$$

hieran sieht man, dass  $\hat{\mathbf{x}}$  hermitesch ist. Es ist auch klar, dass  $D_{\hat{\mathbf{x}}} = D_{\hat{\mathbf{x}}^{\dagger}}$  gilt. Versuchen wir also die Eigenwerte zu finden:

$$\mathbf{x}\psi(\mathbf{x}) = \lambda\psi(\mathbf{x}) \qquad \Leftrightarrow \qquad (\mathbf{x} - \lambda)\psi(\mathbf{x}) = 0$$

Diese Gleichung ergibt für sich genommen keinen Sinn, da eine solche Eigenfunktion an fast allen Stellen ( $\mathbf{x} \neq \lambda$ ) Null sein müsste. Da aber auf dem  $L^2$  und auch auf dem verwandten Raum  $D_{\hat{\mathbf{x}}}$  Funktionen, die sich bis auf Nullmengen nicht unterscheiden, äquivalent sind, wäre sie identisch der Nullfunktion, was für einen Eigenvektor unzulässig ist.

Um Abhilfe zu schaffen, müssen wir die Delta-Distribution hinzuziehen. Im Distributionssinn gilt:

$$\mathbf{x}\delta(\mathbf{x}-\lambda) = \lambda\delta(\mathbf{x}-\lambda)\,,$$

wie man sich leicht durch Integration überzeugen kann. Wir betrachten also das lineare Funktional über dem Hilbertraum  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ 

$$\delta(\mathbf{x} - \lambda)(|\psi\rangle) = \int \delta(\mathbf{x} - \lambda)\psi(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mathbf{x} = \psi(\lambda)$$

Dieses Funktional ist nicht auf ganz  $\mathcal{H}$  stetig, d.h.  $\delta(x - \lambda) \notin \mathcal{H}^*$ . Man findet aber einen geeigneten Unterraum  $\mathcal{U} \subset \mathcal{H}$ , sodass  $\delta(x-\lambda) \in \mathcal{U}^*$  gilt. Genauer kann man dies in der mathematischen Behandlung unbeschränkter Operatoren nachlesen. In der Dirac-Notation werden uneigentliche und eigentliche Eigenwerte gleichberechtigt betrachtet, weshalb Mathematiker sie nicht mögen.

# **Dirac-Notation**

Mit der Delta-Distribution haben wir ein Werkzeug zur Hand, mit welchem wir die Eigenwerte und Eigenvektoren von unbeschränkten Operatoren sinnvoll behandeln können. Wir definieren den bra  $\langle \mathbf{x}_0 |$  als

$$\langle \mathbf{x}_0 | \psi \rangle : \quad \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) (|\psi\rangle) = \psi(\mathbf{x}_0)$$

$$\Rightarrow \quad \langle \psi | \mathbf{x}_0 \rangle = \langle \mathbf{x}_0 | \psi \rangle^* = \psi^*(\mathbf{x}_0)$$
(5.28)

obwohl  $\langle \mathbf{x}_0 |$  streng genommen nicht in  $\mathcal{H}^*$  liegt<sup>13</sup>. Dadurch erhalten wir die Zerlegung der 1 in der Form:

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int \varphi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mathbf{x} = \int \langle \varphi | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \psi \rangle \, \mathrm{d}\mathbf{x}$$

Dies führt außerdem dazu, dass

$$\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | \psi \rangle \, \mathrm{d}\mathbf{x}' = \int \langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle \psi(\mathbf{x}') \, \mathrm{d}\mathbf{x}'$$

Man folgert hieraus:

$$\mathbf{1} = \int |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x} | \, \mathrm{d}\mathbf{x} \,, \qquad \langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \tag{5.29}$$

Man kann nun das Zweite Ergebnis als die Vollständigkeitsrelation kontinuierlicher Eigenvektoren verstehen und das Erste als die kontinuierliche Zerlegung der 1.

## 5.5.4 Spektraltheorie

Anhand dieses Spezialfalles haben wir nun bereits die Grundzüge der Spektraltheorie der Operatoren auf unendlich-dimensionalen Hilberträumen kennengelernt. Wie man sieht, verläuft die Spektralzerlegung im unendlich-dimensionalen Fall nicht ganz analog zum endlichen Fall.

• Die sog. eigentlichen Eigenwerte und Eigenvektoren erfüllen wie gewohnt:

$$\mathbf{A}|\lambda_n,\mu\rangle = \lambda_n|\lambda_n,\mu\rangle \qquad 0 \neq |\lambda_n,\mu\rangle \in D_{\mathbf{A}}$$

es wird sich zeigen, dass eigentliche Eigenwerte **diskret** sind.

• Die sog. uneigentlichen Eigenwerte und Eigenvektoren sind kontinuierlich.

<sup>13...</sup>, da das erzeugende Funktional, die Delta-Distribution nicht quadratintegrabel ist. Das Quadrat ist nicht einmal definiert.

Mathematisch unterscheidet man genau zwischen dem diskreten Teil des sog. **Spektrums** (den Eigenwerten) und dem kontinuierlichen Anteil. Man kann im Rahmen der Funktionalanalysis zeigen, dass ein Maß existiert, bezüglich dessen man auch die kontinuierlichen Anteile des Spektrums spektral zerlegen kann. In der Dirac Notation schreibt man aber lockerer:

$$\mathbf{A} = \sum_{n,\mu} \lambda_n |\lambda_n, \mu\rangle \langle \lambda_n, \mu| + \sum_{\mu} \int \lambda |\lambda, \mu\rangle \langle \lambda, \mu| \, \mathrm{d}\lambda \,.$$
(5.30)

 $\mu$  ist hierbei ein zusätzlicher Index, um mögliche Entartungen zu beschreiben. Auch diese Entartung kann kontinuierlich sein. In der Literatur wird manchmal das Symbol

$$\sum_{\lambda}, \int d\lambda \to \oint_{\lambda}$$

verwendet, um kontinuierliche und diskrete Anteile gleichzeitig zu betrachten. Diese Notation wird im Folgenden nicht verwendet, da man auch so ohne weiteres unterscheiden kann, an welcher Stelle was zu verwenden ist.

Auch im unendlich-dimensionalen gibt es vollständige Sätze kommutierender, selbstadjungierter Operatoren. Funktionen und Differentation eines Operators nach einem Parameter sind analog zum endlich dimensionalen Fall aufzufassen.

# Matrixdarstellung

Mit zwei Einschiebungen der 1 erhält man

$$\mathbf{A} = \sum_{m,n} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n | \mathbf{A} | \varphi_m\rangle \langle \varphi_m | := \sum_{m,n} A_{mn} | \varphi_m\rangle \langle \varphi_n |$$

Wobei wir definiert haben  $A_{mn} = \langle \varphi_n | \mathbf{A} | \varphi_m \rangle$ . Die Wirkung auf einen ket  $|\psi\rangle = \sum \alpha_n |\varphi_n\rangle$  ergibt sich dann durch:

$$\mathbf{A}|\psi\rangle = \sum_{n,m} |\varphi_m\rangle \langle \varphi_m | \mathbf{A} | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \psi \rangle = \sum_{m,n} (A_{mn}\alpha_n) |\varphi_n\rangle$$

Diese Matrixdarstellung ist nur für beschränkte Operatoren wohldefiniert, für die das Spektrum diskret ist und diese Summe konvergiert.

Nun **zurück zum Ortsoperator**. Wir befassen und hier mit dem Hilbertraum  $L^2(\mathcal{U})$ , da die Wahrscheinlichkeitsdichten der Quantenmechanik in diesem liegen. D.h. das verwendete Skalarprodukt ist das aus Gl. 5.27.

Gemäß unserer Diskussion des Spektrums des Ortsoperators kann man diesen durch die Spektralzerlegung:

$$\hat{\mathbf{x}} = \int |\mathbf{x}\rangle \, \mathbf{x} \, \langle \mathbf{x} | \, \mathrm{d}\mathbf{x} \tag{5.31}$$

darstellen. Damit und mit der Definition des bras  $\langle \mathbf{x}_0 |$  aus (5.28) erhält man konsistent:

$$\langle \mathbf{\hat{x}} \rangle_{|\psi\rangle} := \langle \psi | \mathbf{\hat{x}} | \psi \rangle = \langle \mathbf{x} \rangle \,.$$

Der Erwartungswert des Aufenthaltsortes ist also durch den Erwartungswert des Operators gegeben. Dieser wird in Anlehnung an Kapitel 3 mit  $\langle \mathbf{x} \rangle_{|\psi\rangle}$  bezeichnet. Dieses Konzept wird noch häufig angewandt werden. Mittels der Vollständigkeitsrelation 5.29 erhält man sofort, dass die Ortszustände  $|\hat{\mathbf{x}}\rangle$  die (uneigentlichen) **Eigenzustände** des Ortsoperators sind:

$$\mathbf{\hat{x}}|\mathbf{x}'\rangle = \int |\mathbf{x}\rangle \, \mathbf{x} \, \langle \mathbf{x} \, |\mathbf{x}'\rangle \, \mathrm{d}\mathbf{x} = \mathbf{x}'|\mathbf{x}'\rangle \quad \stackrel{\mathrm{analog}}{\Rightarrow} \quad \langle \mathbf{x}|\mathbf{\hat{x}} = \mathbf{x}\langle \mathbf{x}|$$

Damit kann man auch zeigen:  $\langle \mathbf{x} | \hat{\mathbf{x}} | \psi \rangle = \mathbf{x} \langle \mathbf{x} | \psi \rangle$ . Dieses Ergebnis gilt so natürlich nur in der **Ortsdarstellung**  $\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle$ . Hier entspricht die Anwendung des Ortsoperators auf eine (Wellen)Funktion also einfach der Multiplikation mit dem Ortsvektor. Mithilfe der Spektralzerlegung kann man leicht zeigen, dass die Komponenten des Ortsoperators vertauschen.

$$[\hat{x}_i, \, \hat{x}_j] = 0 \, .$$

Dies bedeutet, dass man alle Komponenten des Ortes gleichzeitig exakt messen kann.

## 5.5.5 Impulsoperator

Im Folgenden wollen wir den Impulsoperator (in der Ortsdarstellung)

$$\hat{\mathbf{p}}: \psi(\mathbf{x}, t) \to -\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}}\psi(\mathbf{x}, t)$$
(5.32)

auf dem Definitionsbereich  $D_{\hat{\mathbf{p}}} = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^d) | d\psi/dx \in L^2(\mathbb{R}^d)\} := H^2(\mathbb{R}^d)$  betrachten. Man zeigt leicht mittels partieller Integration und der Bedingung, dass die Randterme verschwinden<sup>14</sup>, dass gilt:

$$\langle \varphi | \hat{\mathbf{p}} \psi \rangle = \langle \hat{\mathbf{p}} \varphi | \psi \rangle$$

Mit  $D_{\hat{\mathbf{p}}^{\dagger}} = D_{\hat{\mathbf{p}}}$  folgt dann, dass der Impulsoperator **selbstadjungiert** ist. Die **Eigenvek**toren folgen in der Ortsdarstellung aus der entsprechenden, leichten Differenzialgleichung  $\hat{\mathbf{p}}\psi = \mathbf{p}\psi$ :

$$\psi_p(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}.$$

Diese Eigenfunktion liegt offenbar nicht im  $L^2$ . Daher verwendet man auch für den Impulsoperator, analog zum Ortsoperator die Dirac-Notation. Also führt man das Funktional  $\langle \mathbf{p} | \notin \mathcal{H}^*$  ein:

$$\langle \mathbf{p} | \psi \rangle := \frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}} \int e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \psi(\mathbf{x},t) \,\mathrm{d}\mathbf{x} = \tilde{\psi}(\mathbf{p},t)$$
(5.33)

was mit der Zuordnung (5.23) im Einklang ist: Die Impulsdarstellung von  $|\psi\rangle$  ist die Fouriertransformierte der Ortswellenfunktion. Es handelt sich bei dem Integral um die Ortsdarstellung des Skalarproduktes.

 $<sup>^{14}\</sup>mathrm{Dies}$  ist für quadratintegrable Funktionen gegeben.

Somit ist wegen  $\langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{p} \rangle^*$  auch das Skalarprodukt  $\langle \psi | \mathbf{p} \rangle$  bekannt. In Analogie zum Ortsoperator erhält man aufgrund der Parseval Identität aus dem Skalarprodukt  $\langle \psi | \varphi \rangle$  auch eine Zerlegung der **1** der Form:

$$\mathbf{1} = \int |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p} | \, \mathrm{d}\mathbf{p} \qquad \Rightarrow \qquad \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

Das heißt der Impulsoperator besitzt eine Spektraldarstellung:

$$\mathbf{\hat{p}} = \int |\mathbf{p}\rangle \, \mathbf{p} \, \langle \mathbf{p} | \, \mathrm{d}\mathbf{p}$$

Diese wird dann entsprechend auch Impulsdarstellung genannt. Man erhält den **Erwar**tungswert des Impulses also durch:

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \langle \varphi \, | \mathbf{\hat{p}} | \varphi \rangle$$

Ein Vergleich von

$$\langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \int \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \psi \rangle \, \mathrm{d}\mathbf{x} = \int \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \, \psi(\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\mathbf{x}$$

mit Gl. 5.33 zeigt, dass gilt:

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}/\hbar} \,. \tag{5.34}$$

Somit kann auch rückwärts aus der Spektralzerlegung, bzw. den Impulseigenzuständen die Ortsdarstellung des Impulsoperators hergeleitet werden:

$$\langle \mathbf{x} \, | \mathbf{\hat{p}} | \psi \rangle = \int \langle \mathbf{x} \, | \mathbf{p} \rangle \mathbf{p} \langle \mathbf{p} \, | \psi \rangle \, \mathrm{d}\mathbf{p} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}} \int \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) \, \mathbf{p} \, e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \, \mathrm{d}\mathbf{p}$$
$$= -\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}} \left( \frac{1}{(2\pi\hbar)^{d/2}} \int \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \, \mathrm{d}\mathbf{p} \right) = -\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}} \, \langle \mathbf{x} \, | \psi \rangle$$

Da dies für beliebige  $|\psi\rangle$  gelten muss folgt die Darstellung. Analog zum Ortsoperator erhält man die Kommutatorrelation  $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$ . Insgesamt nennen wir die drei folgenden Kommutatorrelationen **kanonische Kommutatorrelationen**:

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \qquad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \qquad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}\mathbf{1}$$
(5.35)

Die dritte Identität nennt man auch Heisenbergsche Vertauschungsrelation. Die Komponenten des Impulses und des Ortes können also gleichzeitig exakt gemessen werden, wenn nicht versucht wird Impuls und Ort gleichzeitig zu messen. Es folgt eine hilfreiche Relation:

$$[\mathbf{\hat{x}}, \mathbf{\hat{p}}^2] = 2i\hbar\mathbf{\hat{p}}$$

Analog kann man auch den Ortsoperator in Impulsdarstellung definieren. Insgesamt gilt:

$$\begin{array}{lll} \mbox{Ortsdarstellung:} & \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x} \,, & \hat{\mathbf{p}} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}} \\ \mbox{Impulsdarstellung:} & \hat{\mathbf{x}} = \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{p}} \,, & \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p} \,. \end{array}$$

Der Impulsoperator, bzw. seine Darstellungen und Wirkungen folgen hier also auf die eine oder andere Weise aus der Identifizierung der Impulseigenzustände und den Zusammenhang zur Ortswellenfunktion über die Fourier Transformation. Grundlegender kann man in der Feldtheorie auch den Impulsoperator stets als den Generator von Translationen auffassen.

# 5.5.6 Räumliche Translation

Wir betrachten den Translationsoperator, der wie folgt auf die Ortszustände wirken soll:

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}|\mathbf{x}\rangle := |\mathbf{x} + \mathbf{a}\rangle$$

Unter Verwendung der Impulsdarstellung und zweifacher Benutzung von (5.34) erhält man:

$$|\mathbf{x} + \mathbf{a}\rangle = \int |\mathbf{p}\rangle e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}/\hbar} \langle \mathbf{p} |\mathbf{x}\rangle d\mathbf{p} := e^{-i\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{a}/\hbar} |\mathbf{x}\rangle$$

Damit erhält man also die Darstellung:

$$\hat{T}_{\mathbf{a}} = e^{-\mathrm{i}\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{a}/\hbar}$$

Da  $\hat{\mathbf{p}}$  selbstadjungiert ist sieht man sofort, dass  $\hat{T}_{\mathbf{a}}$  ein unitärer Operator ist. Hiermit kann man die Wirkung des Operators auf eine Ortsfunktion beschreiben:

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}(\psi(\mathbf{x})) = \langle \mathbf{x} | \hat{T}_{\mathbf{a}} | \psi \rangle = \langle \hat{T}_{-\mathbf{a}} \mathbf{x} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x} - \mathbf{a}).$$

# 5.6 Die Postulate der Quantenmechanik

Die bereits im Speziellen untersuchten Methoden lassen sich auf die allgemeine Behandlung von Systemen verallgemeinern. Dazu sind die Postulate der Quantenmechanik notwendig. Die nicht-relativistische Quantenmechanik lässt sich dabei als gesamte Theorie aus diesen Postulaten ableiten.

## 5.6.1 Zustände und physikalische Größen

**Postulat 1:** Die Zustände eines Quantensystems zu einem bestimmten Zeitpunkt  $t_0$  werden durch die Elemente eines separablen Hilbertraumes  $\mathcal{H}$  beschrieben. Man kann diese Elemente auf 1 normieren:  $\langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = 1$ .

• Der Hilbertraum ersetzt in der Quantenmechanik den Phasenraum aus der klassischen Mechanik.

**Postulat 2:** Jede physikalische Größe  $\mathcal{A}$  wird durch einen linearen selbstadjungierten Operator  $\hat{A}$  auf  $\mathcal{H}$  beschrieben.  $\hat{A}$  hat ein vollständiges System von Eigenvektoren. Man nennt  $\mathcal{A}$  bzw.  $\hat{A}$  eine **Observable**.

Nach dem Korrespondenzprinzip kann man, wenn A eine Funktion der Größen x und p (Ort und Impuls ist) als Operator ausdrücken durch:

$$\mathcal{A}(\mathbf{x},\mathbf{p}) \quad 
ightarrow \quad \hat{A}(\mathbf{\hat{x}},\mathbf{\hat{p}})$$

Hierbei muss die Reihenfolge ggf. so gewählt werden, dass der Operator selbstadjungiert ist. Oft muss man beispielsweise Produkte wie **xp** schreiben als  $(\mathbf{\hat{x}\hat{p}} + \mathbf{\hat{p}\hat{x}})/2$ . Dies nennt man auch **Symmetrisierung**.

# 5.6.2 Statistik und Messung

**Postulat 3:** Die möglichen Messwerte von  $\mathcal{A}$  sind die Eigenwerte von  $\hat{\mathcal{A}}$ .

• Hierbei ist wichtig, dass die Eigenwerte von selbstadjungierten Operatoren immer reell sind.

**Postulat 4:** Im Allgemeinen ist das Ergebnis einer Einzelmessung der Observablen  $\mathcal{A}$  nicht vorhersagbar. Misst man  $\mathcal{A}$  an einem System im Zustand  $|\psi\rangle$  ist die Wahrscheinlichkeit den (diskreten) Eigenwert  $\lambda_n$  der Operators  $\mathbf{A}$  zu messen gegeben durch:

$$w_{\lambda_n}\left(|\psi\rangle\right) = \sum_{\mu} |\langle\lambda_n, \mu |\psi\rangle|^2,$$

wobei die Summe über die Basis  $\{|\lambda_n, \mu\rangle\}$  des Eigenraumes zu  $\lambda_n$  läuft.

- In einem kontinuierlichen Eigenraum geht die Summe in ein Integral über $\sum_{\mu} \to \int \mathrm{d}\mu$  .
- Die Wahrscheinlichkeit das System in einem Teil eines Kontinuums  $d\lambda$  von Eigenwerten (also aus dem Spektrum) zu messen beträgt:

$$w_{\mathrm{d}\lambda}\left(|\psi\rangle\right) = \left(\sum_{\mu} |\langle\lambda,\mu\,|\psi\rangle|^2\right) \,\mathrm{d}\lambda$$

• Betrachtet man also einen Operator  $\hat{A}$  mit Spektrum  $\alpha_n$  und den Eigenzuständen  $|\alpha_n, \mu\rangle$  mit Entartung  $\mu$ . Dann gilt für den Erwartungswert:

$$\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \sum_{n} \alpha_{n} \sum_{\mu} |\langle \alpha_{n}, \mu | \psi \rangle|^{2} = \sum_{n,\mu} \langle \psi | \alpha_{n}, \mu \rangle \alpha_{n} \langle \alpha_{n}, \mu | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

Dabei kann der Eigenwert  $\alpha$  auch kontinuierlich sein. Es folgt:

Erwartungswert eines Operators: 
$$\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$
.

Ganz ähnlich zeigt man, dass die Gesamtwahrscheinlichkeit der Eigenwerte immer gleich 1 ist, die Wahrscheinlichkeiten eines einzelnen also stets  $\leq 1$ . Hierfür zerlegen wir noch  $|\psi\rangle$  in die Basis  $|\alpha_n, \mu\rangle$ :

$$\sum_{n,\mu} |\langle \alpha_n, \mu | \psi \rangle|^2 = \sum_{n,\mu} \left| \left\langle \alpha_n, \mu \right| \sum_{n',\mu'} c_{n'\mu'} |\alpha_{n'}, \mu' \rangle \right\rangle \right|^2 = \sum_{n,\mu} \left| \sum_{n',\mu'} c_{n'\mu'} \langle \alpha_n, \mu | \alpha_{n'}, \mu \rangle \right|^2$$
$$= \sum_{n,\mu} \left| \sum_{n',\mu'} c_{n'\mu'} \delta_{nn'} \delta_{\mu\mu'} \right|^2 = \sum_{n,\mu} |c_{n\mu}|^2 = 1$$

wegen der Normierung von  $|\psi\rangle$ .

**Postulat 5:** Ergibt die Messung der Observablen  $\hat{A}$  an einem System im Zustand  $|\psi\rangle$  den bestimmten Eigenwert  $\lambda_n$ , dann befindet sich das System nach der Messung in einem neuen Zustand  $|\psi'\rangle$ , der durch die Projektion des Zustandes  $|\psi\rangle$  auf den Eigenraum von  $\lambda_n$  gegeben ist.

• Dies fasst man Mathematisch zu:

$$|\psi'\rangle = \frac{\mathbf{P}_{\lambda_n}|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\mathbf{P}_{\lambda_n}|\psi\rangle}} \quad \text{mit} \quad \mathbf{P}_{\lambda_n} = \sum_{\mu} |\lambda_n,\mu\rangle \langle\lambda_n,\mu|$$

Man bezeichnet dies auch als Kollaps der Wellenfunktion. Die Norm kann man so schreiben, da  $\mathbf{P}_{\lambda_n}$  ein Projektor ist. Das heißt  $\mathbf{P}_{\lambda_n}^2 = \mathbf{P}_{\lambda_n}$ , wie man sich leicht klarmacht.

# 5.6.3 Dynamik des Systems

**Postulat 6:** Die zeitliche Entwicklung eines *isolierten* Systems ist durch die Schrödingergleichung gegeben:

$$\mathrm{i}\hbarrac{\partial}{\partial t}|\psi(t)
angle=\hat{H}\left|\psi(t)
ight
angle$$

 $\hat{H}$  wird Hamilton operator genannt und die zugehörige Größe ist die Gesamtenergie.

- Es ist interessant, dass die Schrödingergleichung, anders als die Newtonsche Bewegungsgleichung eine Differenzialgleichung erster Ordnung (in t) ist. Man benötigt also nur einen Anfangszustand  $|\psi(t_0)\rangle$ , um die Entwicklung des Systems zu beschreiben. In diesem Sinne ist auch die Quantenmechanik deterministisch.
- Die Schrödingergleichung erhält die Normierung, da  $\hat{H}$  selbstadjungiert ist:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|\psi\rangle = \langle\partial_t\psi|\psi\rangle + \langle\psi|\partial_t\psi\rangle = -\mathrm{i}\hbar\langle\psi|\hat{H}^{\dagger}|\psi\rangle + \mathrm{i}\hbar\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = 0$$

**Postulat 7:** Gegeben seien zwei (kinematisch getrennte) Systeme mit Hilberträumen  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$ . Dann ist der Hilbertraum  $\mathcal{H}$  des Gesamtsystems durch das Tensorprodukt  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  gegeben.

• Dieses Postulat wird später genauer beleuchtet.

# 5.7 Schrödingergleichung

# 5.7.1 Zeitentwicklung

Man zeigt leicht, dass die Lösung der Wellenfunktion für zeitunabhängige Hamiltonoperatoren (formal) gegeben ist durch:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}|\psi(t_0)\rangle$$

Dann bezeichnet man entsprechend

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t - t_0)\right) \tag{5.36}$$

als den **Zeitentwicklungsoperator**. Man kann zeigen, dass der Definitionsbereich dieses Operators auch der gesamte Hilbertraum ist. Ein Eigenzustand  $|\epsilon, \mu\rangle$  des Hamiltonoperators zum Eigenwert  $\epsilon$  entwickelt sich dann gemäß:

$$|\epsilon, \mu(t)\rangle = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\epsilon(t-t_0)\right)|\epsilon, \mu\rangle.$$

Der Zustand ändert sich also nur noch um eine Phase. Man nennt solche Eigenzustände des Hamiltonioperators auch stationäre Zustände des Systems. Die Eigenwertgleichung:

# zeitunabh. Schrödingergleichung: $\hat{H}|\epsilon,\mu\rangle=\epsilon|\epsilon,\mu\rangle$

nennt man aus diesem Grund auch stationäre oder zeitunabhängige Schrödingergleichung. Die Relevanz dieser Gleichung wird im Folgenden klar: Ist  $|\psi_0\rangle$  ein beliebiger Zustand so kann man ihn in der Basis der  $|\epsilon_n, \mu\rangle$  darstellen:

$$\psi_{0}\rangle = \sum_{n,\mu} \langle \epsilon_{n}, \mu | \psi_{0} \rangle \cdot | \epsilon_{n}, \mu \rangle$$

Dann ist klar, dass man die allgemeine Lösung ebenfalls als Überlagerung dieser Art darstellen kann:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,\mu} e^{-i\epsilon_n(t-t_0)/\hbar} \langle \epsilon_n, \mu | \psi_0 \rangle \cdot | \epsilon_n, \mu \rangle = \hat{U}(t, t_0) | \psi_0 \rangle$$

Somit kann man den Zeitentwicklungsoperator, wenn die Eigenzustände und Eigenwerte des  $\hat{H}$  bekannt sind auch angeben als:

$$\hat{U}(t,t_0) = \sum_{n,\mu} e^{-i\epsilon_n(t-t_0)/\hbar} |\epsilon_n,\mu\rangle \langle \epsilon_n,\mu|.$$

Ein weiteres Feature der zeitunabhängigen Schrödingergleichung ist, dass man unter Verwendung der Orthonormierung von  $|\epsilon_n, \mu\rangle$  und der Selbstadjungiertheit von  $\hat{H}$  erhält:

$$\langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle = \sum_{n,\mu} \epsilon_n |\langle \epsilon_n, \mu | \psi_0 \rangle|^2 \quad \text{und} \quad \langle \psi(t) | \hat{H}^2 | \psi(t) \rangle = \sum_{n,\mu} \epsilon_n^2 |\langle \epsilon_n, \mu | \psi_0 \rangle|^2$$

Die Varianz der Energiemessung verschwindet also nicht, wenn der Zustand sich zeitlich entwickelt. Ist das System zum Zeitpunkt  $t_0$  aber in einem einzelnen, diskreten Zustand gegeben:  $|\psi_0\rangle = \sum_{\mu} |\epsilon_n, \mu\rangle$ , so fällt in diesen Gleichungen die Summation über n weg. Dann folgt aus der Normierung des Zustandes  $|\psi_0\rangle$ , dass die Varianz der Energiemessung verschwindet.

## 5.7.2 Wahrscheinlichkeitsstromdichte

Gegeben sei die Schrödingergleichung in Ortsdarstellung für ein Teilchen der Masse m in einem reellen, zeitunabhängigen Potenzial:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{x},t) + V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x},t)$$

Betrachtet man zusätzlich die komplexe Konjugation dieser Gleichung, multipliziert diese beiden Gleichungen mit jeweils mit  $\psi$  (konjugierte) bzw.  $\psi^*$  ("originale") und subtrahiert diese dann so erhält man mit den Definitionen:

$$\mathbf{j}(\mathbf{x},t) := \frac{\hbar \mathbf{i}}{2m} \left( \psi(\mathbf{x},t) \,\nabla \psi^*(\mathbf{x},t) - \psi^*(\mathbf{x},t) \,\nabla \psi(\mathbf{x},t) \right) \,, \qquad \rho(\mathbf{x},t) = |\psi(\mathbf{x},t)|^2$$

die Kontinuitätsgleichung der Quantenmechanik:

Kontinuitätsgleichung: 
$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{x},t) + \nabla \cdot j(\mathbf{x},t) = 0$$

Dabei nennt man  $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$  entsprechend auch die **Wahrscheinlichkeitsstromdichte**. Die Änderung Wahrscheinlichkeit das Teilchen in einem Volumen V anzutreffen kann man also mit dem Gaußschen Integralsatz beschreiben durch:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}W_{\Omega}(t) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{V}\rho(\mathbf{x},t)\,\mathrm{d}\mathbf{x} = \int_{\partial V}\mathbf{j}\cdot\mathrm{d}\mathbf{S}\,.$$

## 5.7.3 Freies Teilchen

Für eine freies Teilchen ist der Hamiltonoperator nur durch den Operator der kinetischen Energie gegeben:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \,.$$

Wie in der klassischen Mechanik betrachten wir diese Gleichung nun eindimensional, da sich das Koordinatensystem ja in Richtung von  $\mathbf{p}$  orientieren lässt. In Impulsdarstellung lautet die stationäre Schrödingergleichung also:

$$\hat{H}|p\rangle = \frac{p^2}{2m}|p\rangle = \epsilon|p\rangle$$

Der Operator besitzt den zweifach entarteten, positiven (uneigentlichen) Eigenwert  $\epsilon = p^2/2m$  zu den (uneigentlichen) Eigenvektoren

$$|\epsilon,+\rangle = |p_{\epsilon} = \sqrt{2m\epsilon}\rangle$$
  $|\epsilon,-\rangle = |p_{\epsilon} = -\sqrt{2m\epsilon}\rangle$ .

Die Spektraldarstellung des H lautet also:

$$\hat{H} = \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \, \sum_{\mu=\pm} \epsilon |\epsilon, \mu\rangle \, \langle \epsilon, \mu| = \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}p \, \frac{p^2}{2m} |p\rangle \, \langle p|$$

Mithilfe der Zeitentwicklung aus dem vorherigen Kapitel schließen wir auf die Ortsdarstellung  $\psi(x, t)$ :

$$\langle x | \psi(t) \rangle = \psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p \, \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left(-\frac{p^2}{2m}t\right)\right) \langle p | \psi(0) \rangle \langle x | p \rangle$$

was mit Gl. 5.34 und der Identifikation  $\tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi(0) \rangle$  genau dem bereits diskutierten Ausdruck 5.22 entspricht.

 $\psi(p)$  ist hier *nicht* die durch die Fouriertransformation identifizierte Impulsfunktion aus (5.23). Diese ergibt sich durch Absorption des Exponenzialtermes. Da die so entstehende Zeitabhängigkeit aber nur eine Phase ist, ist die Norm erhalten, somit sind die messbaren Größen identisch:  $|\tilde{\psi}(p)| = |\tilde{\psi}(p,t)|$ . Daher bezeichnet man die Funktionen auch mit demselben Symbol  $\tilde{\psi}$ .

## 5.7.4 Eindimensionale Probleme

Der Hamiltonoperator eines spinlosen Teilchens ist für beliebige Potenziale  $V(\mathbf{x})$  nach dem Korrespondenzprinzip gegeben durch:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{\hat{x}}) \,.$$

Wir betrachten hier nur explizit **zeitunabhängige** Potenziale. In der eindimensionalen Ortsdarstellung lautet die stationäre Schrödingergleichung also:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = \varepsilon\psi(x)$$

Das Potenzial soll hierbei absolut beschränkt  $|V(x)| \leq C, \forall x$  und nur an endlich vielen Stellen unstetig sein. Man kann unter Verwendung der Schrödingergleichung für diese Einschränkungen von V(x) zeigen, dass die Wellenfunktion  $\psi(x)$  dieses Systems **stetig differenzierbar**, also insbesondere auch stetig ist. Im Folgenden wollen wir *stückweise konstante* Potenziale betrachten. Es werden z.T. nicht normierbare Wellenfunktionen von der Form ebener, "monochromatischer" Wellen auftreten. Diese sind dennoch zulässig, da wie hier nur in einer Idealisierung arbeiten. Real müssten wir diese nach getaner Arbeit noch geeignet, normierbar überlagern. Hingegen sind exponentiell anwachsende Wellenfunktionen auch bei Überlagerung nicht normierbar und somit vollständig unphysikalisch.

### Potenzialstufe

Wir betrachten eine Potenzialstufe der Form  $V(x) = V_0 \Theta(x)$ . Es ergeben sich zwei Differenzialgleichungen der Form

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) = -\text{const.}^2\psi$$

für zwei verschiedene Konstanten in den Bereichen x < 0 und x > 0.

### **Fall 1:** $\epsilon > V_0 > 0$ :

Die Allgemeine Lösung dieser Differenzialgleichung in den Teilräumen (x > 0 und x < 0) ist bekannt und lautet:

$$\psi(x) = Ae^{\mathbf{i}cx} + Be^{-\mathbf{i}cx}$$

Wir haben also 2 Funktionen dieser Form mit 2 verschiedenen bekannten Konstanten  $c = k = \sqrt{2m\epsilon}/\hbar$  für x < 0 und  $c = q = \sqrt{2m(\epsilon - V_0)}/\hbar$  für x > 0 und 4 unbekannte Konstanten A, B, C, D, wovon wir eine aber getrost auf 1 setzten können, da dies nur die Normierung am Ende beeinflusst. Übrig bleiben zwei Stetigkeitsbedingungen und 3 unbekannte Konstanten. Das heißt, es liegt ein zweifach entartetes System mit 2 linear unabhängigen Lösungen (im Sinne des Hilbertraum-Skalarproduktes) vor. Wir betrachten insbesondere den Fall, dass die Wellenfunktion für x > 0 keinen Term  $\exp(-iqx)$  besitzt, also ein "von links einfallendes Teilchen". Dann erhalten wir das System:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx} & x < 0\\ t e^{iqx} & x > 0 \end{cases}$$

Aus den Stetigkeitsbedingungen können wir die Konstanten r und t bestimmen. Man erhält:  $r = \frac{k-q}{k+q}$  und  $t = \frac{2k}{k+q}$ . Um die dynamischen Wellenfunktionen zu erhalten, müssen beide Funktionen noch mit  $\exp(-i\epsilon t/\hbar)$  multipliziert werden. Man erkennt in Analogie zur Elektrodynamik, dass anscheinend zunächst eine von links einlaufende Welle  $\exp(ikx)$ vorliegt, die dann an der Stufe in zwei Anteile r und t aufgeteilt wird. Um dies besser interpretieren zu können betrachten wir die Wahrscheinlichkeitsstromdichte. Nach kurzer Rechnung erhalten wir:

$$j_{x<0}(x,t) = \underbrace{\frac{\hbar k}{m}}_{j_{\text{ein}}} - \underbrace{\frac{\hbar k}{m} |r|^2}_{j_{\text{refl}}}, \qquad j_{x>0}(x,t) = \frac{\hbar}{m} q |t|^2 := j_{\text{transm.}}$$

Hieraus ergeben sich der sog. Transmissions- und Reflexionskoeffizient:

$$T := rac{j_{ ext{transm.}}}{j_{ ext{ein}}} = rac{q}{k} |t|^2 \,, \qquad R := rac{j_{ ext{refl.}}}{j_{ ext{ein}}} = |r|^2 \,.$$

Man erhält den Zusammenhang:

$$T+R=1\,,$$

der garantiert, dass die Wahrscheinlichkeit das Teilchen irgendwo im Raum anzutreffen gleich 1 ist.

**Fall 2:**  $0 < \epsilon < V_0$ 

Wir erhalten einen identischen Lösungsansatz im Bereich (x < 0). Im Bereich (x > 0) ist die Konstante  $q^2 < 0$ , das heißt q ist Komplex und somit i $q := \kappa$  reell und in diesem Fall auch positiv. Die Lösungen sind dann von der Form

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx} & x < 0\\ t e^{-\kappa x} & x > 0 \end{cases}$$

Den Lösungsanteil  $\exp(\kappa x)$  mussten wir auslassen, da ein divergenter Term der Forderung der Normierbarkeit der Funktion widerspricht. Aus den Stetigkeitsbedingungen erhalten wir die analogen Ausdrücke für r und t.

Für die Wahrscheinlichkeitsstromdichte  $j_{\text{transm.}}$  erhalten wir hier 0, da das Teilchen zwar (anders als in der klassischen Mechanik) in die Potenzialbarriere eindringen kann, aber die Wahrscheinlichkeit dann gegen 0 geht.

### Potenzialbarriere, Tunneleffekt

Wir betrachten ein Plateauförmiges Potenzial

$$V = V_0 \Theta(a - |x|) = \begin{cases} 0 & x < -a \\ V_0 & x \in [-a, a] \\ 0 & a > x \end{cases}, \quad V_0, a > 0$$

Die Wellenfunktion hat dann erneut die bekannte Form von oben, nur, dass es 3 Bereiche gibt, also 6 - 1 = 5 unbekannte Konstanten, 1 Normierungsbedingung und 4 Stetigkeitsbedingungen. Explizit für  $0 < \varepsilon < V_0$  erhalten wir:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{\mathbf{i}kx} + r \, e^{-\mathbf{i}kx} & x < -a \\ Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} & x \in (-a,a) \\ te^{\mathbf{i}kx} + Ce^{-\mathbf{i}kx} & a > x \end{cases}, \quad \text{mit} \quad k = \frac{\sqrt{2m\epsilon}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - \epsilon)}}{\hbar}$$

Der Term  $e^{\kappa x}$  kann hier nicht einfach vernachlässigt werden, da er ja nicht im Unendlichen gilt. Unter Verwendung der 4 Stetigkeitsbedingungen<sup>15</sup> erhält man:

$$\begin{pmatrix} 1\\r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\cosh(2\kappa a) + i\frac{\gamma}{2}\sinh(2\kappa a)\right)e^{2ika} & i\eta\sinh(2\kappa a)\\ -i\eta\sinh(2\kappa a) & \left(\cosh(2\kappa a) - i\frac{\gamma}{2}\sinh(2\kappa a)\right)e^{-2ika} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} t\\C \end{pmatrix}$$

wobe<br/>i $\gamma=\kappa/k-k/\kappa$ und $\eta=\kappa/k+k/\kappa.$  Für den Spezialfall<br/> C=0erhalten wir insbesondere

$$|t|^{2} = \frac{1}{1 + \left(1 + \frac{\gamma^{2}}{4}\right)\sinh^{2}(2\kappa a)}$$

Natürlich hängt die Wahrscheinlichkeitsstromdichte wieder von  $|t|^2$  ab. Das Teilchen kann also **die Barriere durchdringen.** Dieses Phänomen wird auch im Experiment beobachtet und **Tunneleffekt** genannt.

#### Potenzialtopf

Analog zur Potenzialbarriere kann man auch den Potenzialtopf betrachten. Die Gleichung ist analog:  $V(x) = -V_0\Theta(a - |x|), V_0, a > 0$ . Man erhält erneut drei verschiedene Lösungen in den drei Bereichen. Wir betrachten explizit die Frage: Gibt es Eigenzustände des H mit  $-\mathbf{V_0} < \varepsilon < \mathbf{0}$ ?

Wegen der Spiegelsymmetrie des Potenzials ist es vorzuziehen, anstatt der zwei komplexen Exponentialfunktionen, wie oben, direkt eine gerade (symmetrische) Lösung mit  $\cos(\cdot)$  und eine ungerade (antisymmetrische) Lösung mit  $\sin(\cdot)$  anzusetzten. Da die Wellenfunktionen im Unendlichen verschwinden müssen, gilt:

$$\psi_g(x) = \begin{cases} e^{\kappa x} & x < -a \\ A\cos(kx) & x \in [-a,a) \\ e^{-\kappa x} & a > x \end{cases}, \quad \psi_u(x) = \begin{cases} -e^{\kappa x} & x < -a \\ A\sin(kx) & x \in [-a,a) \\ -e^{-\kappa x} & a > x \end{cases},$$

<sup>&</sup>lt;sup>15</sup>Die aufwändige Rechnung hierzu verkürzt sich, wenn man die Gleichungen in Matrix-Vektor Schreibweise darstellt, wobei man die Exponentialfunktionen in den Matrizen zusammenfasst.

mit den Konstanten:

$$k = \frac{\sqrt{2m(\varepsilon + V_0)}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2m\varepsilon}}{\hbar}$$

Aus den Stetigkeitsbedingungen erhält man hier verschiedene Bedingungen für den Zusammenhang zwischen k und  $\kappa$ . Die auftretenden Gleichungen lassen sich allerdings nur noch numerisch lösen. Insgesamt ergibt sich für  $\varepsilon < 0$  ein **diskretes Spektrum von gebundenen Zuständen**. Analog erhält man für  $\varepsilon > 0$  ein zweifach entartetes kontinuierliches Spektrum von Streuzuständen.

## 5.7.5 Paritätsoperator

Wie beim Potenzialtopf bereits angedeutet ist es oft von Interesse gewisse räumliche Symmetrien auszunutzen. Um diese genauer untersuchen zu können definieren wir die Paritätstransformation:

$$\mathbf{x} 
ightarrow -\mathbf{x}$$

Man kann dieser Transformation einen Operator  $\hat{P}$  zuordnen:

$$\hat{P}|\mathbf{x}\rangle = |-\mathbf{x}\rangle \qquad \Rightarrow \qquad \hat{P}\psi(\mathbf{x}) = \hat{P}\langle \mathbf{x} |\psi\rangle = \psi(-\mathbf{x})$$

Es ist klar, dass gilt:  $\hat{P}^2 = \mathbf{1}$  und mittels der Integraldefinition des Skalarproduktes in Ortsdarstellung<sup>16</sup> zeigt man leicht, dass er auch selbstadjungiert ist. Insgesamt ist er also selbstadjungiert und unitär. D.h. er besitzt die Eigenwerte ±1. Die dazugehörigen Eigenvektoren sind **gerade und ungerade Wellenfunktionen**. Für einen Hamiltonoperator der Form:  $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + V(\hat{\mathbf{x}})$  mit symmetrischem Potenzial  $V(\mathbf{x}) = V(-\mathbf{x})$  zeigt man leicht:

$$[\hat{H}, \,\hat{P}] = 0$$

Das bedeutet, dass  $\hat{H}$  und  $\hat{P}$  eine gemeinsame Basis von Eigenfunktionen. Also sind die **Eigenfunktionen des**  $\hat{H}$  in diesem Fall ebenfalls **gerade oder ungerade**.

# 5.7.6 Schrödingergleichung in mehreren Dimensionen

In mehreren Dimensionen ist die Schrödingergleichung natürlich deutlich komplizierter.

#### N-fache Separation

Man kann aber für den Fall, dass der Hamiltonoperator in eine Summe zerlegt werden kann, leicht separieren. Besonders einfach wird die Separation, wenn nur ein Operator zu einer Koordinate und zugeordnetem Impuls, explizit von der Zeit abhängt. Wir bezeichnen diesen als  $H_1$ :

$$\hat{H} = \hat{H}_1(\hat{x}_1, \hat{p}_1, t) + \sum_{n=2}^N \hat{H}_n(\hat{x}_n, \hat{p}_n)$$

 $<sup>^{16}\</sup>mathrm{Der}$ hierbei verwendete Hilbertraum ist der  $L^2$ also der Hilbertraum der Wellenfunktionen.

Ein Separationsansatz der Form:

$$\psi(\mathbf{x},t) = u_1(x_1,t) \prod_{n=2}^N u_n(x_n)$$

führt eingesetzt in die Schrödingergleichung auf:

$$\hat{H}_1 \psi + \sum_{n=2}^N \hat{H}_n \psi = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi.$$

Es wird als erstes der zeitabhängige Anteil separiert:

$$\frac{(\hat{H}_1 u_1)}{u_1} - \mathrm{i}\hbar \frac{\frac{\partial}{\partial t} u_1}{u_1} = -\frac{\sum\limits_{n=2}^N \hat{H}_n \psi}{\psi} \,.$$

Nun kann rechts die Zeitabhängigkeit gekürtzt werden. Dann folgt der Separationsschritt: Da beide Seiten von verschiedenen variablen abhängen müssen beide gleich derselben Konstanten sein. Diese bezeichnen wir mit -E:

$$(\hat{H}_1 + E) u_1 = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u_1$$
 und  $\sum_{n=2}^N \hat{H}_n \prod_{n=2}^N u_n = E \prod_{n=2}^N u_n$ .

Die rechte Gleichung kann weiter separiert werden, sodass man insgesamt erhält:

$$\hat{H}_k u_k = E_k u_k \quad k = 2, \dots N, \qquad E = \sum_{i=2}^N E_i.$$

Wir erhalten also eine Zeitabhängige und (N-1)-zeitunabhängige Schrödingergleichungen. Dieses Vorgehen ähnelt stark der Bestimmung der Wirkung S(q, p) in der Hamilton-Jacobi Theorie. Man kann so z.B. das isotrope dreidimensionale Oszillatorproblem lösen. Ist der Hamiltonoperator zeitunabhängig so kann man die zeitabhängige Gleichung ein weiteres mal separieren und erhält einen Faktor  $\propto \exp(-iEt/\hbar)$ . Dies ist dann eine globale Phase, die sich im Betragsquadrat eliminiert.

### Produktwellenfunktion

Eine schwächere Forderung ist, dass man nicht für jede Variable, sondern nur für eine Gruppe Zerlegungen des Hamiltonoperators findet, z.B.:

$$H = H_1(\hat{x}_1, \hat{p}_1, \dots, \hat{x}_g, \hat{p}_g, t) + H_2(\hat{x}_{g+1}, \hat{p}_{g+1}, \dots, \hat{x}_n, \hat{p}_n).$$

Ein Separationsansat<br/>z $\psi=\varphi_1(x_1,...,x_g,t)\phi_2(x_{g+1},...,x_n)$  führt hier analog zu zwei Gleichungen:

$$(\hat{H}_1 + E)\varphi_1(x_1, ..., x_g, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\varphi_1(x_1, ..., x_g, t)$$
$$\hat{H}_2\phi_2(x_{g+1}, ..., x_n) = E\phi_2(x_{g+1}, ..., x_n)$$

mit der Gesamtenergie  $E = E_1 + E_2$ . Natürlich kann man dies auch für eine andere Anzahl an Gruppierungen durchführen.

# 5.8 Der Harmonische Oszillator

Wie schon in der klassischen Mechanik gesehen ist der Harmonische Oszillator nicht nur ein pädagogisches Beispiel zum Erlernen der Vorgehensweisen, sondern ein wichtiges Mittel zur Näherung von Problemen, da das Harmonische-Oszillator-Problem analytisch lösbar ist. Der Ansatz dieser Näherung ist, dass sich jedes Potenzial in der Nähe seines Minimums an der Stelle  $x_0$  näherungsweise durch die Potenzreihe

$$V(x) = V(x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \mathcal{O}((x - x_0)^3)$$
(5.37)

beschreiben lässt. Hierbei fällt die erste Ableitung natürlich weg, da  $V'(x_0) = 0$  am Extremum gilt. Die Dynamik des Teilchens ist dann in der klassischen Mechanik z.B. im Lagrange Formalismus gegeben durch:

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x_0) - \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}m\dot{x} = -V''(x_0)(x - x_0)$$

Die allgemeine Lösung dieser Differenzialgleichung ist dann gegeben durch:

$$x = A\cos(\omega t) + B\sin(\omega t) + x_0$$
, mit  $\omega = \frac{V''(x_0)}{m}$ 

Auch in der Quantenmechanik kann die, die Dynamik beschreibende Gleichung, also die Schrödingergleichung, für den Harmonischen Oszillator analytisch gelöst werden.

# Lösung mit Operatormethode

Wir wollen nun den Lösungsweg der eindimensionalen Schrödingergleichung für das Potenzial  $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ , also den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$$

skizzieren. In der Ortsdarstellung ist diese einfach gegeben durch:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right)\varphi(x) = \varepsilon\varphi(x)\,.$$

Um diese zu lösen wird die Methode der **Leitoperatoren** verwendet, die von Paul Dirac entwickelt wurde. Wir definieren die Operatoren:

$$a := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x} + \frac{\mathrm{i}\hat{p}}{m\omega} \right) \quad \Rightarrow \quad a^{\dagger} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x} - \frac{\mathrm{i}\hat{p}}{m\omega} \right)$$

Mittels der kanonischen Kommutatorrelationen  $(5.35)^{17}$  zeigt man leicht die wichtige Eigenschaft:

$$[a, a^{\dagger}] = \mathbf{1} \,. \tag{5.38}$$

<sup>&</sup>lt;sup>17</sup>Hier  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \mathbf{1}$ , da das Problem eindimensional ist.

Die Verkettung

# **Besetzungszahloperator:** $\hat{N} = a^{\dagger}a$

bezeichnen wir als Besetzungszahloperator, was später klar werden wird. Dieser ist offensichtlich **selbstadjungiert**. Damit kann man den Hamiltonoperator umschreiben:

$$\hat{H} = \hbar \omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \mathbf{1} \right) \,.$$

Im Folgenden werden wir den Einheitsoperator oft weglassen. Betrachten wir also Eigenwerte und Eigenzustände des  $\hat{N}$ , denn:

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{H}|n\rangle = \underbrace{\hbar\omega(n+1/2)}_{:=\varepsilon_n}|n\rangle$$

Aus den Eigenschaften:  $[\hat{N}, a^{\dagger}] = a^{\dagger}$  und  $[\hat{N}, a] = -a^{18}$  ergibt sich:

$$\hat{N}a^{\dagger}|n\rangle = (n+1)a^{\dagger}|n\rangle, \qquad \hat{N}a|n\rangle = (n-1)a|n\rangle$$

Also sind  $a^{\dagger}|n\rangle$  und  $a|n\rangle$  auch Eigenzustände des  $\hat{N}$  mit den obigen Eigenwerten. Die Energiedifferenz zwischen  $a^{\dagger}|n\rangle$  und  $|n\rangle$  bzw.  $a|n\rangle$  und  $|n\rangle$  entsprechen jeweils  $\hbar\omega$ , also einem **Energiequantum**. Daher bezeichnet man  $a^{\dagger}$  auch als den **Erzeugungs-** und a als den **Vernichtungsoperator**. Aus der Eigenwertgleichung von  $\hat{N}$  folgt:

$$a^{\dagger}|n\rangle \propto |n+1\rangle$$
 und  $a|n\rangle \propto |n-1\rangle$ 

Aus der definitionsgemäßen Normierung der Eigenvektoren folgen die Proportionalitätskonstanten:

$$a^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \qquad a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$
(5.39)

Hieraus folgt außerdem, dass  $n \ge 0$  sein muss, da dies ja wieder Eigenvektoren zu  $\hat{N}$  sind, der nur reelle Eigenwerte hat. Jede reelle Zahl n kann zudem als  $n = \nu + \lambda$  mit  $\nu \in \mathbb{N}_0$  und  $\lambda \in [0, 1)$  dargestellt werden. Wendet man nun  $a \nu$ -mal auf den Eigenvektor  $|n\rangle$  des  $\hat{N}$  an, so erhält man

$$a^{\nu}|n\rangle = \sqrt{n(n-1)\cdot\ldots\cdot(n-\nu+1)}|\lambda\rangle := \gamma|\lambda\rangle$$

mit  $\gamma \geq 0.$  Da nun aber bei der nächsten Iteration:

$$a^{\nu+1}|n\rangle = \gamma a|\lambda\rangle$$

ist darf der neue Eigenwert  $\gamma(\lambda - 1)$  nicht existieren, da er kleiner als 0 wäre. Es muss  $a^{\nu+1}|n\rangle = 0$  gelten. Daraus folgt:

$$0 = \gamma^2 ||a|\lambda\rangle|| = \gamma^2 \langle a\lambda |a\lambda\rangle = \gamma^2 \langle \lambda |a^{\dagger}a|\lambda\rangle = \gamma^2 \langle \lambda |N|\lambda\rangle = \gamma^2 \lambda$$

Also insgesamt  $\lambda = 0$ . Damit sind alle **Eigenwerte von**  $\hat{N}$  **nicht-negative ganze Zahlen**:  $n \in \mathbb{N}_0$ . D.h. die Eigenenergien des Harmonischen Oszillators sind:

$$\varepsilon_n = \hbar \omega (n+1/2), \quad n \in \mathbb{N}.$$

Das Spektrum ist diskret und alle Eigenzustände sind gebundene Zustände.

 $<sup>^{18}</sup>$ Diese folgen aus Gl. 5.38

### Grundzustand

Ausgehend vom Grundzustand mit der **Nullpunktsenergie**  $\varepsilon_0 = \hbar \omega/2$  können alle Eigenzustände des  $\hat{H}$  bestimmt werden. Nun ist im Grundzustand n = 0 und somit  $a|0\rangle = 0$ . In der Ortsdarstellung wird dies zu der Gleichung:

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_0(x) = 0 \,.$$

Diese Differenzialgleichung lässt sich durch Trennung der Variablen einfach lösen und man erhält eine Gaußglocke der Form:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right) \quad \text{mit} \quad x_0 := \frac{\hbar}{m\omega}$$

wobei der Vorfaktor aus der Normierung folgt. Durch Anwenden des Erzeugungsoperators erhält man gemäß Gl. 5.39 die weiteren **angeregten** Zustände durch:

$$|n\rangle = \frac{\left(a^{\dagger}\right)^{n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

In der Ortsdarstellung kann man die Eigenzustände durch die sog. Hermitepolynome

**Hermitepolynome:** 
$$H_n(q) := e^{q^2/2} \left(q - \frac{\partial}{\partial q}\right)^n e^{-q^2/2}$$

ausdrücken:

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n! \, 2^n}} \, \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)$$

Man erkennt, dass alle Eigenzustände im Unendlichen gegen Null abfallen, da die Exponentialfunktion alle Polynome dominiert. Das heißt, die Eigenzustände sind gebunden. Dies ist eine Folge davon, dass das Potenzial gegen unendlich strebt. Zudem ist offenbar **keiner** der Eigenwerte **entartet**. Die Eigenzustände bilden, da  $\hat{H}$  ein selbstadjungierter Operator ist, eine ONB des Hilbertraumes  $L^2(\mathbb{R})$ . Es existiert also eine Zerlegung der 1, sowie eine Spektraldarstellung in der Form:

$$\mathbf{1} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|, \qquad \hat{H} = \hbar \omega \sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2}\right) |n\rangle \langle n|$$

Für große n werden die Ortsdarstellungen der Eigenfunktionen (also die  $\varphi_n$ ) immer breiter  $(\sim \sqrt{n})$ . Dadurch kann man nicht beliebig hohe Energien als gute Näherung wie in (5.37) annehmen.

# 5.9 Drehimpulsoperatoren

Die Betrachtung von Drehimpulsen in der Quantenmechanik wird uns zu überraschenden Ergebnissen führen, die aus der klassischen Mechanik nicht bekannt sind. Insbesondere wird sich ergeben, dass Drehimpulsoperatoren quantisiert sind und verschiedene Raumkomponenten von Drehimpulsoperatoren nicht kommutieren.

# 5.9.1 Allgemeiner Drehimpulsoperator

Allgemein bezeichnet man einen (Vektor) Operator<br/>  $\mathbf{\hat{j}}$  als Drehimpulsoperator, wenn er die Eigenschaft:

$$[\hat{j}_k, \, \hat{j}_l] = \mathrm{i}\hbar\,\varepsilon_{kln}\,\hat{j}_n \tag{5.40}$$

erfüllt. Operatoren dieser Art beschreiben die folgenden Systeme:

- Bahndrehimpuls eines oder mehrerer Teilchen,
- "Spin" eines oder mehrerer Teilchen,
- Komposition von Bahndrehimpuls und Spin eines oder mehrerer Teilchen.

Aus der Eigenschaft (5.40) folgt:

$$[\hat{\mathbf{j}}^2, \, \hat{j}_i] = 0.$$
 (5.41)

Insbesondere betrachten wir als ausgezeichnete Richtung *i* die *z*-Richtung. Uns interessiert das gemeinsame Spektrum von  $\hat{\mathbf{j}}^2$  und  $\hat{j}_z$ . Wir bezeichnen die Eigenwerte und Eigenvektoren wie folgt:

$$\mathbf{\hat{j}}^{2}|j, m_{j}, \nu\rangle = \hbar^{2}j(j+1)|j, m_{j}, \nu\rangle$$
$$\hat{j}_{z}|j, m_{j}, \nu\rangle = \hbar m_{j}|j, m_{j}, \nu\rangle$$

Der zusätzliche Index  $\nu$  charakterisiert die (mögliche) Entartung der Eigenwerte. Dieser wird im Folgenden aber nicht mitgeschrieben, um die Gleichungen übersichtlicher zu gestalten. Man bezeichnet den Eigenwert zu  $\mathbf{\hat{j}}^2$  mit j(j+1), da so später eine schönere Beziehung zwischen  $m_j$  und j folgt. Nun ist  $\mathbf{\hat{j}}^2$  ein positiver Operator, in dem Sinne, dass  $\langle \psi | \mathbf{\hat{j}}^2 | \psi \rangle \geq 0$  ist. Daraus folgt sofort (durch Multiplikation mit dem Eigenvektor von links), dass  $j(j+1) \geq 0$ . Es gilt außerdem

$$\langle j, m_j | \hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{j}_z^2 | j, m_j \rangle = \hbar^2 \left( j(j+1) - m_j^2 \right) \ge 0 \quad \Leftrightarrow \quad m_j^2 \in (-j(j+1), j(j+1))$$

Zur genaueren Bestimmung von j und  $m_j$  definieren wir, ähnlich zur Diskussion des harmonischen Oszillators, den Auf- und den Absteigeoperator:

$$\hat{j}_{+} := \hat{j}_{x} + i\hat{j}_{y}$$
, und  $\hat{j}_{+}^{\dagger} = \hat{j}_{-} := \hat{j}_{x} - i\hat{j}_{y}$ 

Aus den Kommutatorrelationen folgt dann die Eigenschaften:

$$[\hat{j}_z, \,\hat{j}_\pm] = \pm \hbar \,\hat{j}_\pm \,, \qquad [\hat{\mathbf{j}}^2, \,\hat{j}_\pm] = 0$$

Dadurch kann man zeigen, dass  $\hat{j}_{\pm}|j,m_j\rangle$  ebenfalls Eigenzustand zu  $\hat{\mathbf{j}}^2$  und  $\hat{j}_z$  ist. Analog zum Harmonischen Oszillator folgt daraus wieder eine Proportionalität:

$$\hat{j}_{\pm}|j, m_j\rangle \propto |j, m_j \pm 1\rangle$$
.

Mittels der Norm kann man dann zeigen:

$$\hat{j}_{\pm}|j,m_j\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m_j(m_j \pm 1)} |j,m_j \pm 1\rangle$$
(5.42)

Da  $m_j$  eingeschränkt ist existiert ein  $m_{j,\max}$ , sodass gilt:  $\hat{j}_+|j,m_{j,\max}\rangle = 0$ , folgt aus  $0 = \langle \hat{j}_+ j, m_{j,\max} | \hat{j}_+ j, m_{j,\max} \rangle = \langle j, m_{j,\max} | \hat{j}_- \hat{j}_+ | j, m_{j,\max} \rangle$ , dass  $m_{j,\max} = j$  und analog, dass  $m_{j,\min} = -j$  ist. Insgesamt ist also

$$2j = m_{j,\max} - m_{j,\min}$$

Da  $j_+$  den Wert von  $m_j$  immer um 1 erhöht muss  $m_j$  stets eine **ganze Zahl** sein. Sonst würden nämlich Eigenvektoren  $|j, m_j + \lambda\rangle$ ,  $\lambda \in \mathbb{R}$  existieren, sodass  $m_{j,\max} = j$  nicht getroffen wird, die "Reihe" also nicht abbricht. Also ist j ganz- oder halbzahlig, mit:

j ganz- oder halbzahlig,  $m_j \in [-j, j] \cap \mathbb{N}_0$ .

#### Spin

Für den Elektronenpin gilt nach dem Stern-Gerlach-Versuch:

$$\mathbf{\hat{s}}^2 = rac{\hbar^2}{4}\sigma^2 = rac{3\hbar^2}{4}\,\mathbf{1} = rac{1}{2}\left(rac{1}{2}+1
ight)\hbar^2$$

dass nur ein Eigenwert zu  $\hat{\mathbf{s}}^2$  existiert. Allgemein nennt man Teilchen mit s = 1/2 Fermionen und Teilchen mit s = 1 Bosonen. Mittels der Wahl der Basis  $|\mathbf{z}, \pm\rangle$  liegt die Darstellung des Operators  $\sigma_3$  sofort fest. Man erhält die anderen beiden Pauli-Matrizen dann durch Konstruktion mittels der Auf- und Absteigeoperatoren:

$$\hat{j}_x = \frac{1}{2}(\hat{j}_+ + \hat{j}_-), \qquad \hat{j}_y = \frac{1}{2i}(\hat{j}_+ - \hat{j}_-)$$

deren Wirkung ja durch (5.42) bekannt ist. So kann man auch vorgehen, wenn z.B. der Drehimpuls in einem System betrachtet wird.

## 5.9.2 Bahndrehimpuls

Mithilfe des Korrespondenzprinzipes können wir aus dem klassischen Drehimpuls  $\mathbf{l} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} = \varepsilon_{ijk} r_j p_k \mathbf{e}_i$  den Operator:

$$\mathbf{\hat{l}}=\mathbf{\hat{x}}\times\mathbf{\hat{p}}$$

erzeugen. Mithilfe der kanonischen Kommutatorrelationen (5.35) können wir zeigen:

$$[\hat{l}_j, \, \hat{l}_k] = \mathrm{i}\hbar\,\varepsilon_{jkn}\,\hat{l}_n \tag{5.43}$$

Außerdem folgt aus diesen, dass jede Komponente des Operators **selbstadjungiert** ist, also auch der ganze "Vektor"-Operator. Somit sind die Bedingungen von oben erfüllt. Des Weiteren definieren wir das Quadrat des Drehimpulses und erhalten die Beziehung:

$$\hat{\mathbf{l}}^2 := \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2, \qquad [\hat{\mathbf{l}}^2, \, \hat{l}_i] = 0$$

Diese Eigenschaft kann man mit (5.43) zeigen.

### Kugelkoordinaten:

Mit etwas Rechenaufwand kann man die Komponenten des Drehimpulsoperators auf Kugelkoordinaten umformen. Man erhält insbesondere:

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right) := -\hbar^2 \Delta_{r=1}, \qquad \hat{l}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}$$
$$\hat{l}_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$

Anhand dieser Darstellung<sup>19</sup> erkennt man sofort dass der Hamiltonoperator eines Systems mit einem, nur vom Abstand abhängigen Potenzial V = V(r), mit  $\hat{\mathbf{l}}^2$  und  $\hat{l}_z$  kommutiert. Um die Eigenwertgleichungen dieser Operatoren zu lösen, machen wir einen Separationsansatz in der Ortsdarstellung:

$$\langle \mathbf{x} | l, m_l, \mu \rangle = \psi_{\mu,l,m_l}(\mathbf{x}) = Y_{l,m_l}(\theta, \varphi) R_{\mu,l,m_l}(r)$$

 $\mu$  ist hierbei, wie bereits  $\nu$  bei der Diskussion des allgemeinen Drehimpulsoperators ein zusätzlicher Index der die Entartung beschreibt, aber auch hier nicht mitgeschrieben wird. Oft wird in der Literatur  $m_l = m$  geschrieben. Die Eiegenfunktionen  $Y_{l,m}$  nennt man auch **Kugelflächenfunktionen**. Aus der Eigenwertgleichung für  $\hat{l}_z$  folgt sofort:

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \tilde{Y}_{l,m}(\theta) e^{im\varphi}$$

Aus der Struktur der Kugelkoordinaten folgt:  $Y_{l,m}(\theta, \varphi + 2\pi) = Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ . Dafür muss aber gelten:

Die Drehimpulsquantenzahlen m und somit auch l sind **ganzzahlig**!

Es muss außerdem mit  $m = m_{\text{max}} = l$  gelten:  $\hat{l}_+ Y_{l,l}(\theta, \varphi) = 0$ . Aus dieser Gleichung und der Normierungsbedingung kann man eine Darstellung der Funktion  $\tilde{Y}_{l,l}$  herleiten. Um nun auf  $Y_{l,m}$  mit  $m \leq l$  zu schließen, wendet man wiederholt den Absteigeoperator an:

$$|l,m\rangle = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(2l)!(l-m)!}} \left(\frac{\hat{l}_{-}}{\hbar}\right)^{l-m} |l,l\rangle$$

 $<sup>^{19}\</sup>Delta_{r=1}$  ist der Winkelanteil des Laplace Operator in Kugelkoordinaten, wobei der Radius auf den konstanten Wert 1 gesetzt ist.

Unter Verwendung der Tatsache:  $e^{-i\varphi}\sin\theta \hat{l}_{-} = \hat{l}_{-}e^{-i\varphi}\sin\theta$  kann weitere Darstellungen dieser sog. **Kugelflächenfunktionen** herleiten. Insgesamt ist für uns die Darstellung:

**Kugelflächenfunktionen:** 
$$Y_{l,m}(\theta,\varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos\theta)$$

mit den zugeordneten Legendre Polynomen (auch Legendre Funktionen):

$$P_l^m(\cos\theta) = \sin^m\theta \frac{d^m}{d(\cos\theta)^m} P_l(\cos\theta), \qquad P_l(z) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}z^l} (1-z^2)^l$$

relevant. Insgesamt bilden die Kugelflächenfunktionen also ein bezüglich l und m VONS. Aus Eigenschaften der Legendre Funktionen folgt zudem die Gleichung:

$$Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{l,-m}^*$$
.

Damit kann man durch Linearkombinationen zweier (komplexer) Kugelflächenfunktionen eine reelle Darstellung  $\tilde{Y}_{l,m}$  erreichen:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{l,m} + (-1)^m Y_{l,-m}) = \sqrt{2} \cos(m\varphi) \tilde{Y}_{l,m} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} (Y_{l,m} - (-1)^m Y_{l,-m}) = \sqrt{2} \sin(m\varphi) \tilde{Y}_{l,m}$$

Diese sind aber offenbar keine Eigenfunktionen mehr von  $\hat{l}_z$ . Auch die Legendre Funktionen sind (bezüglich l) **orthnormiert**. Insgesamt ist also:

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \, \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \, Y_{l,m}^* Y_{l',m'} \sin\theta = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$$

Außerdem sind die Kugelflächenfunktionen vollständig, mit:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} Y_{l,m}^*(\theta,\varphi) Y_{l,m}(\theta',\varphi') = \delta(\varphi-\varphi') \,\delta(\theta-\theta') \frac{1}{\sin\theta} \,.$$

Der Sinus tritt als Funktionaldeterminante der Kugelkoordinaten auf. Es folgt also eine Zerlegung der 1 in der Form:

$$\sum_{\mu}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\ket{l,m,\mu}ig\langle l,m,\muert=\mathbf{1}$$

Die zusätzliche Quantenzahl  $\mu$  bezieht sich hier dann auf Radius-abhängige Anteile, da jede Funktion, die nur abhängig vom Radius ist offensichtlich Eigenfunktion von  $\hat{\mathbf{l}}^2$  und  $\hat{l}_z$  ist
#### Partität und Kugelflächenfunktionen

In Kugelkoordinaten kann man sich vorstellen, dass die Parität durch Verschiebung der Winkel zu:

$$\varphi \to \varphi + \pi$$
,  $\theta \to \pi - \theta$ 

darstellt. Dadurch erhält man, dass für die Kugelflächenfunktionen wegen  $e^{im\pi} = (-1)^m$ und  $\cos(\pi - \theta) \rightarrow -\cos(\theta)$  gilt:

$$\hat{P}Y_{l,m} = (-1)^l Y_{l,m} \,.$$

# 5.9.3 Rotation und Drehimpulsoperator

Wir definieren einen Operator  $\hat{T}_{\mathbf{e}_{z},\alpha}$ , der eine Rotation um die z-Achse mit dem Winkel  $\alpha$  verursacht:

$$|\psi_{\mathbf{e}_{z},\alpha}\rangle = \hat{T}_{\mathbf{e}_{z},\alpha}|\psi\rangle.$$

In Kugelkoordinaten gilt also:

$$\langle \mathbf{x} | \hat{T}_{\mathbf{e}_{z},\alpha} | \psi \rangle = \psi(r,\theta,\varphi-\alpha).$$

Eine Ableitung nach  $\alpha$  kann man also mittels der Kettenregel in eine Ableitung nach  $\varphi$  umformen. Diese Ableitung kann man wiederum durch den Drehimpulsoperator ausdrücken. Man erhält das Anfangswertproblem:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\hat{T}_{\mathbf{e}_{z},\alpha} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{l}_{z}\,\hat{T}_{\mathbf{e}_{z},\alpha}\,,\quad\hat{T}_{\mathbf{e}_{z},\alpha=0} = \mathbf{1}\,.$$

Diese Gleichung kann man leicht lösen. Man erhält sogar allgemein:

$$\hat{T}_{\mathbf{e}_{n},\alpha} = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\alpha\mathbf{\hat{l}}\cdot\mathbf{e}_{n}\right)$$

für eine beliebige Achse  $\mathbf{n}$ , mit Einheitsvektor  $\mathbf{e}_n$ . In dieser Darstellung erkennt man sofort, dass der Operator **unitär** ist. Die Drehimpulsoperatoren sind also die Generatoren der Rotation.

#### **Rotation im Spinraum**

Im Spinraum definiert man analog eine "Rotation":

$$\hat{U}_{\mathbf{e}_n,\alpha} = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\alpha\mathbf{\hat{s}}\cdot\mathbf{e}_n\right)$$

wobe<br/>i $\mathbf{\hat{s}}=\hbar\sigma/2.$  Dies kann man aufgrund von  $\sigma_i^2=\mathbf{1}$ umschreiben zu:

$$\hat{U}_{\mathbf{e}_n,\alpha} = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{e}_n \,\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

# 5.10 Das Wasserstoffatom

Wir betrachten im Folgenden das System zweier Teilchen, die mit einer Kraft  $\propto 1/r^2$  aufeinander wirken. Da hier zwei Teilchen vorliegen müssen wir zunächst den gemeinsamen Hilbertraum definieren.

# 5.10.1 Tensorproduktraum

Nach dem siebten Postulat ist der gemeinsame Hilbertraum der beiden Teilchen durch das Tensorprodukt

$$\mathcal{H}_{12} := \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$$

gegeben. Sind zwei Orthonormalbasen  $\{|\xi_{i,1}\rangle\}$  und  $\{|\eta_{i,2}\rangle\}$  der einzelnen Hilberträume gegeben dann kann ein beliebiger Gesamtzustand ausgedrückt werden durch:

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |\xi_{i,1}\rangle \otimes |\eta_{j,2}\rangle =: \sum_{ij} c_{ij} |\xi_{i,1},\eta_{j,2}\rangle$$

Das Skalarprodukt zwischen zwei Tensorproduktzuständen  $|\psi\rangle := |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$  und  $|\varphi\rangle := |\varphi_1\rangle \otimes |\varphi_2\rangle$  ist gegeben durch:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \varphi_1 | \psi_1 \rangle \langle \varphi_2 | \psi_2 \rangle.$$
(5.44)

Wichtig ist, dass nicht alle Elemente des Tensorproduktraumes durch Tensorprodukte von Elementen aus den Einzelräumen gegeben sind.

#### Ortszustände

Für spinlose Teilchen überzeugt man sich, dass die obigen Definitionen insbesondere für das Skalarprodukt sinnvoll sind:

$$|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle := |\mathbf{x}_1\rangle \otimes |\mathbf{x}_2\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \mathbf{x}_1', \mathbf{x}_2' \rangle = \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1')\delta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_2')$$

Analog zum gewöhnlichen Fall existiert also auch eine Integralzerlegung der 1:

$$\mathbf{1}=\int \mathrm{d}\mathbf{x}_{1}\mathrm{d}\mathbf{x}_{2}\left|\mathbf{x}_{1},\mathbf{x}_{2}\right\rangle \left\langle \mathbf{x}_{1},\mathbf{x}_{2}\right|$$

und die Wellenfunktion ist in der Ortsdarstellung durch  $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) := \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \psi \rangle$  gegeben. Umgekehrt erhält man aus der Wellenfunktion durch Integration (Zerlegung der 1) wieder den ket-Vektor. Analog erhält man aus der Zerlegung der 1 das Skalarprodukt in der Ortsdarstellung. *Falls* der Gesamtzustand durch ein Tensorprodukt  $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ gegeben ist, gilt mit der Definition des Skalarproduktes von oben:

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \langle \mathbf{x}_1 | \psi_1 \rangle \langle \mathbf{x}_2 | \psi_2 \rangle.$$

#### Produktoperatoren

Es existieren natürlich auch Produktoperatoren von  $\mathcal{H}_{12} \to \mathcal{H}_{12}$ . Sind  $\mathbf{A}_1$  und  $\mathbf{A}_2$  lineare Operatoren in den Ursprungsräumen so ist:

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{A}_2: \quad \mathcal{H}_{12} \to \mathcal{H}_{12}$$

durch die Wirkung auf die Basiszustände definiert:

$$\mathbf{A}|\psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} \,\mathbf{A}_1 |\xi_{i,1}\rangle \otimes \mathbf{A}_2 |\eta_{i,2}\rangle \qquad \Rightarrow \qquad \mathbf{A}(|\varphi_1\rangle \otimes |\varphi_2\rangle) = \mathbf{A}_1 |\varphi_1\rangle \otimes \mathbf{A}_2 |\varphi_2\rangle$$

Man kann, um Operatoren aus einem der Ursprungsräume auf den Tensorproduktraum zu erweitern, einfach  $A_1 \otimes \mathbf{1}_2$  verwenden.

#### Hamiltonoperator

Ein System aus zwei Teilchen im Kugelsymmetrischen Potenzial wird durch die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$$

beschrieben. Mit dem Korrespondenzprinzip erhalten wir hieraus der Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} \otimes \mathbf{1}_2 + \mathbf{1}_1 \otimes \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} \cdot V(\hat{\mathbf{x}}_1 \otimes \mathbf{1}_2, \mathbf{1}_1 \otimes \hat{\mathbf{x}}_2)$$

Oft werden die Identitätsoperatoren auch nicht mitgeschrieben.

# 5.10.2 Zentralpotenzial

Im Zentralpotenzial gilt für den Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{r}) \,,$$

wobei  $\hat{r}$  der "Operator des Abstandes" ist. Da dieser Operator unter Rotation invariant ist, deren Achse durch den Ursprung geht kommutieren alle Komponenten des Bahndrehimpulsoperators und somit auch sein Quadrat mit  $\hat{H}$ :

$$[\hat{\mathbf{l}}, \hat{H}] = [\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{H}] = 0$$

Dies explizit zu zeigen ist mit einiger Rechnung verbunden. Tatsächlich wird sich herausstellen, dass  $\hat{\mathbf{l}}^2$ ,  $\hat{l}_z$  und  $\hat{H}$  einen vollständigen Satz kommutierender Operatoren Bilden. Die Elemente der Basis bezeichnen wir mit  $|\epsilon, l, m\rangle$  ( $\psi_{\epsilon,l,m}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \epsilon, l, m \rangle$ ).

# 5.10.3 Das Zweikörperproblem

Wir betrachten ein System aus **unterscheidbaren Teilchen**. Dies zu betonen ist wichtig, da, wie wir später sehen, bei ununterscheidbaren Teilchen andere Bedingungen erfüllt sein müssen. Hier kann man z.B. die Teilchen anhand ihrer Masse unterscheiden. Da der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + V(|\hat{\mathbf{x}}_1 - \hat{\mathbf{x}}_2|)$$

hier zeitunabhängig ist kann man das Problem durch Bestimmung seiner Eigenzustände lösen. Betrachtet man die Schrödingergleichung in Ortsdarstellung und führt Schwerpunktsund Relativkoordinaten, sowie reduzierte und Gesamtmasse ein:

$$\mathbf{R} := \frac{m_1 \mathbf{x}_1 + m_2 \mathbf{x}_2}{M}, \qquad M := m_1 + m_2$$
$$\mathbf{r} := \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \qquad \frac{1}{\mu} := \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

So zerfällt die Schrödingergleichung durch Umschreiben der Laplace Operatoren in:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\,\Delta_{\mathbf{r}} - \frac{\hbar^2}{2M}\,\Delta_{\mathbf{R}} + V(r)\right)\,\psi = \epsilon\psi\,.$$

Mittels des Separationsansatzes

$$\psi = \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \psi_{\mathrm{S}}(\mathbf{R}) \cdot \psi_{\mathrm{rel}}(\mathbf{r})$$

erhält man nach einiger Rechnung und dem Separationsschritt, mit der Separationskonstante  $\epsilon_S$  die zwei Gleichungen:

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}}\psi_{\mathrm{S}}(\mathbf{R}) = \epsilon_{\mathrm{S}}\psi_{\mathrm{S}}(\mathbf{R})$$
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}}\psi_{\mathrm{rel}}(\mathbf{r}) + V(r)\psi_{\mathrm{rel}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathrm{rel}}\psi_{\mathrm{rel}}(\mathbf{r})$$

wobei  $\epsilon = \epsilon_{\rm S} + \epsilon_{\rm rel}$  ist. Die Bewegung des Schwerpunkts entspricht also wie im klassischen Analogon der eines **freien Teilchens**.

#### Lösung der Relativbewegung:

Mithilfe des Laplace Operators in Kugelkoordinaten und der Darstellung von  $\hat{\mathbf{l}}^2$  in Kugelkoordinaten kann man die Schrödingergleichung für die Relativbewegung umschreiben zu:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\mathbf{\hat{l}}^2}{2\mu r^2} + V(r)\right) \psi_{\epsilon,l,m}(\mathbf{r}) = \epsilon \,\psi_{\epsilon,l,m}(\mathbf{r})$$

Man sieht, dass der Hamilton operator also mit  $\hat{l}_i$  vertauscht. In der gemeinsamen Basis  $|\epsilon, l, m\rangle$  vereinfacht sich diese Gleichung mittels der Eigenwertgleichung von  $\hat{l}^2$  also weiter. Schließlich führt der Separations ansatz

$$\psi_{\epsilon,l,m}(\mathbf{r}) = Y_{l,m}(\theta,\varphi) R_{\epsilon,l}(r) \quad \text{mit} \quad u_{\epsilon,l}(r) := r R_{\epsilon,l}(r)$$

auf die Gleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + V^l_{\mathrm{eff}}(r)\right) u_{\epsilon,l}(r) = \epsilon \, u_{\epsilon,l}(r)$$

wobei

$$V_{\text{eff}}^{l}(r) := V(r) + \frac{\hbar^{2}l(l+1)}{2\mu r^{2}}$$

Der zweite Summand wird analog zur klassischen Bewegung **Drehimpulsbarriere** genannt.

Interessant ist das Verhalten von Lösungen dieser Gleichung für Potenziale, die **schwä**cher divergieren als die Drehimpulsbarriere, da Potenziale, wie das Coulomb- und auch das Gravitationspotenzial dies erfüllen. Dann können für kleine r (da l > 0) den Term  $r^2(V(r) - \epsilon)$  vernachlässigen. Hier führt ein Ansatz  $u_{\epsilon,l}(r) \sim r^{\beta}$  zu  $\beta = l + 1^{20}$ . Demnach ist  $R - \epsilon, l \sim r^l$ . Also verschwindet  $|R_{\epsilon,l}(r)|^2$  für große l im Limes  $r \to 0$  schneller! Für l = 0 kann man zeigen, dass für  $r \to 0$  gilt:  $u_{\epsilon,0}(r) \sim r$ . Insgesamt gilt für alle l:

$$r \to 0 \quad \Rightarrow \quad u_{\epsilon,l}(r) \sim r^{l+1}$$

Da wir somit die Bedingung  $u_{\epsilon,l}(r=0) = 0$  festgelegt haben und die Gleichung eine Differenzialgleichung zweiter Ordnung ist bleibt nur eine linear unabhängige Lösung der Gleichung für bestimmte  $\epsilon$  und l. Insgesamt charakterisieren die 3 Quantenzahlen  $\epsilon, l$  und m das System also eindeutig.

 $\Rightarrow \mathbf{\hat{l}}^2, \hat{l}_z$  und  $\hat{H}$  sind ein vollständiger Satz kommutierender Operatoren.

Des Weiteren müssen wir die Gleichung für große r betrachten, um zu überprüfen, ob die Lösungsfunktionen tatsächlich Eigenzustände des  $\hat{H}$  sind (Normierung). Wir nehmen wiederum an, dass das Effektivpotenzial für  $r \to \infty$  verschwindet (Coulomb) und betrachten **gebundene Zustände** ( $\epsilon < 0$ ). D.h. wir erhalten in diesem Grenzwert die Gleichung:

$$\frac{\mathrm{d}^2 u_{\epsilon,l}(r)}{\mathrm{d}r^2} - \alpha^2 u_{\epsilon,l}(r) = 0 \quad \text{mit} \quad \alpha := \frac{\sqrt{2m(-\epsilon)}}{\hbar} > 0$$

Also haben asymptotische Lösungen für große r die Form:

$$r \to \infty \quad \Rightarrow \quad u_{\epsilon,l} \sim e^{-\alpha r},$$

wobei die Lösung mit positivem Exponent aufgrund der Normierungsbedingung wegfällt. Gebundene Zustände erfüllen also zwei Randbedingungen und sind daher diskret. Ungebundene Zustände sind kontinuierlich.

#### Wasserstoffatom

Im Falle des Wasserstoffatoms ist das Potenzial das Coulomb Potenzial  $V(r) = -e^2/r$ und die reduzierte Masse  $\mu$  entspricht ungefähr der Elektronenmasse. Dann kann man mit einer Skalentransformation:

$$\rho := \frac{r}{a_0} \text{ und } \tilde{\epsilon} = \frac{\epsilon}{\epsilon_R} \text{ mit } a_0 := \frac{\hbar^2}{me^2} \text{ und } \epsilon_R := \frac{e^2}{2a_0},$$

wobe<br/>i $a_0$ der Bohr'sche Radius ist und  $\epsilon_R$  die Rydberg-Energie <br/>sind, die Gleichung umformen auf:

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} u_{\epsilon,l}(\rho) + \left(\tilde{\epsilon} + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) u_{\epsilon,l}(\rho) = 0\,.$$

 $<sup>^{20}\</sup>mathrm{Eine}$  weitere Lösung  $\beta=-l$  verwerfen wir als nicht normierbar.

Aufgrund des bereits diskutierten asymptotischen Verhaltens der Lösungen dieser Gleichung wählen wir den Ansatz:

$$u_{\epsilon,l}(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\alpha a_0 \rho} \sum_{\nu=0}^{\infty} c_{\nu}^{\epsilon,l} \rho^{\nu}, \quad \lambda := \alpha a_0 = \sqrt{-\tilde{\epsilon}}$$

Aus diesem Ansatz erhält man für die Koeffizienten eine rekursive Darstellung:

$$c_{\nu+1}^{\epsilon,l} = 2 \, \frac{\lambda(\nu+l+1) - 1}{(\nu+l+2)(\nu+l+1) - l(l+1)} \, c_{\nu}^{\epsilon,l} \, .$$

Für den Fall, dass diese Reihe nirgends abbricht erhalten wir für große  $\nu$ :

$$\nu \to \infty \quad \Rightarrow \quad c_{\nu+1}^{\epsilon,l} \sim \frac{2\lambda}{\nu} c_{\nu}^{\epsilon,l}$$

Dann ist aber die Funktion  $u_{\epsilon,l}(\rho) \sim \exp(2\lambda\rho)$  nicht normierbar. Also muss die Potenzreihe **abbrechen**. Dies ist für ein bestimmtes  $\lambda$  der Fall, wie man leicht ausrechnen kann. Man erhält eine Potenzreihe, die an der k-ten Potenz abbricht für:

$$\epsilon_{k,l} = -\lambda^2 = -\frac{1}{(l+k+1)^2}, \quad k = 0, 1, 2, ...$$

Man bezeichnet dies dann auch als  $\epsilon_n$ , mit:

$$\epsilon_n = -\frac{\epsilon_R}{n^2} = -\frac{e^2}{2a_0}\frac{1}{n^2}, \text{ mit } n \in \mathbb{N}, \ l \le n-1.$$

Die Unabhängigkeit der  $\epsilon_n$  von l gilt nur für das Coulomb<br/>potenzial. Hier existieren also für jedes n insgesamt

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

Zustände gleicher Energie in unterschiedlichen Zuständen l. Dies ist also der Entartungsgrad der Energie  $\epsilon_n$ . Tatsächlich existiert auch ein geschlossener Ausdruck, der sich der zugeordneten Laguerre Polynome bedient:

$$L_p^q := \frac{\mathrm{d}^q}{\mathrm{d}\rho^q} \left( e^{\rho} \frac{\mathrm{d}^p}{\mathrm{d}\rho^p} (\rho^p e^{-\rho}) \right) \quad \Rightarrow \quad R_{n,l} \propto -e^{-\frac{r}{na_0}} \left( \frac{2r}{na_0} \right)^l L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2r}{na_0} \right)$$

Hinzu kommt noch ein sperriger Normierungsfaktor. Insgesamt haben wir also die normierten, gebundenen Eigenzustände

$$\psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) := \langle \mathbf{r} | n, l, m \rangle = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

des Hamiltonoperators gefunden.

# 5.11 Kombination von Spin und Bahnfreiheitsgraden

#### 5.11.1 Freiheitsgrad

Als einen Freiheitsgrad bezeichnet man in der klassischen Mechanik eine der f verallgemeinerten Koordinaten des Lagrange- oder Hamiltonformalismus, in der das System Dynamik

aufweisen kann. In der Quantenmechanik kommen neben diesen "Bewegungsfreiheitsgraden" weitere Freiheitsgrade hinzu. Als Freiheitsgrad versteht man jetzt allgemeiner eine Eigenschaft des Systems, wie z.B. der Spin. Etwas unbefriedigend ist, dass man nun alle möglichen Spektren von Observablen (genauer ihrer Operatoren) als Freiheitsgrade betrachten kann, es hängt vom jeweiligen System und sogar von dem ab, was am System von Interesse ist. Als Bahnfreiheitsgrade versteht man die üblichen Freiheitsgrade der Bewegung.

## 5.11.2 Kombination verschiedener Hilberträume

Wir betrachten die Kombinationen der Hilberträume

$$\mathcal{H}_{Bahn}$$
 und  $\mathcal{H}_{Spin}$ .

D.h. wir betrachten das Tensorprodukt:

$$\mathcal{H}=\mathcal{H}_{ ext{Bahn}}\otimes\mathcal{H}_{ ext{Spin}}\simeq L^2(\mathbb{R}^d)\otimes\mathbb{C}^2$$

Als Beispiel für  $\mathcal{H}_{Bahn}$  wählen wir einen Hamiltonoperator mit den Eigenfunktionen  $|\epsilon, \mu\rangle$ und für  $\mathcal{H}_{Spin}$  betrachten wir analog  $|s, m_s = \pm 1/2\rangle$ . Das heißt wir erhalten:

$$|\epsilon, \mu, s, m_s = \pm 1/2\rangle = |\epsilon, \mu\rangle \otimes |s, m_s = \pm 1/2\rangle$$

Nun können wir Zustände nach diesen Basisvektoren entwickeln:

$$|\psi\rangle = \sum_{\epsilon,\mu,m_s} \beta_{\epsilon,\nu,m_s} |\epsilon,\mu,s,m_s\rangle$$

Über s wird hierbei nicht summiert, da s beim Spin fix ist. Das Skalarprodukt zwischen zwei Zuständen mit den Entwicklungskoeffizienten  $\alpha$  und  $\beta$  lautet gemäß Gl. 5.44 mit der Orthonormierung der Einzelbasen also:

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \sum_{\epsilon,\mu,m_s} \beta^*_{\epsilon,\mu,m_s} \, \alpha_{\epsilon,\mu,m_s} \, .$$

Operatoren erhalten wir dann analog zu Kapitel 5.10.1, durch Verknüpfung mit dem entsprechenden 1-Operator aus dem anderen Raum. Insbesondere erhalten wir:

$$|\mathbf{x}, s, m_s\rangle := |\mathbf{x}\rangle \otimes |s, m_s\rangle.$$

#### **Beispiel**:

Wir betrachten ein System ohne Spin-Bahn-Kopplung (Ex. IV) und ohne Magnetfeld. Der Hamiltonoperator ist dann  $\hat{H} = \hat{H}_{Bahn} \otimes \mathbf{1}_{Spin} = \hat{p}^2/2m + V(\mathbf{x})$ . Da der Hilbertraum des Spins zweidimensional ist, können wir die Zustände darstellen als:

$$|\psi\rangle \doteq \begin{pmatrix} \psi_{+}(\mathbf{x}) \\ \psi_{-}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \mathbf{r}, s, m_{s} = +1/2 |\psi\rangle \\ \langle \mathbf{r}, s, m_{s} = -1/2 |\psi\rangle \end{pmatrix}$$

Dies nennt man auch die **Spin-Ortsdarstellung**, den ket auch **Spinor**. Die Schrödingergleichung wirkt dann auf beide Anteile dies Spinors, da der  $\mathbf{1}_{\text{Spin}}$  in dieser Basis einfach die 2 × 2-Einheitsmatrix ist. Daraus folgt automatisch eine (mindestens) zweifache Energieentartung jedes Zustands des Systems.

# 5.11.3 Pauli Gleichung

Wir betrachten analog ein System **mit inhomogenem** Magnetfeld und einem elektrischen Feld. Wir wissen bereits aus der Diskussion des Stern-Gerlach Versuches, dass dies zu einem zusätzlichen Term im Hamiltonoperator führt:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}, t) \right)^2 - e\phi(\hat{\mathbf{x}}, t) - \frac{2\mu_0}{\hbar} \mathbf{B}(\hat{\mathbf{x}}, t) \cdot \hat{\mathbf{s}}$$

Der erste Term rührt vom "gewöhnlichen" Hamiltonoperator für elektromagnetische Felder her, der später diskutiert wird. Betrachten wir den Zustand  $|\psi\rangle$  dann in der Spinbasis  $|\mathbf{z}, \pm\rangle$  und setzten die Matrixdarstellung für die Spinmatrizen ein so erhalten wir:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_{+}(\mathbf{x})\\\psi_{-}(\mathbf{x})\end{pmatrix} = \left(\frac{1}{2m}\left[\frac{\hbar}{i}\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{x},t)\right]^{2} - e\phi(\mathbf{x},t)\right)\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_{+}(\mathbf{x})\\\psi_{-}(\mathbf{x})\end{pmatrix} + \\ -\mu_{0}\begin{pmatrix}B_{3}&B_{1}-iB_{2}\\B_{1}+iB_{2}&-B_{3}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_{+}(\mathbf{x})\\\psi_{-}(\mathbf{x})\end{pmatrix}$$

Diese Gleichung nennt man auch die Pauli Gleichung.

# 5.12 Addition von Drehimpulsen

Gegeben seien zwei **kommutierende** Drehimpulsoperatoren  $\mathbf{\hat{j}}_1$  und  $\mathbf{\hat{j}}_2$ , die zu verschiedenen Freiheitsgraden gehören. Man rechnet leicht nach, dass für die Summe dieser Operatoren

$$\mathbf{\hat{J}} = \mathbf{\hat{j}}_1 + \mathbf{\hat{j}}_2 \qquad \text{gilt} \qquad [\hat{J}_k, \ \hat{J}_l] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{kln} \ \hat{J}_n \,, \qquad (5.45)$$

er also auch ein Drehimpulsoperator ist. Wir betrachten nun den gemeinsamen Hilbertraum der einzelnen Drehimpulsoperatoren in der Tensorproduktbasis

$$|j_1, m_{j1}, j_2, m_{j2}\rangle = |j_1, m_{j1}\rangle \otimes |j_2, m_{j2}\rangle.$$
 (5.46)

Wir definieren die Kandidaten für Eigenvektoren zu  $\hat{\mathbf{J}}^2$  und  $\hat{J}_z$  als

$$|j_1, j_2, J, m_J\rangle$$
.

Man kann zeigen, dass J die Werte:

$$J = j_2 + j_1, j_1 + j_2 - 1, ..., |j_1 - j_2|$$
(5.47)

annehmen kann. Wichtig ist auch, dass man  $\hat{\mathbf{J}}^2$  auch ausdrücken kann durch:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{j}}_1^2 + \hat{\mathbf{j}}_2^2 + 2\hat{j}_{1,z}\hat{j}_{2,z} + \hat{j}_{1,+}\hat{j}_{2,-} + \hat{j}_{2,+}\hat{j}_{1,-}.$$
(5.48)

## 5.12.1 Addition zweier Spin-1/2 Teilchen

Wir betrachten zwei Teilchen mit Spin 1/2 ohne Bahnfreiheitsgrade. Der zugehörige Tensorproduktraum ist also  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ . Die Tensorproduktzustände bezeichnen wir mit wie in Gl. 5.46 (nur mit *s* statt *j*). Für die Produktzustände gilt dann:

$$\hat{\mathbf{s}}_{i}^{2} |s_{1}, m_{1}, s_{2}, m_{2}\rangle = \hbar^{2} \underbrace{s_{i}(s_{i}+1)}_{=3/4} |s_{1}, m_{1}, s_{2}, m_{2}\rangle$$
$$\hat{s}_{i,z} |s_{1}, m_{1}, s_{2}, m_{2}\rangle = \hbar m_{s_{i}} |s_{1}, m_{1}, s_{2}, m_{2}\rangle.$$

Da  $s_i = 1/2$  und  $m_{s_i} = \pm 1/2$  erhalten wir 4 verschiedene Eigenzustände, die wir einfach mit  $|++\rangle$ ,  $|+-\rangle$ , usw. bezeichnen. In diesem Kapitel geht es um die Summe von Drehimpulsen also ist es naheliegend, dass wir nun den **totalen Spinoperator**:

$$\mathbf{\hat{S}} := \mathbf{\hat{s}}_1 + \mathbf{\hat{s}}_2$$

betrachten. Da  $\hat{\mathbf{s}}_1$  und  $\hat{\mathbf{s}}_2$  natürlich vertauschen (sie wirken ja nicht einmal auf denselben Teil des Zustands) gilt für diesen auch die Bedingung (5.45). Aus demselben Grund **kommutiert**  $\hat{\mathbf{S}}$  auch mit  $\hat{\mathbf{s}}_i$  i = 1, 2. Aus der ersten Gleichung von oben folgt sofort:

$$\hat{S}_{z} \ket{\pm, \pm} = \pm \hbar \ket{\pm, \pm}$$
 und  $\hat{S}_{z} \ket{\mp, \pm} = 0$ 

Die Tensorproduktzustände sind also bereits Eigenzustände von  $\hat{S}_z$ . Betrachtet man nun

$$\mathbf{\hat{S}}^2 = \mathbf{\hat{s}}_1^2 + \mathbf{\hat{s}}_2^2 + 2\mathbf{\hat{s}}_1 \cdot \mathbf{\hat{s}}_2$$

so erkennt man, dass im gemischten Term Operatoren (z.B.  $\hat{s}_{1,x}$ ) in einer Kombination auftauchen, die **nicht** mit  $\hat{s}_{i,z}$  vertauschen. Tatsächlich sind  $|\mp, \pm\rangle$  auch keine Eigenzustände von  $\hat{\mathbf{S}}^2$ . Man erhält aber:

$$\hat{\mathbf{S}}^2 | \pm \pm \rangle = 2\hbar^2 | \pm \pm \rangle := S(S+1)\hbar^2 | \pm \pm \rangle$$

Mit S = 1. Zusätzlich kann man mittels (5.48) und (5.42) zeigen, dass:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\pm\mp\rangle\pm|\mp\pm\rangle\right)$$

Eigenzustände des  $\hat{\mathbf{S}}^2$  zu den Eigenwerten S = 1 bzw. S = 0 sind. Zusammen mit  $|\pm \pm\rangle$  bilden sie also eine gemeinsame Orthonormalbasis von  $\hat{\mathbf{S}}^2$  und  $\hat{S}_z$ , die wir mit:

$$|s_1, s_2, S, m_S\rangle$$

bezeichnen. Zustände mit Eigenwert S = 1 werden **Triplettzustände** genannt und sind offenbar symmetrisch bezüglich der Permutation der Teilchen. Der Zustand S = 0 wird **Singuelltzustand** genannt und ist antisymmetrisch.

#### Direkte Summe

Mathematisch kann man den gerade beobachteten Effekt, dass das Tensorprodukt zweier Spin-1/2 Räume darstellbar ist aus einer Kombination eines Spin-1 und eines Spin-0 Raumes beschreiben durch:

$$\mathcal{H}=\mathcal{H}_{s_1=1/2}\otimes\mathcal{H}_{s_1=1/2}=\mathcal{H}_{S=1}\oplus\mathcal{H}_{S=0}\,.$$

Das Symbol  $\oplus$  bezeichnet die sog. direkte Summe. Ein Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ist genau dann direkte Summe zweier Unterräume V und W, wenn es für alle Elemente  $|\psi\rangle$  des H eindeutige Elemente  $|\phi\rangle \in U$  und  $|\varphi\rangle \in W$  gibt, sodass

$$\left|\psi\right\rangle = \left|\phi\right\rangle + \left|\varphi\right\rangle.$$

# 5.12.2 Gesamtdrehimpuls eines Elektrons

Wir betrachten ein Teilchen mit Spin und Bahndrehimpuls. Uns interessiert der Gesamtdrehimpuls

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$$

Wir bezeichnen wie gewohnt die 2(2l+1) Tensorproduktzustände als:

$$|l, m, s, m_s\rangle = |l, m\rangle \otimes |s, m_s\rangle.$$
(5.49)

Wie oben sind dies Eigenzustände des  $\hat{j}_z$  aber keine Eigenzustände des  $\hat{j}^2$ . Die Frage ist nun, ob es eine gemeinsame Basis von  $\hat{j}^2$  und  $\hat{j}_z$  im Tensorproduktraum gibt. Kandidaten für gemeinsame Eigenvektoren von  $\hat{j}^2$  und  $\hat{j}_z$  wollen wir mit

$$|l, s, j, m_i\rangle$$

bezeichnen. Schon an Gl. 5.49 erkennt man, dass gilt:

$$\hat{j}_{z}|l, l, s, m_{s} = 1/2 \rangle = \hbar \left( l + 1/2 \right) |l, l, s, m_{s} = 1/2 \rangle$$

In Übersetzung der Quantenzahlen kann man diesen Kandidaten auch als  $|l, s, j = l + 1/2, m_j = l + 1/2 \rangle$  schreiben. Um nun auf die anderen Kandidaten zu schließen, definieren wir:

$$\hat{j}_{-} = \hat{l}_{-} + \hat{s}_{-} = \hat{l}_{x} - i\hat{l}_{y} + \hat{s}_{x} - i\hat{s}_{y} \quad \Rightarrow \quad \hat{j}_{-}^{\dagger}\hat{j}_{-} = \hat{j}^{2} - \hat{j}_{z}^{2} + \hbar\hat{j}_{z}$$

Wendet man diesen Operator mittels (5.42) wiederholt auf die Tensorproduktzustände an, so kann man iterativ die Tensorproduktzustände mit den Kandidaten für die Eigenzustände identifizieren:

$$\begin{aligned} |l, s, j &= l + 1/2, m_j \rangle = \sqrt{\frac{l + m_j + 1/2}{2l + 1}} |l, m_j - 1/2, s, m_s = +1/2 \rangle + \\ &+ \sqrt{\frac{l - m_j + 1/2}{2l + 1}} |l, m_j + 1/2, s, m_s = -1/2 \rangle \end{aligned}$$

Dies sind nun aber lediglich 2j + 1 = 2l + 2 Zustände, wobei der Tesorproduktraum doch 2(2l + 1) Dimensionen hat. Tatsächlich "fehlen" noch die Zustände mit j = l - 1/2. Unter der Prämisse, dass diese Zustände für jedes feste  $m_j$  orthonormal zu den bereits gefundenen Eigenzuständen zu j = l + 1/2 sein müssen, erhält man:

$$|l, s, j = l - 1/2, m_j\rangle = \sqrt{\frac{l - m_j + 1/2}{2l + 1}} |l, m_j - 1/2, s, m_s = +1/2\rangle + \sqrt{\frac{l + m_j + 1/2}{2l + 1}} |l, m_j + 1/2, s, m_s = -1/2\rangle$$

Nun haben wir also ein 2(2l + 1)-dimensionales orthonormales Erzeugendensystem, also eine Basis des  $\mathcal{H}$  gefunden. Es bleibt zu zeigen, dass sie tatsächlich die entsprechenden Eigenzustände sind. Aus der Zerlegung

$$\hat{\mathbf{j}}^2 = \hat{\mathbf{l}}^2 + \hat{\mathbf{s}}^2 + 2\hat{l}_z\hat{s}_z + \hat{l}_-\hat{s}_-^\dagger + \hat{l}_-^\dagger\hat{s}_-$$

folgt, tatsächlich, dass es sich um Eigenzustände von  $\hat{\mathbf{j}}^2$  mit den Eigenwerten:

$$\hbar^2 \left( l^2 - \frac{1}{4} \right)$$
 zu  $j = l + \frac{1}{2}$  und  $\hbar^2 \left( l + \frac{1}{2} \right) \left( l + \frac{3}{2} \right)$  zu  $j = l - \frac{1}{2}$ 

handelt. Natürlich folgt das auch aus der Vertauschbarkeit von  $\hat{\mathbf{j}}^2$  und  $\hat{j}_{\pm}$ , sowie der Tatsache, dass der Anfangszustand der Entwicklungskette bereits ein Eigenzustand von  $\hat{\mathbf{j}}^2$  war, auch die weiteren Zustände Eigenzustände sind, man kann dies aber auch konkret nachrechnen. Der Operator  $\hat{\mathbf{j}}$  ist der Generator der Rotation im Tensorproduktraum aus Bahn und Spin.

## 5.12.3 Allgemeine Theorie

Wir machen nun dort weiter, wo wir oben aufgehört haben. Insgesamt besteht der Tensorproduktraum  $\mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2}$  aus  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 2)$  Basiselementen. Betrachten wir analog den höchsten Zustand als höchsten Eigenvektor-Kandidat, so erhalten wir:

$$|j_1, j_2, J = j_1 + j_2, m_J = j_1 + j_2 \rangle = |j_1, j_2, j_1, j_2 \rangle$$

Durch wiederholte Anwendung des Operators:

$$J_{-} = j_{1-} + j_{2-}$$

mittels (5.42) können wir iterativ auf die weiteren Eigenvektoren schließen. Hier als Beispiel die erste Iteration:

$$\sqrt{2(j_1+j_2)}|j_1,j_2,J=j_1+j_2,m_J=j_1+j_2-1 \$$
  
=  $\sqrt{2j_1}|j_1,j_1-1,j_2,j_2\rangle + \sqrt{2j_2}|j_1,j_1,j_2,j_2-1\rangle$ 

Analog zu den Beispielen erhält man immer zu den vorherigen orthogonale Vektoren. Für dieses  $m_J$  gibt es aber noch einen weiteren Eigenwert zu  $\hat{\mathbf{J}}^2$ , nämlich  $j_1 + j_2 - 1$ . Da  $m_J = m_{j_1} + m_{j_2}$  gilt muss er sich aus den selben Vektoren zusammensetzten, aber orthogonal zu  $J = j_1 + j_2$  sein. Analog verfährt man dann für  $J = j_1 + j_2 - 2$ . Dies kann man allerdings nicht immer so weiterführen, da es zu Abbrüchen durch die Anwendung von  $j_{i,-}$  kommt. Damit kann man auch die Bedingung (5.47) zeigen. Dieses Verfahren wird weiter durchgeführt, bis man bei  $|j_1 - j_2|$  angelangt ist. Man kann somit auch allgemein eine Darstellung der Eigenvektorbasis in der Tensorproduktbasis angeben:

$$|j_1, j_2, J, m_J\rangle = \sum_{m_{j_1} = -j_1}^{j_1} \sum_{m_{j_1} = -j_2}^{j_2} \langle j_1, m_{j_1}, j_2, m_{j_2} | j_1, j_2, J, m_J\rangle | j_1, m_{j_1}, j_2, m_{j_2}\rangle$$

Die Entwicklungskoeffizienten nennt man auch die **Clebsch-Gordan-Koeffizienten** und sie werden wie oben beschrieben bestimmt.

# 5.13 Dynamik von Quantensystemen

## 5.13.1 Zeitentwicklungsoperator

Bei der Diskussion der Zeitentwicklung der Schrödingergleichung anhand der stationären Zustände haben wir bereits den Zeitentwicklungsoperator (5.36) betrachtet. Nun wollen wir noch weitere Eigenschaften dieses Operators untersuchen. Insbesondere bieten sich Möglichkeiten die physikalischen Probleme umzulagern und speziell für Operatoren zu lösen.

## 5.13.2 Schrödingerbild

Ist der Hamiltonoperator zeitunabhängig so ist der Zeitentwicklungsoperator durch (5.36) gegeben und man kann wie bereits diskutiert die Schrödingergleichung anhand der Eigenzustände des  $\hat{H}$  lösen. Für zeitabhängige Hamiltonoperatoren ist es leider nicht so leicht einen Zeitentwicklungsoperator zu finden.

• Wenn für den Hamiltonoperator gilt:

$$[\hat{H}(t), \, \hat{H}(t')] \;\; \forall \; t, t' \in \mathbb{R}$$

kann man den Zeitentwicklungsoperator darstellen als:

$$\hat{U}(t,t_0) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^t \hat{H}(t')\,\mathrm{d}t'\right)\,.$$

• Allgemein kann man auch einen beliebigen Zustand  $|\psi\rangle(t) = \hat{U}(t,t_0)|\psi_0\rangle$  in die Schrödingergleichung einsetzten. Da diese dann für alle Anfangszustände  $|\psi_0\rangle$  erfüllt sein muss, kann man diesen auch aus der Gleichung "kürzen". Damit erhält man ein Anfangswertproblem für  $\hat{U}(t,t_0)$ :

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}\hat{U}(t,t_0), \qquad \hat{U}(t_0,t_0) = \mathbf{1}$$

Diese Gleichung kann man formell integrieren, erhält dabei aber leider keinen geschlossenen Ausdruck für  $\hat{U}$ :

$$\hat{U}(t,t_0) = \mathbf{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') \,\hat{U}(t,t_0) \,\mathrm{d}t' \,.$$
(5.50)

Die Darstellung

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

bezeichnet man auch als das Schrödingerbild. In diesem

- entwickeln sich die Zustände wie oben und
- die Operatoren entwickeln sich bis auf explizite Zeitabhängigkeit nicht:

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial A}{\partial t}$$

#### Unitarität des Zeitentwicklungsoperators

In der Allgemeinsten Darstellung ohne Anforderungen an den Hamiltonoperator lautete der Zeitentwicklungsoperator:

$$\hat{U}(t,t_0) = \mathbf{1} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t')\hat{U}(t',t_0) \,\mathrm{d}t'$$

Das bedeutet für die Zeitableitung:

$$\partial_t \hat{U} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0) \quad \Rightarrow \quad \partial_t \hat{U}^{\dagger} = -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \hat{U}^{\dagger}(t, t_0) \hat{H}^{\dagger}(t)$$

Daraus folgt:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\hat{U}^{\dagger}\hat{U}) = \left(-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{U}^{\dagger}\hat{H}\right)\hat{U} + \hat{U}^{\dagger}\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{H}\hat{U}\right) = 0$$

wegen der Selbstadjungiertheit von  $\hat{H}$ . Also ist das Produkt  $\hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \text{const.}$  und kann somit auch zu  $\hat{U}^{\dagger}\hat{U} = \mathbf{1}$  normiert werden. Mit der Unitarität des Zeitentwicklungsoperators kann man besonders leicht die Erhaltung der Normierung eines Zustandes zeigen:

$$1 = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | \hat{U}^{\dagger} \hat{U} | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$$

Die Normierung eines Zustandes, der sich gemäß der Schrödingergleichung entwickelt, bleibt also erhalten.

## 5.13.3 Heisenbergbild

Wir betrachten eine Observable  $\mathcal{A}(t)$  zum Operator  $\hat{A}(t)$ . Die Zeitentwicklung des Erwartungswertes dieses Operators kann man mit dem Zeitentwicklungsoperator umschreiben zu:

$$\langle A \rangle_{|\psi(t)\rangle} = \langle \psi(t_0) | \hat{U}^{\dagger} \hat{A} \hat{U} | \psi(t_0) \rangle := \langle A_{\rm H} \rangle_{|\psi_0\rangle}$$

mit dem Heisenbergbild des Operators:

$$\hat{A}_{\rm H} := U^{\dagger}(t, t_0) \hat{A}(t) U(t, t_0) \,.$$

Tatsächlich kann man mittels der Produktregel auch eine **Bewegungsgleichung** von Operatoren im Heisenbergbild berechnen:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_{\rm H} = [\hat{A}_{\rm H}, \, \hat{H}_{\rm H}] + i\hbar \left(\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\right)_{\rm H} \,.$$
(5.51)

Wichtig ist der Zusammenhang, nach dem das Heisenbergbild konstruiert ist:

$$\langle \hat{A} \rangle_{|\psi(t)\rangle} = \langle \hat{A}_{\mathrm{H}} \rangle_{|\psi(t_0)\rangle}.$$
 (5.52)

Im Heisenbergbild lautet die Darstellung eines Zustandes also:

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle$$

d.h. alle Zustände sind durch ihren ket zum Zeitpunkt  $t = t_0$  gegeben. Im Heisenbergbild

- entwickeln sich die Zustände nicht und
- die Operatoren entwickeln sich gemäß (5.51).

## 5.13.4 Erhaltungsgrößen und Invarianzen

#### Erhaltungsgrößen

Hat ein Operator  $\hat{A}$  zu einer Observablen  $\mathcal{A}$  keine explizite Zeitabhängigkeit, so folgt Gl. 5.51 durch bilden der Erwartungswerte ((5.52) rechts angewandt):

$$i\hbar \left\langle \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \hat{A}_{\mathrm{H}} \right\rangle_{|\psi(t_0)\rangle} = \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle_{|\psi(t)\rangle}$$

Da man hier auf der linken Seite den Erwartungswert zunächst bezüglich  $|\psi(t_0)\rangle$  bildet, ist die Ableitung unabhängig von der Bildung des Mittelwertes und kann mit diesem vertauscht werden. Wendet man dann wieder 5.52 an folgt:

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle A \rangle_{|\psi(t)\rangle} = \langle [\hat{A}, \, \hat{H}] \rangle_{|\psi(t)\rangle}$$
(5.53)

Der Erwartungswert von Größen, deren Operatoren explizit zeitunabhängig sind und mit dem Hamiltonoperator für alle Zeiten kommutieren, ist also erhalten. Daher identifiziert man diese als Erhaltungsgrößen.

#### Invarianzen

Allgemein erhält man immer aus einem selbstadjungierten Operator  $\hat{A}$  einen unitären Operator zu einem Parameter  $\lambda$  durch:

$$\hat{U}_{\lambda} = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{A}\lambda\right) \tag{5.54}$$

Man nennt  $\hat{A}$  dann auch den **Generator** des  $\hat{U}_{\lambda}$ . Gemäß Gleichung 5.16 kommutiert der Hamiltonoperator also mit Transformationen wie  $\hat{U}_{\lambda}$ , wenn er mit dem Generator kommutiert.

$$[\hat{H}, \hat{A}] = 0 \quad \Rightarrow \quad [\hat{H}, \hat{U}_{\lambda}] = 0$$

Damit sind die Eigenfunktionen von  $\hat{H}$  auch Eigenfunktionen von  $\hat{U}_{\lambda}$ . Für die Skalarprodukte gilt außerdem:

$$|\langle \psi' | \varphi' \rangle| = |\langle \psi | \hat{U}_{\lambda}^{\dagger} \hat{U}_{\lambda} | \varphi \rangle| = |\langle \psi | \varphi \rangle|,$$

die Wahrscheinlichkeiten sind also unter der unitären Transformation erhalten. Allgemein sind in der Quantenmechanik alle kontinuierlichen Symmetrietransformationen durch (Anti-) Unitäre Operatoren gegeben. Wenn dieser, wie oben, mit dem Hamiltonoperator kommutiert, so ist dieser, bis auf ein Vorzeichen, invariant unter der Transformation:

$$[\hat{H}, \hat{U}_{\lambda}] = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{H} = \pm \hat{U}_{\lambda}^{\dagger} \hat{H} \hat{U}_{\lambda}$$

Dementsprechend folgt für die Zustände mit der Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi'\rangle = \hat{H} |\psi'\rangle \quad \Leftrightarrow \quad i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_{\lambda} |\psi\rangle = \hat{H} \hat{U}_{\lambda} |\psi\rangle \quad \Leftrightarrow \quad i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

Ist also  $|\psi\rangle$  eine Lösung der Schrödingergleichung, so auch  $|\psi'\rangle$ . Zu jeder Erhaltungsgröße folgt also eine entsprechende kontinuierliche Symmetrietransformation.

Tatsächlich hängt dieses Symmetrieverhalten mit der Gruppenstruktur der Transformationen zusammen. Transformationen, die sich durch Generatoren wie in (5.54) ausdrücken lassen, sind sog. Lie-Gruppen. In der Feldtheorie ist deren Bedeutung noch entscheidender.

# 5.13.5 Ehrenfest Theorem

Betrachten wir den Hamiltonoperator eines Teilchens im Potenzial V:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{\hat{x}}) \,.$$

Man zeigt leicht die Kommutatorrelationen:

$$[\hat{\mathbf{x}}, \hat{H}] = i\hbar \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m}$$
 und  $[\hat{p}_j, V(\hat{\mathbf{x}})] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x_j}(\mathbf{x})$ .

Damit folgen aus der Betrachtung der Bewegungsgleichungen für den Orts- und Impulsoperator im Heisenbergbild die Beziehungen:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathbf{\hat{x}}_{\mathrm{H}}(t) = \frac{1}{m}\,\mathbf{\hat{p}}_{\mathrm{H}}(t)\,,\qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathbf{\hat{p}}_{\mathrm{H}}(t) = -\nabla V\left(\mathbf{\hat{r}}_{\mathrm{H}}(t)\right)\,.$$

Bildet man hier die Erwartungswerte zu  $|\psi(t_0)\rangle$  so kann man diese durch die Zeitableitung ziehen. Ersetzt man dann gemäß Gl. 5.52 den Erwartungswert so folgen sofort die Ehrenfestgleichungen:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \mathbf{\hat{x}} \rangle_{|\psi(t)\rangle} = \frac{1}{m} \langle \mathbf{\hat{p}} \rangle_{|\psi(t)\rangle}, \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle \mathbf{\hat{p}} \rangle_{|\psi(t)\rangle} = -\langle \nabla V(\mathbf{\hat{x}}) \rangle_{|\psi(t)\rangle}.$$

Im Falle eines linearen und quadratischen Potenzials gilt:  $\langle \nabla V(\hat{\mathbf{x}}) \rangle = \nabla V(\langle \hat{\mathbf{x}} \rangle)$ . Die Erwartungswerte der Observablen in der Quantenmechanik verhalten sich also wie die klassischen Größen.

# 5.13.6 Dirac- / Wechselwirkungsbild

Wir betrachten einen Hamiltonoperator der Form:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \,,$$

wobei die Zeitentwicklung von  $\hat{H}_0$  exakt lösbar ist, hier im speziellen sogar Zeitunabhängig. Der Zeitentwicklungsoperator von  $\hat{H}_0$  lautet also:

$$\hat{U}_0(t,t_0) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)\right)$$

 $\hat{V}$  ist üblicherweise eine "kleine Störung" dazu später mehr. Wir bezeichnen als das **Diracbild** eines Zustandes und eines Operators die Größen:

$$|\psi_D(t)\rangle = \hat{U}_0^{\dagger}(t, t_0) |\psi(t)\rangle, \qquad \hat{A}_D(t) = \hat{U}_0^{\dagger} \hat{A} \hat{U}_0.$$

Hierbei ist zu beachten, dass  $|\psi_D(t)\rangle$  von  $t_0$ , sondern von t aus entwickelt wird. Außerdem gilt mit dieser Definition:

$$|\psi_D(t_0)\rangle = |\psi(t_0)\rangle$$

Berechnet man die Zeitableitung von  $|\psi_D(t)\rangle$ , erhält man unter Verwendung der Produktregel und der Schrödingergleichung für  $|\psi(t)\rangle$ , die sog. effektive Schrödingergleichung für  $|\psi_D(t)\rangle$ :

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |\psi_D(t)\rangle = \hat{V}_D |\psi_D(t)\rangle$$

Mittels der Definition eines neuen Zeitentwicklungsoperators:

$$|\psi_D(t)\rangle = \hat{U}_D(t, t_0) |\psi_D(t_0)\rangle, \qquad \hat{U}_D(t_0, t_0) = \mathbf{1}$$

erhält man (da die effektive Schrödingergleichung für alle  $|\psi_D(t)\rangle$  erfüllt sein muss) die Gleichung:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}_D = \hat{V}_D\hat{U}_D\,.$$

Dies kann man dann analog wie im Schrödingerbild in eine Integralgleichung umschreiben:

$$\hat{U}_D(t,t_0) = \mathbf{1} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}_D(t_1)\hat{U}_D(t_1,t_0) \,\mathrm{d}t_1$$

Ähnlich einer Taylorreihe kann man dies in eine sog. **Dysonreihe** entwickeln:

$$\hat{U}_D(t,t_0) = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \hat{U}_D^{(n)}(t,t_0) ,$$
  
$$\hat{U}_D^{(n)}(t,t_0) = \left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t \mathrm{d}t_n \int_{t_0}^{t_n} \mathrm{d}t_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} \mathrm{d}t_1 \hat{V}_D(t_n) \dots \hat{V}_D(t_1)$$

# 5.14 Näherungsmethoden

Die meisten (interessanten) quantenmechanischen Systeme kann man explizit nicht mehr berechnen. Natürlich sind hier auch numerische Berechnungen von Bedeutung. Es ist aber auch wichtig über analytische Methoden zu verfügen um erste Abschätzungen zu erhalten.

# 5.14.1 Variationsprinzip

Das Variationsprinzip ist eine Näherungsmethode um die Grundzustandsenergie eines Systems zu bestimmen. Dafür führen wir das sog. **Energiefunktional** 

$$F(|\psi\rangle) := \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

ein. Zudem bezeichnen wir den Unterraum des  $\mathcal{H}$  (Hilbertraum des Systems) der Grundzustände als  $V_0 := \{ |\psi_0\rangle$  Grundzustände $\}$ . Für eine diskrete Grundzustandsenergie  $\epsilon_0$ , besagt das **Rayleight-Riesz-Variationsprinzip**, dass

$$F(|\psi\rangle) \ge \epsilon_0 \quad \forall \ \psi, \quad F(|\psi\rangle) = \epsilon_0 \quad \Leftrightarrow \quad |\psi\rangle \in V_0 \neq 0.$$

Man kann dies beweisen, indem man die Spektraldarstellung von  $\hat{H}$  gemäß (5.30) betrachtet. Durch kreative Addition einer 0 ( $+\epsilon_0 \mathbf{1} - \epsilon_0 \mathbf{1}$ ) erhält man relativ schnell die Aussage.

In konkreten Berechnungen betrachtet man eine Untermenge von Zuständen  $|\psi_{\alpha}\rangle$  $(\alpha = (\alpha_1, ..., \alpha_n))$ . Die Minimierung von  $f(\alpha) = F(|\psi\rangle_{\alpha})$  führt man dann in der Untermenge  $|\psi_{\alpha}\rangle$  aus. f ist hierbei eine reelle Funktion. Das Ergebnis ist immer eine **obere Schranke** für  $\epsilon_0$ . Je besser diese Untermenge (auch **Versuchszustände**) gewählt sind, umso schärfer wird die Abschätzung.

# 5.14.2 Zeitunabhängige Störungstheorie

## Störungstheorie eines nicht-entarteten Zustandes

Wie betrachten (wieder) einen Hamiltonoperator

$$\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{W}$$

unter den Voraussetzungen:

- Die Energien und Eigenzustände  $\epsilon_n^{(0)}$  und  $|\varphi_{n,\mu}^{(0)}\rangle$  sind bekannt.
- $\lambda$  ist ein kleiner Parameter.

Hierbei wird  $\hat{W}$  auch **Störoperator** oder einfach Störung genannt.  $\mu$  ist hier ein (möglicher) Entartungsindex. Sei  $|\varphi_n^{(0)}\rangle$  ein **nicht entarteter Zustand** von  $\hat{H}_0$ . Wir schreiben:

$$\hat{H}(\lambda)|\varphi_n(\lambda)\rangle = \epsilon_n(\lambda)|\varphi_n(\lambda)\rangle$$

Mit den Entwicklungen

$$\epsilon_n(\lambda) = \epsilon_n^{(0)} + \lambda \epsilon_n^{(1)} + \lambda^2 \epsilon_n^{(2)} + \dots, \qquad |\varphi_n(\lambda)\rangle = |\varphi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\varphi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\varphi_n^{(2)}\rangle + \dots$$

erhalten wir aus einem Koeffizientenvergleich in  $\lambda$ :

$$\hat{H}_{0}|\varphi_{n}^{(0)}\rangle = \epsilon_{n}^{(0)}|\varphi_{n}^{(0)}\rangle, \qquad \hat{H}_{0}|\varphi_{n}^{(1)}\rangle + \hat{W}|\varphi_{n}^{(0)}\rangle = \epsilon_{n}^{(1)}|\varphi_{n}^{(0)}\rangle + \epsilon_{n}^{(0)}|\varphi_{n}^{(1)}\rangle$$
(5.55)

Aus der Normierungsbedingung von  $|\varphi_n(\lambda)\rangle$  folgt:

$$\langle \varphi_n(\lambda) | \varphi_n(\lambda) \rangle = \langle \varphi_n^{(0)} | \varphi_n^{(0)} \rangle + \lambda \left( \langle \varphi_n^{(0)} | \varphi_n^{(1)} \rangle + \langle \varphi_n^{(1)} | \varphi_n^{(0)} \rangle \right) + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

Da  $|\varphi_n^{(0)}\rangle$  bereits normiert ist muss  $\langle \varphi_n^{(0)} | \varphi_n^{(1)} \rangle$  rein komplex (also z.B. i $\alpha$ ) sein, damit sich die beiden Terme in der Klammer dann aufheben. Man kann zeigen, dass durch eine bestimmte Wahl der Phase  $e^{i\lambda\alpha}$  von  $|\varphi_n(\lambda)\rangle$  dieses Skalarprodukt sogar gleich 0 wird. O.b.d.a setzten wir also

$$\left\langle \varphi_n^{(0)} \left| \varphi_n^{(1)} \right\rangle = 0 \tag{5.56}$$

Multipliziert man die linear gestörte Schrödingergleichung (5.55) mit  $\langle \varphi_n^{(0)} |$  so erhält man unter Verwendung von (5.56):

$$\epsilon_n^{(1)} = \langle \varphi_n^{(0)} | \hat{W} | \varphi_n^{(0)} \rangle \,. \tag{5.57}$$

Multipliziert man dieselbe Gleichung mit einem allgemeinen  $\langle \varphi_{p,\mu}^{(0)} | p \neq n$ , so erhalten wir:

$$\langle \varphi_{p,\mu}^{(0)} | \hat{H}_0 - \epsilon_n^{(0)} | \varphi_n^{(1)} \rangle = \epsilon_n^{(1)} \underbrace{\langle \varphi_{p,\mu}^{(0)} | \varphi_n^{(0)} \rangle}_{=0} - \langle \varphi_{p,\mu}^{(0)} | \hat{W} | \varphi_n^{(0)} \rangle$$

Dies lässt sich letztlich umformen zu:

$$\langle \varphi_{p,\mu}^{(0)} | \varphi_n^{(1)} \rangle = \frac{\langle \varphi_{p,\mu}^{(0)} | \hat{W} | \varphi_n^{(0)} \rangle}{\epsilon_n^{(0)} - \epsilon_p^{(0)}}, \quad p \neq n.$$
 (5.58)

Aus der Vollständigkeit der  $|\varphi_{p,\mu}^{(0)}\rangle$  als Basis des  $\hat{H}_0$  erbt sich dann eine Darstellung für die Lineare Näherung von  $|\varphi_n(\lambda)\rangle$ :

$$|\varphi_n(\lambda)\rangle = |\varphi_n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{p \neq n} \sum_{\mu} \frac{\langle \varphi_{p,\mu}^{(0)} | \hat{W} | \varphi_n^{(0)} \rangle}{\epsilon_n^{(0)} - \epsilon_p^{(0)}} | \varphi_{p,\mu}^{(0)} \rangle + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

Analog erhält man durch identische Betrachtung der quadratisch gestörten Schrödingergleichung die Entwicklung:

$$\epsilon_n(\lambda) = \epsilon_n^{(0)} + \lambda \langle \varphi_n^{(0)} | \hat{W} | \varphi_n^{(0)} \rangle + \lambda^2 \sum_{p \neq n} \sum_{\mu} \frac{|\langle \varphi_{p,\mu}^{(0)} | \hat{W} | \varphi_n^{(0)} \rangle|^2}{\epsilon_n^{(0)} - \epsilon_p^{(0)}} + \mathcal{O}(\lambda^3) \,.$$

Damit diese Entwicklungen sinnvoll sind müssen die Matrixelemente (5.58) klein (<< 1) sein. Im Falle eines teilweise kontinuierlichen Spektrums geht die Summe über p in ein Integral über  $d\epsilon^{(0)}$ . Oft ist kein expliziter Parameter  $\lambda$  zugänglich. Dann wird  $\lambda \hat{W} := \hat{V}$  zum Entwicklungsterm.

#### Konvergenzverhalten

Die vollständigen Potenzreihen der Entwicklung für  $|\varphi_n(\lambda)\rangle$  und  $\epsilon_n(\lambda)$  konvergieren tatsächlich meist nicht. Insbesondere für **unbeschränkte** Operatoren divergieren die Potenzreihen. Trotzdem sind die ersten Ordnungen oft gute Näherungen für das Verhalten des Systems. Man kann das Konvergenzverhalten dieser Reihen im Rahmen der **Asymptotischen Reihen** verstehen. Die Abweichung (hier als Beispiel der anharmonische Oszillator) beträgt:

$$\Delta_N(\lambda) := \left| \epsilon_0(\lambda) - \sum_{k=0}^N \lambda^k \epsilon_0^{(k)} \right| \le C_N \lambda^{N+1}$$

Es gibt ein optimales  $N = \overline{N}$ , sodass die Entwicklung eine möglichst gute Näherung liefert. Somit kann es dazu kommen, dass sich sogar für *zusätzliche* Terme der Entwicklung die Näherung *verschlechtert*!

#### Störungstheorie eines entarteten Zustandes

Ganz ähnlich können wir auch Näherungsgleichungen für entartete Zustände ansetzten. Hierzu betrachten wir den Eigenraum { $|\epsilon_n, \mu\rangle$ }, mit Entartungsindex  $\mu$  zum Eigenwert  $\epsilon_n^{(0)}$  des ungestörten Hamiltonoperators  $\hat{H}_0$ . Das Problem ist, dass nun der Anfangszustand des gestörten Systems  $|\varphi_{n,\nu}^{(0)}\rangle$  nicht mehr bekannt ist, sondern nur als Linearkombination:

$$|\varphi_{n,\nu}(\lambda)\rangle \underset{\lambda \to 0}{\to} |\varphi_{n,\nu}^{(0)}\rangle = \sum_{\mu} \alpha_{\nu,\mu} |\epsilon_n^{(0)}, \mu\rangle$$

des jeweiligen Eigenraumes geschrieben werden kann. Der Index  $\nu$  gibt nur an, dass es sich hierbei um einen aus dem entarteten Eigenraum zusammengesetzten Zustand handelt. Die Entwicklungen setzten wir analog zum nicht entarteten Fall an und erhalten durch Multiplizieren der 2ten Gleichung in (5.55) mit  $\langle \epsilon_n^{(0)}, \mu' \rangle$  von links:

$$\sum_{\mu} \left( \langle \epsilon_n^{(0)}, \mu' | \hat{W} | \epsilon_n^{(0)}, \mu \rangle - \epsilon_{n,\nu}^{(1)} \delta_{\mu,\mu'} \right) \, \alpha_{\nu,\mu}^{(0)} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad (W - \epsilon_{n,\nu}^{(1)} \, \mathbf{1}) \, \alpha = 0 \,.$$

Die Rechte Schreibweise soll die Struktur dieser Gleichungen als ein Eigenwertproblem deutlich machen. Um also die Energiekorrektur  $\epsilon_{n,\nu}^{(1)}$  und den Zustand  $|\varphi_{n,\nu}^{(0)}\rangle$  zu bestimmen muss die Matrix zu  $\hat{W}$  bezüglich der Eigenvektoren diagonalisiert werden. Hierbei kann tatsächlich der **Entartungsgrad verringert** werden, je nachdem, wie viele unterschiedliche Eigenwerte  $\epsilon_{n,\nu}^{(1)}$  existieren. Man erhält dann für jeden Eigenwert einen eigenen Eigenraum, aus dem sich entsprechend mit den Koeffizienten  $\alpha_{\nu,\mu}$  der zugehörige Zustand ergibt. Multipliziert man diese Gleichung mit  $\lambda$  so wird klar, dass man entsprechend  $\lambda \epsilon_{n,\nu}^{(1)} = \Delta \epsilon$  mit dem Operator  $\lambda \hat{W} = \hat{V}$  erhält. Man kann die Entwicklung also genauso durchführen, auch wenn es keinen expliziten (kleinen) Parameter  $\lambda$  gibt.

# 5.14.3 Zeitabhängige Störungstheorie

Wir betrachten nun wieder ein System, das von einer (kleinen) Störung betroffen ist, die nun zeitabhängig sein kann:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$

Hierbei soll  $\hat{H}_0$  zeitunabhängig sein und die Eigenwerte und Eigenvektoren sollen bekannt sein:  $\hat{H}_0|n\rangle = \epsilon_n |n\rangle$ , wobei die Zustände entartet sein können. Den Zustand zur Zeit  $t_0$  bezeichnen wir mit  $|m\rangle$ , um die Rechnungen kürzer darzustellen. Wir definieren die Größe:

$$P_{m \to n}(t, t_0) := |\langle n | \psi(t) \rangle|^2$$

und bezeichnen sie als Übergangswahrscheinlichkeit. Im Diracbild erhält man also durch Einschieben des Zeitentwicklungsoperators zu  $\hat{H}_0$ :

$$P_{m \to n}(t, t_0) = |\langle n | \hat{U}_0 \hat{U}_0^{\dagger} | \psi(t) \rangle|^2 = |\langle n | \hat{U}_D | m \rangle|^2$$

Hierbei wirkt  $\hat{U}_0$  nach links und erzeugt dabei nur einen Phasenterm. Dabei ist  $|\psi_D(t_0)\rangle = |\psi(t_0)\rangle = |m\rangle$ . An dieser Stelle kann man Außerdem den **Zeitursprung von**  $|\mathbf{m}\rangle$  verschieben! Durch Multiplikation mit der Phase  $\exp(i\hat{H}_0(t_1 - t_0)/\hbar)$  ändern wir das Betragsquadrat *nicht*. Trotzdem entwickelt sich damit der Zustand  $|m\rangle = |\psi(t_0)\rangle$  zu  $|m'\rangle = |\psi(t_1)\rangle$ . Im Folgenden werden wir als Ausgangszustand aber  $|m\rangle$  schreiben. Wir verfügen bereits über eine implizite Darstellung für  $\hat{U}_D$  aus Kapitel 5.13.6. In erster Ordnung gilt:

$$\hat{U}_D(t, t_0) \approx \mathbf{1} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \int_{t_0}^{t_1} \hat{V}_D(t_1) \,\mathrm{d}t_1$$

Diese Näherung ist nur für kleine Zeiten  $(t - t_0 \text{ klein})$  quantitativ zutreffend. Unter der Annahme, dass sich die Zustände  $|n\rangle$  und  $|m\rangle$  unterscheiden, wobei sie natürlich trotzdem zur selben Energie gehören können, erhalten wir:

$$P_{m \to n}(t, t_0) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t \langle n | e^{i\hat{H}_0(t_1 - t_0)/\hbar} \hat{V}(t_1) e^{-i\hat{H}_0(t_1 - t_0)/\hbar} | m \rangle \, \mathrm{d}t_1 \right|^2 \, .$$

wobei wir das Dirac-Bild des  $\hat{V}$  eingesetzt haben. Dies ist also die Entwicklung der Übergangswahrscheinlichkeit in Ordnung  $\hat{V}^2$ . Indem man die Zeitentwicklungsoperatoren auf die Zustände anstatt auf den Operator wirken lässt erhält man die kürzere Form:

$$P_{m \to n}(t, t_0) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t e^{\mathrm{i}(\epsilon_n - \epsilon_m)t_1/\hbar} \langle n | \hat{V}(t_1) | m \rangle \, \mathrm{d}t_1 \right|^2 \,.$$

Da diese Näherung nur für kleine Zeiten  $t - t_0$  gilt müssen diese Wahrscheinlichkeiten sehr klein sein. Da die Wahrscheinlichkeit in irgendeinen Zustand überzugehen gleich 1 sein muss, gilt auch:

$$P_{m \to m}(t, t_0) = 1 - \sum_{m \neq n} P_{m \to n}(t, t_0) \approx 1$$

da der Ausdruck nur gilt, falls das Integral entsprechend klein ist.

# Störung zeitunabhängig: $\hat{V} = \hat{V}_0$

Falls die Störung zeitunabhängig ist, können wir die Übergangswahrscheinlichkeit entsprechend weiter vereinfachen. Mit den Bezeichnungen  $\omega_{nm} := (\epsilon_n - \epsilon_m)/\hbar$  und  $t' = t - t_0$ erhalten wir:

$$P_{m \to n}(t, t_0) = \frac{1}{\hbar^2} |\langle n | \hat{V} | m \rangle|^2 \underbrace{\frac{\sin^2(\omega_{nm} t'/2)}{(\omega_{nm}/2)^2}}_{:=f(\omega_{nm}, t')} \le \frac{t'^2}{\hbar^2} |\langle n | \hat{V} | m \rangle|^2$$

Das heißt, die Näherung ist nur zulässig, solange:

$$t' << \frac{\hbar}{|\langle n \, | \hat{V} | m \rangle|} \,.$$

Für den Fall, dass  $t' >> 1/\omega_{nm}^{-1}$  erhält man aus  $f(\omega_{nm}, t')$  eine Darstellung der Delta-Distribution:

$$t' >> \frac{1}{\omega_{nm}} \quad \Rightarrow \quad P_{m \to n}(t, t_0) \approx \frac{2\pi}{\hbar} t' |\langle n | \hat{V} | m \rangle|^2 \,\delta(\epsilon_n - \epsilon_m)$$

Dieser Ausdruck wird auch als **Fermis Goldene Regel** bezeichnet. Bei kontinuierlichen Zuständen geht die Delta-Distribution in eine Zustandsdichte über.

#### Periodische Störung:

Für eine Periodische Störung  $\hat{V} = V_0 \cos(\omega t)$  kann man für den Fall  $\omega_{nm} \approx \omega$  berechnen:

$$P_{m \to n}(t, t_0) = \frac{|\langle n | V_0 | m \rangle|^2}{4\hbar^2} \frac{\sin^2((\omega_{nm} - \omega)t/2)}{((\omega_{nm} - \omega)/2)^2}$$

Dieses Modell beschriebt die stimulierte Absorption von Photonen an Atomen. Analog wird für  $\omega_{nm} \approx -\omega$  die Emission modelliert. Es hat dieselbe Form wie eine zeitunabhängige Störung, wobei  $\omega_{nm}$  auf  $\omega_{nm} - \omega$  verschoben wurde.

#### 5.14.4 Wasserstoffatom im elektromagnetischen Strahlungsfeld

Wir betrachten ein Wasserstoffatom, das von einer elektromagnetischen Welle "getroffen" wird. In Strahlungseichung ( $\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x},t) = 0, \ \phi(\mathbf{x},t) = 0$ ) können wir somit schreiben:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x},t) = A_z(y,t)\mathbf{e}_z = \left(A_0e^{\mathrm{i}(ky-ckt)} + A_0^*e^{-\mathrm{i}(ky-ckt)}\right)\mathbf{e}_z$$

Die Felder erhalten wir dann durch:

$$\mathbf{E}(\mathbf{x},t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \propto \mathbf{e}_z, \qquad \mathbf{B}(\mathbf{x},t) = \nabla \times \mathbf{A} \propto \mathbf{e}_x$$

Der Hamilton operator ergibt sich aus der Hamilton funktion der elektromagnetischen Potenziale aus dem Korrespondenz prinzip. Die Hamilton funktion allgemeiner Potenziale A und  $\phi$  lautet:

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right)^2 + q \,\phi(\mathbf{x}, t)$$

Der Gesamthamiltonoperator des Systems (also die inklusive des Coulomb Terms) lautet für kleine Felder  $(\mathbf{A}^2 \rightarrow 0)$ :

$$\hat{H} \approx \underbrace{\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{\hat{r}}}_{:=\hat{H}_0} + \underbrace{\frac{e}{m_e c} \, \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}, t)}_{:=\hat{V}(t)}$$

Wir betrachten hier (im Vergleich zum Atomradius) große Wellenlängen, sodass  $ka_0 \ll 1$  ist und wir die Exponentialfunktion um kleine ky entwickeln:

$$e^{\pm ik\hat{y}} = 1 \pm ik\hat{y} - \frac{1}{2}k^2\hat{y}^2$$

Dies ist die Multipolentwicklung des Feldes und in der Dipolnäherung (nur die 1!) erhalten wir:

$$\hat{V}(t) \approx \frac{e}{m_e c} \, \hat{p}_z \left( A_0 e^{-ickt} + A_0^* e^{ickt} \right)$$

Ist  $A_0$  reell können wir diesen Ausdruck noch mittels dem Cosinus weiter vereinfachen. Außerdem setzten wir:  $E_0 = 2kA_0$  und  $\omega = ck$ :

$$V(t) = \frac{eE_0}{m_e\omega} \hat{p}_z \, \cos(\omega t)$$

Das heißt es handelt sich um eine periodische Störung mit  $V_0 \propto \hat{p}_z$ . Die zu berechnenden Matrixelemente sind also:

$$\langle n', l', m' | \hat{V}(t) | n, l, m \rangle \propto \langle n', l', m' | \hat{p}_z | n, l, m \rangle$$

#### Auswahlregeln:

 $\hat{l}_z$  kommutiert mit  $\hat{V}(t)$ , also auch mit  $\hat{H}(t)$ . Das bedeutet, dass die z-Komponente des Drehimpulses eine Erhaltungsgröße ist und sich somit nicht ändert (Kapitel 13.3). Man benutzt dies um zu zeigen:

$$0 = \langle n', l', m' | [\hat{V}, \hat{l}_z] | n, m, l \rangle = (m - m') \langle n', l', m' | \hat{V} | n, m, l \rangle$$

Also ist das Matrixelement gleich 0 für  $m \neq m'$ . Des Weiteren gilt die Kommutatorrelation:

$$[\hat{z},\,\hat{H}_0] = \frac{\mathrm{i}\hbar}{m_e}\,\hat{p}_z$$

Also kann man schreiben:

$$\langle n', l', m' | \hat{p}_z | n, m, l \rangle = \frac{\mathrm{i}m_e}{\hbar} (\epsilon_{n'} - \epsilon_n) \langle n', l', m' | \hat{z} | n, l, m \rangle$$

Mithilfe der Kugelflächenfunktionen  $(z = r \cos(\theta) \propto Y_{10})$  kann man zeigen, dass dieses übrige Matrixelement verschwindet, falls  $|l - l'| \neq 1$ . Die bisher erhaltenen Auswahlregeln lauten also:

$$\Delta m = 0, \qquad \Delta l = \pm 1$$

Für Felder entlang der x- oder y- Achse erhält man  $\Delta m = \pm 1$ . Mittels dieser Theorie kann man Absorption und induzierte Emission des Wasserstoffatoms im Strahlungsfeld erklären. Die spontane Emission auch ohne äußeres Feld kann man in dieser Theorie nicht beschreiben, dafür wird die Quantisierung des Feldes benötigt (Quantenelektrodynamik).

# 5.15 Bewegung im Elektromagnetischen Feld

### 5.15.1 Bewegungsgleichung der Operatoren

Der Hamiltonoperator des Elektromagnetischen Feldes wurde bereits oben eingeführt:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e} \left( \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}, t) \right)^2 - e \,\phi(\hat{\mathbf{x}}, t)$$
(5.59)

Wir bezeichnen den kinetischen Impulsoperator mit:

$$\hat{\pi} := \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{x}}, t)$$

im Gegensatz zum kanonischen Impulsoperator  $\hat{\mathbf{p}}$ . Wie betrachten im Folgenden ein Elektron mit q = -e. Aus den kanonischen Kommutatorrelationen für  $\hat{\mathbf{p}}$  können wir die Kommutatoren

$$[\hat{\pi}_j, \, \hat{\pi}_k] = -\mathrm{i}\hbar \frac{e}{c} \varepsilon_{jkl} B_l \,, \qquad [\hat{r}_j, \, \hat{\pi}_k] = \mathrm{i}\hbar \delta_{jk} \mathbf{1}$$

berechnen. Dabei wurde  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  verwendet. Allgemein kommutiert  $\mathbf{A}(\mathbf{\hat{x}})$  mit jeder Funktion  $f(\mathbf{\hat{x}})$ . Im Heisenbergbild erhalten wir dadurch die Bewegungsgleichung:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathbf{\hat{x}}_{\mathrm{H}}(t) = \frac{1}{m_e}\,\mathbf{\hat{\pi}}_{\mathrm{H}}\,.$$

Daher kommt der Name für  $\hat{\pi}$ . Analog erhalten wir (man beachte die explizite Zeitabhängigkeit von **A**!):

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\pi}_{\mathrm{H}} = -\frac{e}{2m_{e}c}\left(\hat{\pi}_{\mathrm{H}} \times \mathbf{B}(\hat{\mathbf{x}}_{\mathrm{H}}, t) - \mathbf{B}(\hat{\mathbf{x}}_{\mathrm{H}}, t) \times \hat{\pi}_{\mathrm{H}}\right) - e\mathbf{E}(\hat{\mathbf{x}}_{\mathrm{H}}, t)$$

Um in diese Terme zu berechnen muss auf  $[\hat{\pi}, \hat{\pi}^2]$  die Rechenregel (5.15) angewandt werden. Ohne durchgehend alle Abhängigkeiten mitzuschreiben, wobei  $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{\hat{x}}_{H})$  erhalten wir:

$$m_e \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2} \mathbf{\hat{x}}_{\mathrm{H}} = -\frac{e}{2c} \left( \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \mathbf{\hat{x}}_{\mathrm{H}} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \mathbf{\hat{x}}_{\mathrm{H}} \right) - e \mathbf{E}(\mathbf{\hat{x}}_{\mathrm{H}}, t) \,.$$

Bis auf eine Symmetriesierung des Vektorproduktes entspricht dies also genau der bekannten Lorentzkraft.

# 5.15.2 Eichtransformationen

In der klassischen Elektrodynamik sind alle messbaren Felder ( $\mathbf{B}$  und  $\mathbf{E}$ ) unverändert, wenn man die Potenziale eines sog. Eichtransformation:

$$\phi(\mathbf{x},t) \to \phi'(\mathbf{x},t) = \phi(\mathbf{x},t) - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}, \qquad \mathbf{A}(\mathbf{x},t) \to \mathbf{A}'(\mathbf{x},t) = \mathbf{A}(\mathbf{x},t) - \nabla \chi$$

unterzieht. Man kann in quantenmechanisch zeigen, dass wenn  $\psi(\mathbf{x}, t)$  die Schrödingergleichung zu einem Hamiltonoperator  $\hat{H}$  lößt, dass die Lösung des geeichten Operators  $\hat{H}'$  die Form:

$$\psi'(\mathbf{x},t) = \exp\left(i\frac{e}{\hbar c}\chi(\mathbf{x},t)\right)\,\psi(\mathbf{x},t)$$

hat. Die messbare Größe  $|\psi|^2$  bleibt also **invariant**. Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte haben wir bisher mit dem kanonischen Impulsoperator geschrieben. Mit einem elektromagnetischen Feld muss dieser mit dem kinetischen Impulsoperator ersetzt werden:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{2m} \left( \psi^*(\hat{\pi}\psi) + \psi(\hat{\pi}\psi)^* \right)$$

Diese ist, wie man nachrechnen kann, ebenfalls unabhängig von der Eichung. Dabei ist zu beachten, dass bei einer Eichung zunächst einmal die Wellenfunktion um den lokalen Phasenterm (wie oben) erweitert werden muss. Die Eigenenergien des Systems, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit und die Wahrscheinlichkeitsstromdichte sind also **unabhängig** von der Eichung. Wir man im Folgenden sehen wird sind die Symmetrien des Hamiltonoperators und somit auch die vollständigen Sätze, die zur Lösung des Systems verwendet werden unterschiedlich. Dadurch **ändern sich die nötigen Quantenzahlen**.

#### 5.15.3 Landau Niveaus

Wir betrachten ein Elektromagnetisches Feld in Strahlungseichung mit  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$  (räumlich und zeitlich konstant) also  $\mathbf{A} = (A_x, A_y, 0), \phi = 0$ . Der Hamiltonoperator ergibt sich entsprechend leicht aus Gl. 5.59. Zur Lösung spalten wir den Term  $\sim \hat{p}_z$  ab und erhalten:

$$\hat{H} := \hat{H}_\perp + \frac{\hat{p}_z^2}{2m_e}$$

Mit einem Separationsansatz  $\psi(\mathbf{x}) = \varphi(x, y) e^{ip_z z/\hbar}$  erhalten wir die Gleichung:

$$\hat{H}_{\perp}\varphi(x,y) = \epsilon \,\varphi(x,y)$$

Wobei die Gesamtenergie dann gegeben ist durch:

$$\epsilon_{\rm tot} = \frac{p_z^2}{2m_e} + \epsilon$$

ist. In der sog. Landau-Eichung  $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)^{21}$  mach man einen weiteren, analogen Separationsansatz:

$$\varphi(x,y) = \frac{e^{\mathrm{i}p_y y/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \chi_{p_y}(x) \,.$$

Dann bleibt für  $\chi_{p_y}(x)$  eine eindimensionale Schrödingergleichung, die der eines Harmonischen Oszillators mit verschobenem Ruhepunkt entspricht:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\partial^2 \chi_{p_y}}{\partial x^2}(x) + \frac{1}{2}m\omega_c^2(x+k_y l_B^2)^2 \chi_{p_y}(x) = \epsilon \chi_{p_y}(x)$$

Mit den Konstanten:

$$k_y = \frac{p_y}{\hbar}$$
, magnetische Länge  $l_b := \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$ , Zyklotronfrequenz  $\omega_c = \frac{eB}{m_e c}$ 

Dadurch erhalten wir die Gesamtenergie:

$$\epsilon_{\rm tot} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c + \frac{p_z^2}{2m_e} \,.$$

Die Energien  $\epsilon_n$  des  $\hat{H}_{\perp}$  sind **unendlich oft entartet**, da sie unabhängig von  $p_y$  sind,  $p_y$  aber in den Eigenfunktionen  $\varphi(x, y)$  auftritt. Man nennt sie auch **Landau-Niveaus**.

 $<sup>^{21}\</sup>mathrm{Es}$ ist klar, dass daraus folgt: rot $\mathbf{A}=\mathbf{B}$ 

# Coulomb-Eichung

In der Coulomb Eichung gilt für A:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}\,\mathbf{x}\times\mathbf{B}\,,$$

wobei immer noch  $\mathbf{B} = E\mathbf{e}_z$ . Der entsprechende Hamiltonoperator  $\hat{H}'_{\perp}$  lautet dann:

$$\hat{H}'_{\perp} = \frac{1}{2m_e}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + \frac{1}{8}m_e\omega_c^2(\hat{x}^2 + \hat{y}^2) + \frac{\omega_c}{2}\hat{l}_z$$

Man erkennt hier offensichtlich den Hamiltonoperator eines 2-dim. Harmonischen Oszillators mit Frquenz  $\omega_c/2$ . Man kann nachrechnen, dass  $\hat{l}_z$  mit den restlichen Anteilen von  $\hat{H}'_{\perp}$  kommutiert, sodass es gemeinsame Eigenzustände gibt. Das heißt die Eigenenergien sind identisch.

## 5.15.4 Der Aharonov-Bohm-Effekt

Wir betrachten Elektronen, die sich in einem **einfach zusammenhängenden** Gebiet  $\Omega$  aufhalten können, in dem ein Magnetfeld **B** verschwindet. Außerhalb von  $\Omega$  kann aber auch  $\mathbf{B} \neq 0$  gelten. Also ist  $\nabla \times \mathbf{A} = 0$  in  $\Omega$  und somit lässt sich **A** als Gradientenfeld schreiben:

$$\mathbf{A} := 
abla \eta(\mathbf{x}) \quad \Leftrightarrow \quad \eta(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}} \mathbf{A} \cdot \mathrm{d}\mathbf{r}$$

Wir fassen  $\chi(\mathbf{x}) = -\eta(\mathbf{x})$  als Eichtransformation auf. Das heißt, dass  $\mathbf{A}' = 0$  gilt. Daher ist der Hamiltonoperator (5.59) unabhängig von  $\mathbf{A}'$  also auch unabhängig von  $\mathbf{B}$ . Das bedeutet für die Wellenfunktion:

$$\phi(\mathbf{x}) = \psi'(\mathbf{x}) \exp\left(-\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c} \int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}} \mathbf{A} \cdot \mathrm{d}\mathbf{l}\right)$$

Wenn aber  $\Omega$  nicht einfach zusammenhängend ist, dann erhalten wir gemäß dem Stokesschen Integralsatz:

$$\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \int_{S} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} =: \Phi(\mathbf{B}),$$

mit dem **magnetischen Fluss**  $\Phi$ . Trennen wir aber das Gebiet an einer Stelle so ab, dass es einfach zusammenhängend wird (einfach zu überlegen am Kreisring), so kann man das Vektorpotetnial wieder "wegeichen". Dabei wählt man als Enwicklungspunkt für **A** einein Punkt  $\mathbf{x}_0$  auf der Trennwand. Nähert man sich von beiden Seiten dieser Trennwand an, so gilt aufgrund der Stetigkeitsbedingung:

$$\psi(\mathbf{x}_0^-) = \psi(\mathbf{x}_0^+)$$

Ohne Trennwand muss die Wellenunktion aber eindeutig sein, weshalb folgt:

$$\psi(\mathbf{x}_0^+) = \psi(\mathbf{x}_0^-) \quad \Rightarrow \quad \psi'(\mathbf{x}_0^+) = \psi'(\mathbf{x}_0^-) \exp\left(-\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c} \int_{\mathbf{x}_0^+}^{\mathbf{x}_0^-} \mathbf{A} \cdot \mathrm{d}\mathbf{l}\right)$$

Was sich aber umschreiben lässt zu:

$$\psi'(\mathbf{x}_0^+) = \psi'(\mathbf{x}_0^-) \exp\left(-2\pi i \frac{\Phi(\mathbf{B})}{\Phi_0}\right),$$

wobei  $\Phi_0 = hc/e$  das **Flussquantum** ist. Also ist die Wellenfunktion auch in dem Bereich **ohne Magnetfeld nicht unabhängig** von dem Magnetfeld **außerhalb**. Man kann dies mithilfe des Doppelspaltexperimentes durch Verknüpfung mit einem Magnetfeld auch experimentell überprüfen.

# 5.16 Ununterscheidbare Teilchen

Wir betrachten zwei Teilchen mit identischen Eigenschaften (Masse, Ladung, Spin, Ladung, usw.), wie z.B. zwei Elektronen mit der klassischen Hamiltonfunktion:

$$H(\mathbf{x}_1, \mathbf{p}_1, \mathbf{x}_2 \mathbf{p}_2) = \frac{p_1^2 + p_2^2}{2m} + \frac{e^2}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} - e(\phi(\mathbf{x}_1 + \phi(\mathbf{x}_2)))$$

Klassisch ist also die Hamiltonfunktion invariant unter der Vertauschung der Teilchen. Ein klassisches Teilchen kann man aber immer anhand der Trajektorie von anderen unterscheiden, da diese deterministisch verläuft. Sind die Anfangszustände  $\mathbf{x}_{1/2}$  und  $\mathbf{p}_{1/2}$  bekannt so kann die Bewegungsgleichung mathematisch eindeutig integriert werden. In der Quantenmechanik ist hier also der Hamiltonoperator invariant unter der Vertauschung zweier Teilchen. Das bedeutet für die Wellenfunktion ebenfalls eine Symmetrie  $\psi(1, 2) = \pm \psi(2, 1)$ , wie wir später sehen werden. Damit ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit invariant unter der Vertauschung zweier Teilchen. Man kann also durch kein Experiment die Teilchen voneinander unterscheiden, da die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ja beiden Teilchen simultan beschreibt. Daher war es bereits vorher so wichtig zu betonen, dass zwei Teilchen unterscheidbar sind.

#### Mathematische Beschreibung

Um die Teilchen vollständig zu beschrieben müssen wir das Tensorprodukt:

$$\mathcal{H}_{12} = (\mathcal{H}_{\mathrm{Bahn},1} \otimes \mathcal{H}_{\mathrm{Spin},1}) \otimes (\mathcal{H}_{\mathrm{Bahn},2} \otimes \mathcal{H}_{\mathrm{Spin},2})$$

Wir kürzen die Zustandsbezeichnung  $|\mathbf{x}_i, m_{s_i}\rangle$  mit  $|\xi_i\rangle$  ab. Die Produktzustände lassen sich also kurz schreiben mit:

$$|\mathbf{x}_1, m_{s_1}\rangle \otimes |\mathbf{x}_1, m_{s_1}\rangle = |\mathbf{x}_1, m_{s_1}, \mathbf{x}_2, m_{s_2}\rangle = |\xi_1, \xi_2\rangle$$

Eine beliebige Wellenfunktion lässt sich also durch:

$$\psi(\xi_1,\xi_2) = \langle \xi_1,\xi_2 | \psi \rangle$$

darstellen. Aus der Annahme, dass die Teilchen (bis auf die Nummerierung (1)/(2)) **identisch** sind folgt, dass die Basis von  $\mathcal{H}_1$  gleich der Basis von  $\mathcal{H}_2$  ist. Diese bezeichnen wir mit  $|i_{1/2}\rangle$  bzw.  $|j\rangle$ . Das ermöglicht die Entwicklung:

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} \alpha_{ij} |i_1\rangle \otimes |j_2\rangle$$

#### Permutationsoperator

Wir definieren den **Permutationsoperator**  $P_{12}$ , der die Zustände der Teilchen vertuscht:

$$P_{12}|\psi\rangle = \sum_{ij} \alpha_{ij} |j_1\rangle \otimes |i_2\rangle$$

Es ist klar, dass  $P_{12}^2 = \mathbf{1}$  und das  $P_{12}$  das Skalarprodukt erhält, also  $P_{12}^{\dagger}P_{12} = \mathbf{1}$ . Also ist  $P_{12}$  selbstadjungiert und unitär und hat deshalb, wie der Partitätsoperator nur die Eigenwerte ±1. Die Eigenvektoren sind also in der Spinortsdarstellung:

$$\langle \xi_1, \xi_2 | P_{12}\psi \rangle = \langle \xi_2, \xi_1 | \psi \rangle = \psi(\xi_2, \xi_1),$$

also die bezüglich der **Teilchenvertauschung (anti)symmetrischen** Spin- Ortswellenfunktionen. Wir bezeichnen sie mit  $\psi_S(\xi_1, \xi_2)$  und  $\psi_A(\xi_1, \xi_2)$ . Die Transformation einer Observable (bzw. eines beliebigen Tensorproduktes zweier Operatoren) durch den Permutationsoperator erhält man zu:

$$P_{12}(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})P_{12}^{\dagger} = (\mathbf{B} \otimes \mathbf{A})$$

# 5.16.1 Zustand ununterscheidbarer Teilchen

Zwei ununterscheidbare Teilchen werden also durch eine Wellenfunktion beschrieben, die sich durch Anwendung des Permutationsoperators nur bis auf eine Phase ändert. Da  $P_{12}^2 = \mathbf{1}$  ist muss diese Phase  $\pm 1$  sein. Wir benötigen hier ein weiteres Postulat:

**Postulat 8:** Identische Teilchen werden entweder durch totalsymmetrische (Bosonen) oder durch totalantisymmetrische (Fermionen) Zustände beschrieben. Bosonen besitzen ganzzahligen und Fermionen halbzahligen Spin<sup>22</sup>.

Weiterhin sind alle relevanten Observablen des Systems symmetrisch, d.h.:

$$\hat{A}(1,2) = \hat{A}(2,1) \quad \Leftrightarrow \quad [P_{12},\,\hat{A}] = 0$$

Der Permutationsoperator vertauscht bei ununterscheidbaren Teilchen mit dem Hamiltonoperator, d.h. die **Symmetrie bleibt erhalten**. Um zwischen symmetrischen und antisymmetrischen Zuständen besser umgehen zu können definiert man die Projektionsoperatoren:

$$\mathcal{A} = \frac{1}{2}(1 - P_{12}), \qquad \mathcal{S} = \frac{1}{2}(1 + P_{12})$$

Mit den entsprechenden (nicht unbedingt bereits normierten!) Zuständen:

$$|\psi_A\rangle := \mathcal{A}|\psi\rangle, \qquad |\psi_S\rangle := \mathcal{S}|\psi\rangle$$

Damit sind **Überlagerungen** dieser Zuständen keine Eigenzustände des Permutationsoperators und daher für ununterscheidbare Teilchen **nicht zulässig**. Der Zustand kann also nur entweder symmetrisch oder antisymmetrisch sein.

## 5.16.2 Pauli-Prinzip

Eine leichte Folgerung ist das Pauli Prinzip:

**Pauli-Prinzip:** Zwei Fermionen können nicht gleichzeitig im selben Einteilchenzustand sein.

Der Einteilchenzustand ist hierbei  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Der Produktzustand eines Fermionensystems ist damit:

$$|\psi_A\rangle = \mathcal{A}(|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle) = \frac{1}{2}(|\psi_1,\psi_2\rangle - |\psi_1,\psi_2\rangle) = 0$$

was zu zeigen war.

# 5.16.3 Ununterscheidbare Teilchen

Für N ununterscheidbare Teilchen ist der Hilbertraum:

$$\mathcal{H}=\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2\otimes...\otimes\mathcal{H}_N$$

Mit den Tensorproduktzuständen:

$$|i_1, j_2, ..., q_N\rangle = |i_1\rangle \otimes |j_2\rangle \otimes ... \otimes |q_N\rangle$$

#### Transpositionen

Eine Transposition  $P_{nm}$   $(n \neq m)$  ist eine Permutation des *m*-ten mit dem *n*-ten Teilchen:

$$P_{mn}|i_1,...,j_m,...,p_n,...,q_N\rangle = |i_1,...,p_m,...,j_n,...,q_N\rangle$$

Hierbei sind die Buchstaben die Zustände und die Zahlen die Teilchen. Wir bezeichnen verschiedene Typen von Zuständen:

- Totalsymmetrisch:  $P_{mn}|\psi_S\rangle = |\psi_S\rangle \quad \forall \ (m,n), \ m \neq n$
- Totalantisymmetrisch:  $P_{mn}|\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle \ \forall (m,n), \ m \neq n$

Beliebige Permutationen  $P_{\sigma}$  bilden gemäß

$$P_{\sigma}|i_1, j_2, ..., q_N\rangle = |i_{\sigma(1)}, j_{\sigma(2)}, ..., q_{\sigma(N)}\rangle$$

Es ist klar, dass sich jede Permutation als (nicht eindeutige) Verkettung von Transpositionen  $P_{mn}$  beschreiben lässt. Dabei ist nur eindeutig, ob die Anzahl der Transpositionen **gerade** oder **ungerade** ist. Daher bezeichnet man die **Signatur** einer Permutation mit:

$$\operatorname{sgn}(\sigma) = \begin{cases} +1 & \text{falls } \sigma \text{ gerade ist} \\ -1 & \text{falls } \sigma \text{ ungerade ist} \end{cases}$$

Daraus folgt:

$$P_{\sigma}|\psi_{S}\rangle = |\psi_{S}\rangle, \qquad P_{\sigma}|\psi_{A}\rangle = \operatorname{sgn}(\sigma)|\psi_{A}\rangle$$

Die Projektionsoperatoren werden dann entsprechend mit der Summe über alle Permutationen definiert, sodass die Zustände total (anti)symmetrisch sind:

$$|\psi_S\rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} P_{\sigma} |\psi\rangle, \qquad |\psi_A\rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma} \operatorname{sgn}(\sigma) P_{\sigma} |\psi\rangle$$
 (5.60)

Relevante Observablen sind dann totalsymmetrisch:

$$[\hat{A}, P_{\sigma}] = 0 \quad \forall \ \sigma$$

# 5.16.4 Eigenschaften von nicht wechselwirkenden ident. Teilchen

Für N nicht wechselwirkende Teilchen ist der Hamiltonoperator des Systems einfach als die Summe der einzelnen Hamiltonoperatoren gegeben. Im zeitunabhängigen Fall erhält man aus den Lösungen der einzelnen Schrödingergleichungen als Produktzustände:

$$arphi_{lpha_1}(\xi_1)arphi_{lpha_2}(\xi_2)...arphi_{lpha_N}(\xi_N)$$

Zur Gesamtenergie  $\epsilon = \epsilon_{\alpha_1} + ... + \epsilon_{\alpha_N}$ . Diese Zustände sind allerdings zunächst nicht (anti)symmetrisch und beschreiben daher keine ununterscheidbaren Teilchen. Gemäß (5.60) erhält man die korrekten Zustände. Für die Antisymmetrischen Zustände können wir dies auch mittels der **Slayter-Determinante** ausdrücken:

$$\psi_A(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \varphi_{\alpha_1}(\xi_1) & \dots & \varphi_{\alpha_1}(\xi_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_{\alpha_N}(\xi_1) & \dots & \varphi_{\alpha_N}(\xi_N) \end{vmatrix}$$

Das Pauli Prinzip für N Teilchen ergibt sich also durch das verschwinden dieser Determinante falls  $\varphi_{\alpha_i}(\xi) = \varphi_{\alpha_j}(\xi)$  für  $i \neq j$ . Die Determinante einer Matrix mit 2 linear abhängigen Spalten oder zwei gleichen Zeilen verschwindet.

# 5.17 Viel Elektronen Atom

Der Gesamthamiltonoperator ist gegeben durch:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{\mathbf{p}}_{i}^{2}}{2m_{e}} - \sum_{i=1}^{N} \frac{Ze^{2}}{\hat{r}_{i}} + \sum_{i < j} \frac{e^{2}}{|\hat{\mathbf{x}}_{i} - \hat{\mathbf{x}}_{j}|}$$

Leider ist die Vernachlässigung des Wechselwirkungstermes keine gute Näherung, weshalb man auch keine zeitunabhängige Störungstheorie anwenden kann. Das Verhältnis zwischen dem Störoperator und dem Hauptpotenzial wäre von der Größe 1/4.

# Näherung durch Abschirmung

#### Zentralfeldmethode

Wir betrachten in erster Näherung die Wirkung der Z-1 anderen Elektronen auf das einzelne Elektron als *reine Abschirmung* von Kernladungen. Eine Zutreffende Beschreibung dieser Abschirmung ist allerdings ebenfalls nicht trivial. Man konstruiert solche Potenziale mit der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte der Elektronen, die allerdings wieder von der Lösung der Schrödingergleichung abhängt. Ein solches Problem muss also **selbstkonsistent** sein. Wir bezeichnen dieses Potenzial als  $V_c(\hat{r}_i)$ . Mittels dieser Potenziale erhält man also einzelne Schrödingergleichungen für die Elektronen. Betrachtet man das System also mit diesem Potenzial kann man den Operator:

$$\hat{V}_1 = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{-Ze^2}{\hat{r}_i} + \sum_{i$$

als Störung betrachten. Die Schrödingergleichungen zu  $V_c$  erhalten den Drehimpuls, weshalb l weiterhin eine gute Quantenzahl ist. Die Energieeigenwerte hängen aber im Allgemeinen von n und l ab. Man kann aber immer n so voraussetzten, dass  $l \leq n - 1$  und die Energie mit größerem l und n wächst. Mit dem Spin und der Quantenzahl m ergibt sich die Energieentartung einer festen (n, l)-"Schale" zu 2(22 + 1), sodass die Gesamtentartung eines Zustandes  $n \ 2n^2$  ist. Mit dieser Betrachtung kann man die Struktur der Atomhülle erklären. Die Energie ist einfach durch die Summe der Energie der einzelnen Schrödingergleichung gegeben.

#### Einfluss der Störung

Wir betrachten nun die Störung von  $\hat{V}_1$  auf die Energie.  $\hat{V}_1$  kommutiert, ebenso wie  $\hat{H}_0$ , mit dem Gesamtdrehimpuls und dem Gesamtspin. Hierbei ist wichtig zu erwähnen, dass der Term:

$$rac{1}{|\mathbf{\hat{x}}_i - \mathbf{\hat{x}}_j|} \quad ext{mit} \quad \mathbf{\hat{l}}_i + \mathbf{\hat{l}}_j$$

kommutiert, da bei einer Rotation der Abstand  $|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$  konstant bleibt. Somit diagonalisiert die Basis  $|\mu, L, S, M_L, M_S\rangle$  mit zusätzlichen Elementen  $\mu$  den Operator  $\hat{V}_1$ .

# Kapitel 6

# Statistische Physik

# 6.1 Einführung und Grundlagen

# 6.1.1 Fragestellung der statistischen Physik

Gegenstand der statistischen Physik sind Systeme mit einer sehr hohen Anzahl an Freiheitsgraden. Ein solches System nennt man makroskopisch. Freiheitsgerade können z.B. einfach die Bewegungsfreiheitsgrade einer Anzahl an Teilchen in einem Gas oder die atomaren Spins der Teilchen in einem Ferromagneten sein. Die Größenordnung ist vergleichbar mit der sog. Avogadrozahl  $N_A \approx 6.02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ , die besagt, wie viele Teilchen in einem sog. Mol Stoffmenge enthalten sind.

Das Ziel hierbei ist die physikalischen Eigenschaften von solchen Systemen ausgehend von den mikroskopisch exakt bekannten Gesetzen zu verstehen. Dabei sind von Interesse:

- Gleichgewichtseigenschaften (z.B. Wärmekapazität)
- Transporteigenschaften (z.B. elektrische oder auch Wärmeleitfähigkeit)
- Beziehungen zwischen verschiedenen makroskopischen Größen (z.B. ideale Gasgleichung, Phasendiagramme)
- Phasenzustände (z.B. Gas-Flüssigkeit, magnetische Ordnungen)
- Emergenz von Phänomenen und Eigenschaften auf der makroskopischen Erfahrungsebene

 $\Rightarrow~$ Erklärung sog. "makroskopischer" Phänomene, wie Supraleitung und Magnetismus

Die Behandlung von Systemen außerhalb des thermischen Gleichgewichtes ist deutlich schwieriger und nicht Teil dieser Vorlesung. Wie noch besprochen werden wird, werden alle hier behandelten Prozesse sog. quasi statische Prozesse sein, d.h. als eine "langsame" (das ist natürlich relativ) Abfolge von Gleichgewichtszuständen betrachtet.

# 6.1.2 Methodik der statistischen Physik

Einführend werden hier einige wichtige Begriffe erläutert, die von zentraler Bedeutung sind. Man unterscheidet zwischen dem **Mikrozustand:** 

- klassisch: Orte und Impulse aller Teilchen
- quantenmechanisch: Wellenfunktion  $|\psi\rangle$

## und dem Makrozustand:

• Satz von makroskopischen Größen, wie Druck, Temperatur, Volumen, Konzentrationen usw.

eines Systems. Hierbei können entsprechend verschiedene Mikrozustände zu ein und demselben Makrozustand führen. Bei der Vorhersage von Messgrößen wird eine (gewichtete) Mittelung (**Erwartungswert**) über alle diese Mikrozustände vorgenommen.

## **Statistisches Ensemble:**

Die Gesamtheit der zu einem Makrozustand passenden Mikrozuständen und ihre **Gewichtung** bezeichnet man als statistisches Ensemble. In der klassischen Mechanik wird dieses Ensemble durch eine Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(q, p, t)$  und in der Quantenmechanik durch eine Kombination aus Möglichen Zuständen  $|\psi_i\rangle$  und der Wahrscheinlichkeit  $p_i$  für ihr Auftreten beschrieben.

Die erste Aufgabe wird also sein das Ensemble des Systems statistisch zu charakterisieren. Die Notwendigkeit diese statistische Beschreibung vorzunehmen entsteht aus unserem Mangel an Information über das System.

Unangenehm ist, dass aus diesen Mittelungen eben auch **statistische Unschärfen** (Varianz) resultieren.<sup>1</sup> Für die meisten statistischen Systeme ist die Anzahl der Freiheitsgrade N allerdings sehr groß, im Grenzfall unendlich (man nennt dies auch den **thermodynamischen Grenzfall**). Dadurch schrumpft die Streuung der Mittelwerte von Messgrößen typischerweise mit  $\propto 1/\sqrt{N}$ . Man nennt dies auch das **Gesetz der großen Zahlen**, welches aus dem **zentralen Grenzwertsatz** resultiert.

# 6.1.3 Statistische Methoden und Zentraler Grenzwertsatz

Wir betrachten im Folgenden eine reelle kontinuierliche Zufallsvariable X, mit der Wahrscheinlichkeitsdichte (Verteilungsfunktion) W(x).<sup>2</sup> Zunächst drei Anmerkungen zu bisher u.U. weniger bekannten Begriffen und zur Notation:

• Momente der Verteilungsfunktion:

$$\mu_n = \langle X^n \rangle, \ n \in \mathbb{N}_0 \quad (\mu_0 = 1, \ \mu_1 = \langle X \rangle)$$

• Die Standardabweichung wird hier als  $\Delta X$  bezeichnet. Dabei gilt:

$$\Delta X^{2} = \left\langle (X - \langle X \rangle)^{2} \right\rangle = \langle X^{2} \rangle - \langle X \rangle^{2}.$$

• Die Wahrscheinlichkeitsdichten bekommen nur einen Index, wenn nicht klar ist, welche Dichte zu welcher Zufallsvariable gehört. Selbiges gilt für Mittelwerte und Varianzen.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Diese Unschärfe hängt nicht mit der Heisenbegschen Unschärferelation zusammen, sondern ist eine Konsequenz der statistischen Beschreibung, die auch in der klassischen Betrachtung auftritt.

 $<sup>^{2}</sup>$ Die aus den Vorlesungen Höhere Mathematik III und Theoretische Physik III Begriffe (Mittelwert usw.) und Anforderungen an eine solche Zufallsvariable und ihre Verteilungsfunktion (Normierung) werden hier nicht erneut eingeführt.

### Charakteristische Funktion

Die charakteristische Funktion einer Verteilung ist definiert als

$$\chi(k) = \int \mathrm{d}x \, e^{-\mathrm{i}kx} W(x) = \langle e^{-\mathrm{i}kx} \rangle \,.$$

Aus der charakteristischen Funktion erhält man durch Rücktransformation wieder die Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$W(x) = \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \, e^{\mathrm{i}kx} \chi(k)$$

Die Charakteristische Funktion ist offenbar einfach die Fourier-Transformierte der Wahrscheinlichkeitsdichte. Die **Taylorentwicklung** der charakteristischen Funktion lässt sich leicht durch die Momente der Verteilung ausdrücken:

$$\chi(k) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\mathrm{i}k)^n}{n!} \,\mu_n$$

Man kann also durch Angabe der Momente der Verteilung die Wahrscheinlichkeitsdichte rekonstruieren.

#### Kumulanten-Entwicklung

Man kann zeigen, dass die charakteristische Funktion auch durch

$$\chi = \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\mathrm{i}k)^n}{n!} C_n\right) \,,$$

ausgedrückt werden kann, wobei die Entwicklungskoeffizienten auch **Kumulanten** genannt werden. Hierzu nimmt man eine Taylorentwicklung des Logarithmus der charakteristischen Funktion vor. Bis n = 3 gilt:

$$C_1 = \langle X \rangle, \qquad C_2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2, \qquad C_3 = \langle X^3 \rangle - 3 \langle X^2 \rangle \langle X \rangle + 2 \langle X \rangle^3$$

Bei einer Verschiebung der Zufallsvariable:  $W_Y(y) = W_X(y-c)$  ändert sich nur die erste Kumulante  $C_1^Y = C_1^X + c!$ 

#### Diskrete Zufallsvariablen

Man kann aus der Beschreibung der kontinuierlichen Zufallsvariablen sofort auf die Beschreibung der diskreten Zufallsvariablen zurückschließen, indem man sich der  $\delta$ -Distribution bedient. Ist X also eine Zufallsvariable, die nur die Werte  $\xi_i$  mit den Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  annimmt, so kann man sie durch eine Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$W_X(x) = \sum_i p_i \,\delta(x - \xi_i)$$

beschreiben.

#### Multidimensionale Zufallsvariablen

Bekannt sind ebenfalls bereits *n*-dimensionalen Zufallsvariablen  $\mathbf{X} = (X_1, X_2, ..., X_n)$ , mit Wahrscheinlichkeitsdichten  $W(\mathbf{x})$ . Wir definieren die **Kovarianzmatrix** als:

$$K_{ij} = \left\langle \left(X_i - \langle X_i \rangle\right) \left(X_j - \langle X_j \rangle\right) \right\rangle = \left\langle X_i X_j \right\rangle - \left\langle X_i \right\rangle \left\langle X_j \right\rangle.$$

Falls  $K_{ij} = 0$ ,  $i \neq j$ , so heißen  $X_i$  und  $X_j$  unkorreliert. Für den Fall, dass für die Wahrscheinlichkeitsdichte gilt:  $w(\mathbf{x}) = w_i(x_i) \cdot w'(\{x_k, k \neq i\})$ , so ist die Variable  $X_i$  unabhängig von allen anderen Variablen. Zudem verschwindet die Korrelation. Umgekehrt gilt dies nicht!

#### Wahrscheinlichkeitsdichte einer Funktion

Sei  $F(\mathbf{x})$  eine reellwertige Funktion eines Zufallsvektors **X**. Dann kann man auch die Wahrscheinlichkeit bestimmen, dass der Wert der Funktion F an der Stelle  $\mathbf{x}$  zu dem vorgegebenen y passt. Die Wahrscheinlichkeitsdichte für F lautet dann:

$$w_F(y) = \int \mathrm{d}^n x \, w_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) \, \delta(F(\mathbf{x}) - y) = \left\langle \delta(F(\mathbf{x}) - y) \right\rangle.$$

Man kann dies auch formal mittels der Charakteristischen Funktion über die Momente von  $w_F$ , also  $\langle F^n \rangle_{w_{\mathbf{X}}}$ , beweisen. Anschaulich kann man sich dies folgendermaßen klarmachen: Die Frage lautet: "Wie hoch ist die Wahrscheinlichkeit  $F(\mathbf{x}) = y$  zu messen, wenn  $\mathbf{x}$  gemäß  $w_{\mathbf{X}}(\mathbf{x})$  verteilt ist?" Die Delta-Distribution greift nun genau den  $\mathbf{x}$ -Wert und seine Wahrscheinlichkeit ab, bei dem dies zutrifft. Bei solchen Rechnungen ist die Rechenregel:

$$\delta(g(x)) = \sum_{i=1}^{n} \frac{\delta(x - x_i)}{|g'(x_i)|}$$

für die Delta-Distribution wichtig. Dabei sind  $x_i$  die *n* Nullstellen von g(x).

#### Der Zentrale Grenzwertsatz

Seien  $X_1, ..., X_N$  vollständig unabhängige Zufallsvariablen, gleicher, aber unabhängiger Wahrscheinlichkeitsdichte  $\tilde{w}$ , d.h.

$$w(x_1, x_2, \dots, x_n) = \tilde{w}(x_1) \cdot \tilde{w}(x_2) \cdot \dots \cdot \tilde{w}(x_N)$$

mit endlicher Varianz. Dann hat:

$$Y = \sum X_i$$

eine Wahrscheinlichkeitsdichte, die für $N \to \infty$  die Form einer Gauß'schen Normalverteilung:

$$W_Y(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta Y} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{y-\langle Y\rangle}{\Delta Y}\right)^2\right)$$

Dabei ist  $\langle Y \rangle = N \cdot \langle X \rangle$  und  $\Delta Y = \sqrt{N} \Delta X$ . Dadurch ergibt sie die relative Unschärfe zu:

$$\frac{\Delta Y}{\langle Y \rangle} = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{\Delta X}{\langle X \rangle} \,.$$

Dies ist genau das  $\sim 1/\sqrt{N}$ -Verhalten des Thermodynamischen Limes.

# 6.1.4 Ensemble in der klassischen Mechanik

In der klassischen Mechanik beschreiben wir ein N-Teilchen System mittels der verallgemeinerten Koordinaten  $q_i$  und Impulsen  $p_i$ , wobei im Folgenden der 3 dimensionale Raum besprochen wird - also ist z.B.  $q_i = (x_i, y_i, z_i)$  usw. Der diskutierte **Phasenraum**  $\Gamma$  ist also 6N-dimensional. Wir bezeichnen im Folgenden die Impulse und Koordinaten mit q und p ohne Vektorpfeil. Gegeben sind nun **makroskopische Informationen** über das System, wie z.B. Volumen oder Energie. Der **Mikrozustand**, also genau ein **Punkt im Phasenraum**, kann aus diesen Makroskopischen Größen nicht eindeutig festgelegt werden. Daher:

⇒ Betrachte ein sog. Gibbs'sches **Ensemble**, das den gegebenen Makrozustand repräsentiert und gewichte die verschiedenen Punkte im Phasenraum gemäß einer Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(q, p, t)$  auf diesem Phasenraum.

Bei diesem Vorgehen ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich das System im Ensemble zur Zeit t im Phasenraumelement dq dp befindet:

$$\rho(q, p, t) \underbrace{\prod_{i=1}^{3N} \mathrm{d}q_i}_{:=\mathrm{d}q} \underbrace{\prod_{i=1}^{3N} \mathrm{d}p_i}_{:=\mathrm{d}p} := \rho(q, p, t) \,\mathrm{d}\Gamma.$$

Die offene Frage ist natürlich: Welche Wahrscheinlichkeitsdichte beschreibt die gegebene physikalische Situation (Makrozustand)?

Die **Erwartungswerte** von Messgrößen bestimmt man dann entsprechend durch die Mittlung:

$$\langle A \rangle = \int_{\Gamma} \mathrm{d}\Gamma \, A(q,p,t) \, \rho(q,p,t) \, ,$$

wobe<br/>i $\Gamma$ der Phasenraum ist.

#### Bewegungsgleichung der Wahrscheinlichkeitsdichte

Für die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(q,p,t)$ lässt sich aus den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{q}_i = rac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad \dot{p}_i = -rac{\partial H}{\partial q_i}$$

eine Bewegungsgleichungen herleiten. Betrachten wir zwei Trajektorien zu gegebenen Startwerten  $q_0$  und  $p_0$  und bezeichnet sie mit  $q(t|q_0, p_0)$  und  $p(t|q_0, p_0)$ . Die Wahrscheinlichkeitsdichte zum Zeitpunkt  $t_0$  ist dann durch  $\rho(t_0, q_0, p_0) := \rho_0(q_0, p_0)$  gegeben. Dann gilt für die Wahrscheinlichkeitsdichte zum Zeitpunkt t:

$$\rho(t,q,p) = \int dq_0 dp_0 \rho_0(q_0,p_0) \,\delta(q-q(t,q_0,p_0)) \,\delta(p-p(t,q_0,p_0)) \,.$$

Dies kann man sich auf dieselbe Art und Weise, wie bei der Wahrscheinlichkeitsdichte einer Funktion, erklären: Wie hoch ist die Wahrscheinlichkeit, dass die Trajektorien  $q(t|q_0, p_0)$ und  $p(t|q_0, p_0)$  genau in die Punkte q und p laufen? Dieses hängt aber aufgrund des deterministischen Charakters der klassischen Mechanik nur von den Startwerten  $q_0$  und  $p_0$  ab. Alle "passenden" Startwerte werden dann durch die Delta-Distributionen isoliert. Bestimmt man die Zeitableitung dieser Gleichung erhält man nach einiger Rechnung die sog. Liouville-Gleichung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\sum_{i} \left[ \frac{\partial H}{\partial p_{i}} \frac{\partial \rho}{\partial q_{i}} - \frac{\partial H}{\partial q_{i}} \frac{\partial \rho}{\partial p_{i}} \right] \,.$$

In der Poisson-Klammer Notation:

$$\{f,g\} = \sum_{i} \left[ \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} \right]$$

ergibt sich also die kompakte Form:

**Liouville-Gl.:** 
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\{H, \rho\}.$$
 (6.1)

Eine alternative Formulierung betrachtet das Vektorfeld  $\mathbf{v} = (\dot{q}, \dot{p})^T$  als einen **divergenzfreien Fluss** im Phasenraum. Das Vektorfeld  $\mathbf{v}$  verhält sich also wie die Strömung eines inkompressiblen Flüssigkeit. Die Liouville Gleichung entspricht dann der **Kontinuitätsgleichung** dieses Flusses:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \left( \mathbf{v} \rho \right) = 0 \,.$$

Man kann mit der Liouville Gleichung leicht zeigen, dass die **totale Zeitableitung ent**lang einer Trajektorie des Systems verschwindet:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho(q,p,t) = 0\,.$$

Betrachtet man eine Anzahl dN an Elementen des Ensembles innerhalb eines Volumens  $d\Gamma_0$ , die sich nach der Zeit t in dem Volumen  $d\Gamma$  befinden, dann ergibt sich aus der Erhaltung der Dichte:

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\Gamma_0} = \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\Gamma} \qquad \Rightarrow \qquad \mathrm{d}\Gamma = \mathrm{d}\Gamma_0$$

Dies nennt man auch das:
**Liouville Theorem:** Unter der Zeitevolution bleibt das Phasenraumvolumen einer Schar, d.h. einer Menge von q und p, konstant.

# 6.1.5 Ensemble in der Quantenmechanik

#### **Reines Ensemble**

Wir betrachten ein System in einem "reinen", normierten Zustand  $|\psi\rangle$  eines Hilbertraumes  $\mathcal{H}$ . Der Erwartungswert eine Observablen X ist dann

$$\langle X \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi \, | X | \psi \rangle$$

Man kann dies auch durch einen auf  $|\psi\rangle$  projizierenden Operator darstellen. Diesen nennt man auch **Dichtematrix** oder statistischen Operator:

**Dichtematrix:**  $ho = \left|\psi\right\rangle \left\langle\psi\right|.$ 

Dieser ist offenbar selbstadjungiert. Den Mittelwert einer Observable X kann man dann auch durch die **Spur** von  $\rho X$  bestimmen. Seien die Zustände  $|m\rangle$  eine vollständig, orthonormale Basis des  $\mathcal{H}$ , dann ist:

Spur 
$$(\rho X) := \sum_{m} \langle m | \rho X | m \rangle = \sum_{m} \langle m | \psi \rangle \langle \psi | X | m \rangle = \langle \psi | X | \psi \rangle = \langle X \rangle.$$

Hierbei wurde die Zerlegung der 1 durch die  $|m\rangle$  verwendet und im vorletzten Schritt wurde dies zur Darstellung des Operators X in der Basis  $|m\rangle$ . Insb. gilt daher mit X = 1:

$$\operatorname{Spur}\left(\rho\right)=1\,.$$

Es gibt offenbar eine spezielle Art von Zuständen  $|\psi\rangle$ , die wir noch charakterisieren möchten:

**Reiner Zustand:** Für einen Reinen Zustand gilt 
$$\rho = \rho^2$$
 und es gilt Spur  $(\rho^2) = 1$ .

Ein Zustand ist also "rein", wenn er ein exakt bekanntes, normiertes Element des  $\mathcal{H}$  ist. Wenn sich alle Mitglieder eines Ensembles im gleichen Zustand  $|\psi\rangle$  befinden, spricht man daher auch von einem **reinen Ensemble**, also letztlich ein Ensemble mit nur einem Element.

#### **Reales Ensemble**

Betrachtet man nun den (realistischeren) Fall, dass nur der Makrozustand des Systemes bekannt ist, so müssen wir das System durch mehrere mögliche Zustände  $|\psi_i\rangle$ , die jeweils mit der Wahrscheinlichkeit  $p_i$  vorliegen beschreiben. Man kann dann nicht mehr uneingeschränkt direkt einen Zustand angeben, sondern muss komplett zur Betrachtung der

Dichtematrix übergehen. Natürlich muss die Normierungsbedingung  $\sum p_i = 1$  erfüllt sein. Der Erwartungswert einer Observablen lautet dann:

$$\langle X \rangle = \sum_{i} p_i \langle \psi_i | X | \psi_i \rangle.$$

Wir betrachten also ein **gemischtes Ensemble**. Die Zustände sollen zudem *nicht parallel* sein, also sich nicht nur um eine Phase unterscheiden. Analog zum reinen Fall können wir auch hier wieder eine **Dichtematrix (eines gemischten Zustandes)** definiert:

Allg. Dichtematrix: 
$$ho = \sum_i p_i |\psi_i 
angle \langle \psi_i |$$

und auch hier gilt damit wieder

$$\langle X \rangle = \operatorname{Spur}(\rho X) \qquad \Rightarrow \qquad \operatorname{Spur}(\rho) = 1$$

Da  $p_i \in \mathbb{R}$  ist  $\rho$  wieder selbstadjungiert. Allerdings ist im echt gemischten Fall ( $|\psi_i\rangle$  nicht parallel)  $\rho \neq \rho^2$  und daher auch Spur ( $\rho^2$ )  $\neq 1$ . Man kann allerdings zeigen:

$$\operatorname{Spur}\left(\rho^{2}\right) < 1$$
.

Man kann somit anhand der Spur von  $\rho^2$  prüfen, ob ein reiner oder ein gemischter Zustand vorliegt:

 $\operatorname{Spur}\left(\rho^{2}\right) \begin{cases} = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \operatorname{reiner Zustand} / \operatorname{Ensemble} \\ < 1 \quad \Leftrightarrow \quad \operatorname{echt gemischter Zustand} / \operatorname{Ensemble} \end{cases}.$ 

Des Weiteren ist  $\rho$  ein positiv definiter Operator. Es existiert aufgrund der Selbstadjungiertheit eine vollständig orthonormierte Basis des  $\mathcal{H}$  aus Eigenvektoren  $\{|m\rangle\}_m$  von  $\rho$ .

#### Bewegungsgleichung der Dichtematrix

Wie im klassischen Fall kann man eine Bewegungsgleichung für  $\rho$  herleiten. Angenommen  $\rho$  sei zur Zeit  $t_0$  durch  $\rho(t_0) = \sum p_i |\psi_i(t_0)\rangle \langle \psi_i(t_0)|$  gegeben. Jeder einzelne Zustand des Ensembles (bzw. eben in  $\rho$ ) entwickelt sich gemäß der Schrödingergleichung  $H|\psi_i\rangle = i\hbar\partial_t |\psi_i\rangle \Rightarrow -i\hbar\partial_t \langle \psi_i| = H \langle \psi_i|$ . *H* ist hierbei der Hamilton-Operator des Systems. Dadurch erhält man die sog. **von Neumann-Gleichung**:

**von Neumann-GI.:** 
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = [H, \rho]$$
 (6.2)

Aus der formalen Lösung der Schrödingergleichung  $|\varphi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\varphi(t_0)\rangle$  erhält man zudem direkt die Lösung:

$$\rho(t) = \hat{U}(t, t_0)\rho(t_0)\hat{U}(t, t_0)$$

Die Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  werden hier nach Konstruktion als nicht zeitabhängig betrachtet. Sie beschreiben entsprechend die Wahrscheinlichkeit, dass sich das System zu Beginn im Zustand  $|\psi_i\rangle$  befand. Unter Zyklischer Vertauschung in der Spur:

$$\operatorname{Spur}(ABC) = \operatorname{Spur}(BCA)$$

kann man den Erwartungswert einer Observablen X auch durch die Heisenbergbilder von X und  $\rho$  darstellen, wobei  $\rho^H = \rho(t_0)$  und  $X^H(t) = U^{\dagger}XU$ :

$$\langle X \rangle(t) = \operatorname{Spur}\left(\rho^H X^H(t)\right)$$
.

#### Dichtematrix eines Teilsystems

Betrachtet man ein quantenmechanisches System mit einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  und zerlegt ihn in ein Tensorprodukt  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  so wird ein beliebiger Zustand  $|\psi\rangle$  durch eine Linearkombination:

$$|\psi\rangle = \sum_{nm} C_{nm} |An\rangle \otimes |Bm\rangle = \sum_{nm} C_{nm} |An\rangle |Bm\rangle$$

beschrieben, wobei entsprechend  $|An\rangle$  eine vollständig orthonormierte Basis des  $\mathcal{H}_A$  ist (analog für  $\mathcal{H}_B$ ). Entsprechend ist hier die Dichtematrix dieses reinen Zustands definiert:

$$\rho = \sum_{n'm'n''m''} C_{n'm'} C_{n'm''} |An'\rangle \langle An''| \otimes |Bm'\rangle \langle Bm''|$$

Betrachtet man einen Operator, der z.B. nur auf dem Teilhilbertraum  $\mathcal{H}_A$  wirkt, also  $X = X_A \otimes \mathbf{1}_B$ , so ergibt sich aus der Spur:

$$\langle X \rangle = \operatorname{Spur}\left(\rho X\right) = \sum_{n} \sum_{m} \langle An | \langle Bm | (\rho(X_A \otimes \mathbf{1}_B | An \rangle | Bm \rangle)$$
$$= \sum_{n} \langle An | \underbrace{\left(\sum_{m,n'n''} C_{n'm} C_{n''m}^* | An' \rangle \langle An'' | \right)}_{:=\rho_A} X_A | An \rangle = \operatorname{Spur}\left(\rho_A X_A\right)$$

Man nennt hierbei  $\rho_A$  auch die **reduzierte Dichtematrix**. Diese kann man auch ausdrücken durch:

$$\rho_A = \operatorname{Tr}_B(\rho) := \sum_m \langle Bm | \rho | Bm \rangle$$

Anhand der obigen Struktur wird deutlich, dass  $\rho_A$  i.A. **nicht** die Dichtematrix eines **reinen Zustandes** ist. Nur in dem Fall, dass sich  $|\psi\rangle$  als Produktzustand von Anteilen aus dem Hilbertraum  $\mathcal{H}_A$  und  $\mathcal{H}_B$  in der Form  $|\psi\rangle = |\psi_A\rangle |\psi_B\rangle$  angeben lässt, ist  $\rho_A$  "rein". Man spricht auch von quantenmechanischer **Verschränkung**, wenn sich der Zustand eben nicht als direktes Produkt schreiben lässt.

**Verschränkung:** Selbst wenn das Gesamtsystem in einem reinem Zustand vorliegt, tritt bei der Reduktion auf ein Teilsystem bei Vorliegen von Verschränkung eine Unsicherheit über den Zustand in diesem Teilraum auf.

# 6.2 Gleichgewichtsensemble

Wir wollen uns im Folgenden auf die Beschreibung makroskopischer Systeme in einem Gleichgewichtszustand konzentrieren. Das bedeutet für die Dichtematrix:

Gleichgewichtszustand: 
$$\frac{\partial}{\partial t} 
ho = 0$$
 .

Sowohl im klassischen Fall ( $\{H, \rho\} = 0$ ) als auch im quantenmechanischen Fall ( $[\hat{H}, \rho] = 0$ ) bedeutet dies, dass  $\rho$  durch **Erhaltungsgrößen** charakterisiert ist. Dies bedeutet *nicht*, dass das betrachtete System komplett statisch ist.

# 6.2.1 Mikrokanonisches Ensemble

Wir betrachten ein **vollständig isoliertes System** in einem gegebenen Makrozustand im Gleichgewicht mit

# Situation im mikrokanonischen Ensemble:

- einer fixen Anzahl ${\cal N}$ aus identischen Teilchen
- einem festen Volumen V
- einer auf *makroskopischer Skala scharf* bekannten Energie.

Der letzte Punkt bedeutet, dass die Energie innerhalb eines Bereiches  $[E, E + \Delta E]$ , wobei  $\Delta E << E$  bekannt ist, wobei im Intervall durchaus viele Mikrozustände liegen können. Diese Breite gewährleistet, dass insbesondere auch in quantenmechanischen Systemen eine makroskopische Anzahl an Mikrozuständen vorhanden ist, die betrachtet werden kann. Da hier also Volumen, Teilchenzahl und Energie vorgegeben sind, nennt man das mikrokanonische Ensemble auch das EVN-Ensemble.

# Klassische Systeme

Klassisch führt dies auf eine Hamiltonfunktion H(q, p), für die gilt:  $H(q, p) \in [E, E + \Delta E]$ . Zudem soll die explizite Form von H(q, p) bereits die Bedingungen an N und V berücksichtigen. Dementsprechend sind alle Mikrozustände (q, p) erlaubt, für die H(q, p) im Energieintervall liegt. Es gibt keinen Grund bestimmte Mikrozustände stärker zu gewichten als Andere. Man nennt dies auch das Prinzip des **Least-Bias**<sup>3</sup>. Daher gilt für die

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Englisch: Bevorzugung = bias

#### Mikrokanonische Verteilungsfunktion:

$$\rho_{\rm MC} = \begin{cases} \text{const.}, & E \le H(q, p) \le E + \Delta E \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$
(6.3)

Der Wert der Konstanten ergibt sich aus der Forderung nach der Normierung der Funktion:

$$\int_{\Gamma} \mathrm{d}\Gamma \,\rho_{\mathrm{MC}} = 1$$

Das Phasenraumvolumenelement d $\Gamma$  ist aus der klassischen Mechanik nicht begründbar, sondern ergibt sich aus dem Grenzfall der Quantenstatistik:

$$d\Gamma = \frac{1}{h^{3N} N!} dq_1 ... dq_{3N} dp_1 ... dp_{3N} ,$$

wobe<br/>ihdas Plancksche Wirkungsquantum ist.

- Dabei fängt *h* die Einheiten von *q* und *p* ab. Es kann aber auch als **Phasenraum-volumen**, welches jedem Teilchen zugeordnet ist, interpretiert werden, analog zur Heisenbergschen Unschärferelation.
- Der Faktor N! kürzt die Permutationen, die aus quantenmechanischer Sicht aufgrund der **Ununterscheidbarkeit** der Teilchen zu ein und demselben Mikrozustand gehören. Diese Ununterscheidbarkeit folgt rein praktisch auch klassisch daraus, dass ja eben nicht jede Trajektorie einzeln nachverfolgt wird. Sind die Teilchen **unterscheidbar** (z.B. weil sie auf einem fixen Kristallgitter sitzen und somit anhand ihres Ortes unterschieden werden können) so **fällt dieser Faktor weg**!<sup>4</sup>

Um die Konstante zu bestimmen, betrachten wir zunächst die Anzahl der Zustände mit Energien kleiner als E:

**Phasenraumvolumen:** 
$$\bar{\Omega}(E) = \int_{\Gamma} d\Gamma \Theta(E - H(q, p)).$$

Dies nennt man auch einfach das Phasenraumvolumen. Dadurch ist

**Zustandsdichte:** 
$$D(E) = \frac{\partial \bar{\Omega}(E)}{\partial E} = \int_{\Gamma} d\Gamma \,\delta(E - H(q, p))$$
 (6.4)

entsprechend ein **Maß für die Dichte** der Mikrozustände mit Energie E und wird Zustandsdichte genannt. Aus einer Taylorentwicklung erhält man die Anzahl der Zustände im Intervall  $[E, E + \Delta E]$ :

$$\Omega(E, \Delta E) = \Omega(E + \Delta E) - \Omega(E) \approx D(E)\Delta E$$

 $<sup>^4 {\</sup>rm Man}$ nennt dies auch den Gibbs-Faktor, den J.W. Gibbs bereits vor der Entwicklung der Quantenmechanik einführte.

Aufgrund der Gleichverteilung erhält man also:

$$\rho_{\rm MC} = \begin{cases} \frac{1}{\Omega(E,\Delta E)} = \frac{1}{D(E)\Delta E}, & E \le H(q,p) \le E + \Delta E\\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$
(6.5)

Man nennt  $\Omega(E, \Delta E)$  auch die Mikrokanonische Zustandssumme.

#### Das klassische Ideale Gas

Betrachten wir ein **ideales** Gas, also ein Gas in dem die Wechselwirkungen zwischen den Molekülen für die Energiebilanz vernachlässigbar klein sind<sup>5</sup>. Die Hamiltonfunktion ist:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V_{\text{Wand}}$$

wobei  $V_{\text{Wand}}$  ein Potenzialtopf ist. Dieser Potenzialtopf führt dazu, dass die räumlichen Integrale in Integrale über das Volumen V übergehen, da die Energie außerhalb divergiert also nicht mehr im Intervall  $[E, E + \Delta E]$  liegen kann. Die Zustandsdichte kann hier durch  $\overline{\Omega}(E)$  bestimmt werden. Um die Zustandssumme zu berechnen, muss ein hochdimensionales Integral über  $\Theta(E - H(p))$  gelöst werden. Da H nur aus Quadraten von  $p_i$ 's besteht, ist dieses Integral das Volumen einer 3N dimensionalen Kugel. Allgemein gilt für das Volumen einer d-dimensionalen Kugel mit Radius R:

Vol(d-dim. Kugel) = 
$$\int d^d x \Theta \left( R - \sum_{i=1}^d x_i^2 \right) = \frac{\pi^{d/2} R^d}{\Gamma(d/2+1)}$$
.

Die Kugel im Impulsraum hat den Radius 2mE und somit erhalten wir:

$$\bar{\Omega}(E, N, V) = \frac{1}{h^{3N}N!} V^N (2mE)^{3N/2} \frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(3N/2+1)}$$

mit der

**Gamma-Funktion**:  

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty dt \, t^{z-1} e^{-t} ,$$

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) , \qquad \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi} , \qquad \Gamma(n) = (n-1)! \ n \in \mathbb{N} .$$

Wir wollen nun den

**Thermodynamischen Limes:** Wir betrachten 5ein System in dem Formal gilt:  $N, V \rightarrow \infty$  bei V/N = const gilt.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>Ganz ohne Wechselwirkungen würde sich allerdings kein Gleichgewicht einstellen!

untersuchen. Daher verwenden wir die sog. Stirling-Formel für große z:

**Stirling:**  $\Gamma(z+1) \approx z^z e^{-z} \sqrt{2\pi z}$ ,  $n! \approx n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}$ 

Damit erhält man:

$$\bar{\Omega}(E) = \exp\left[N \cdot \ln\left(\frac{V}{N} \left(\frac{4\pi mE}{2h^2 N}\right)^{3/2} e^{5/2}\right) + \mathcal{O}(\ln N)\right]$$

Im thermodynamischen Grenzfall kann man den Term  $\ln N$  gegen den in N linearen Term vernachlässigen. Damit erhält man für große N die Zustandsdichte:

$$D(E) \approx \frac{3}{2} \left(\frac{V}{N}\right)^{N} \left(\frac{4\pi m}{3h^{2}} \frac{E}{N}\right)^{3N/2} e^{5N/2} \left(\frac{E}{N}\right)^{-1}, \quad \text{für } N >> 1.$$
(6.6)

V/N ist entsprechend das **spezifische Volumen** und E/N die **spezifische Energie**. Bei einem **homogenen System** ist somit bei gegebener Energiedichte E/V auch E/N = const.. Durch expliziten Vergleich aus den Gleichungen für die Zustandsdichte und für  $\overline{\Omega}(E)$  in der Näherung (hier nicht explizit angegeben) erhält man:

$$\ln(\Omega) = \ln(D(E) \cdot \Delta E) = \ln(\bar{\Omega}(E)) + \mathcal{O}\left(\ln\left(\frac{\Delta E}{E/N}\right)\right),\,$$

sodass man insgesamt approximativ erhält:

$$\ln \Omega(E) \propto N \,.$$

Die Anzahl der Zustände in einem Intervall  $[E, E + \Delta E]$  wächst also im thermodynamischen Grenzfall exponentiell mit N und ist unabhängig von der Breite  $\Delta E$ !

#### Quantensysteme

Wir betrachten ein Quantensystem mit dem Hamiltonoperator H und den Eigenzuständen  $|n\rangle$ . Unsere zugehörige Dichtematrix lautet also im mikrokanonischen Ensemble wieder unter Annahme einer Gleichverteilung der Zustände:

$$\rho_{\rm MC} = \sum_{n} p_n |n\rangle \langle n| \qquad p_n \begin{cases} \frac{1}{\Omega(E,\Delta E)}, & E_n \in [E, E + \Delta E] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

wobei die Zustandssumme hier entsprechend einfach die Anzahl der Zustände im Energiefenster beschreibt:

$$\Omega(E, \Delta E) = \sum_{E_n \in [E, E + \Delta E]} 1$$

Dadurch ist Spur  $(\rho_{\rm MC})$  normiert. Es gilt zudem:

• Die **Zustandsdichte** lautet:

$$D(E) = \operatorname{Spur}\left(\delta(E-H)\right) = \sum_{n} \int \mathrm{d}k \,\langle n | \left(\frac{1}{2\pi} e^{ik(E-\hat{H})}\right) | n \rangle = \sum_{n} \delta(E-E_{n})$$

Wobei die Darstellung des  $\delta$ -"Operators" mittels der Fouriertransformation verwendet wurde. Es werden also die zu einem vorgegebenen E passenden Zustände abgezählt.

• Damit gilt für  $\Omega$ :

$$\bar{\Omega} = \operatorname{Spur} \left( \Theta(E - H) \right) = \sum_{n} \Theta(E - E_n)$$

Es werden also alle Zustände abgezählt, deren Energie kleiner ist als ein vorgegebenes E.

#### Zwei Niveau-System: Spin 1/2 Paramagnet

Wir betrachten eine Kette aus N Spin 1/2-Freiheitsgraden, die an ein äußeres Magnetfeld  $h_z$  gekoppelt sind. Der Hamiltonoperator lautet unter Vernachlässigung der Spin-Spin Wechselwirkungen:

$$H = -h_z \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^z, \qquad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Die Eigenzustände dieses Systems sind durch die  $2^N$  möglichen Kombinationen von up und down Einstellungen der Einzelspins gegeben. Wir bezeichnen sie mit:

$$|\sigma_1...\sigma_N\rangle$$
, mit  $\sigma_i = \pm 1$  und  $E_{\sigma_1...\sigma_N} = -h_z \sum_{i=1}^N \sigma_i$ 

Die meisten Energieeigenwerte sind natürlich hochgradig entartet. Diese Entartung ist von Interesse, da sie eben gerade die Zustandssumme und Zustandsdichte charakterisieren. Zu diesem Zwecke geben wir ein Energiefenster  $[E, E + \Delta E]$  vor, wobei  $\Delta E \sim h_z$ , sodass garantiert ist, dass eine der Eigenenergien enthält:

$$\Omega(E, \Delta E, N) = \sum_{i} \sum_{\sigma_i = \pm 1} \delta_{E, -h_z \sum_k \sigma_k}$$

Seien  $N_{\pm}$  die Anzahl der  $|\uparrow\rangle$  bzw.  $|\downarrow\rangle$ -Spins. Dann ist die Energie  $E = -h_z(N_+ - N_-)$  und die Gesamtanzahl ist natürlich  $N = N_+ + N_-$ . Dadurch erhalten wir umgeschrieben:

$$N_{\pm} = \frac{1}{2} \left( N \mp \frac{E}{h_z} \right)$$

Die Anzahl der Möglichkeiten aus den N Spins  $N_+$  ohne Wiederholungen auszusuchen lautet also:

$$\Omega(E, \Delta E, N) = \binom{N}{N_+} = \frac{N!}{N_+!N_-!}$$

Das  $\Delta E$  im Argument von  $\Omega$  lässt man häufig weg, da diese Anzahl meist (auch für andere Systeme als das ideale Gas) nicht von der tatsächlichen Breite abhängt. Für Große N liefert die Stirling-Formel:

$$\Omega(E,N) = \exp\left[-\frac{N}{2}(1-\gamma)\ln\left(\frac{1-\gamma}{2}\right) - \frac{N}{2}(1+\gamma)\ln\left(\frac{1+\gamma}{2}\right)\right]$$

wobei  $\gamma = \frac{E}{Nh_z}$  ist.

# 6.2.2 Entropie und Information

In den Beispielen haben wir die Abhängigkeit:

$$\ln\Omega\propto N$$

gesehen. Wir haben also eine Größe gefunden, die linear mit N wächst und daher praktisch zu verwenden ist. Wir charakterisieren daher ein Maß für die Mächtigkeit der mikrokanonischen Zustandssumme als:

**Entropie:** 
$$S = k \ln \Omega$$

Die Wahl der Konstanten wird später klarer, es handelt sich um die **Boltzmann-Konstante**  $(k_B) = k = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$ . Die Entropie ist also ein Maß für die **Anzahl** der möglichen Mikrozustände in einem System oder auch für die **Unsicherheit** bei der Zuordnung von Mikrozuständen zu einem gegebenen Makrozustand<sup>6</sup>. Die Frage ist nun, wie lässt sich diese Größe für *andere Ensemble* definieren?

### Entropie für quantenmechanische Ensemble

Wir betrachten beispielhaft ein Quantensystem mit der Dichtematrix  $\rho$ . Als Maß für unsere Unsicherheit bezüglich des Systemzustandes, oder auch den Mangel an Information über das System sollte eine allgemeine Form für die Entropie die folgenden Eigenschaften haben:

- Semi-Positivität:  $S(\rho) \ge 0$  für alle  $\rho$
- Minimum:  $S(\rho) = 0 \iff \rho$  reiner Zustand
- Maximum: Die erlaubten Zustände sollen Orthogonal sein und spannen einen  $\Omega$ dimensionalen Unterraum auf, dann ist *S* maximal, falls all diese Zustände das gleiche Gewicht haben mit  $S = k \ln \Omega$ .
- (Sub-)Additivität: Besteht das System aus zwei Subsystemen A und B, so gilt falls es keine Wechselwirkungen zwischen A und B gibt:

$$\rho = \rho_A \otimes \rho_B \quad \Leftrightarrow \quad S(\rho) = S(\rho_A) + S(\rho_B)$$

Allgemein gilt:

$$S(\operatorname{Tr}_B \rho) + S(\operatorname{Tr}_A \rho) \ge S(\rho)$$

• Konkavität: Die Entropie ist konkav bei der Kombination zweier Dichtematrizen eines gegebenen Systems. Verallgemeinert wird dies zu:

$$S\left(\sum_{j}\lambda_{j}\rho_{j}\right)\geq\sum_{j}\lambda_{j}S(\rho_{j})$$

mit  $\sum_{j} \lambda_j = 1$ .

<sup>6</sup>Ist  $\Omega = 1$ , so ist nur 1 Mikrozustand erlaubt, also S = 0.

Der diesen Bedingungen genügende Ausdruck für die Entropie wird auch von-Neumann-Entropie genannt und lautet:

**Von-Neumann-Entropie:** 
$$S(\rho) = -k \operatorname{Tr}[\rho \ln \rho] = -k \sum_{m} p_m \ln p_m$$

Tatsächlich liefert dies für das Mikrokanonische Ensemble auch den bekannten Ausdruck von zuvor. Für alle Ensemble in denen die Energien in einem vorgegebenen Fenster  $[E, E + \Delta E]$  liegen liefert das **Mikrokanonische Ensemble** die **höchste Entropie**.

**Prinzip der maximalen statistischen Entropie:** Allgemein wählt man aus allen statistischen Verteilungen, die zu einem gegebenen Makrozustand passen, diejenige Vereitlung mit der größten Entropie.

Man nennt dies auch das Prinzip des minimalen Vorurteils (least bias, **Jayne'sches Prinzip**). Tatsächlich kann man die gesamte Ensembletheorie aus der Anwendung dieses Variationsprinzipes herleiten.

Eine nützliche Abschätzung, die auch in Rechnungen zur Von-Neumann-Entropie benötigt wird ist, dass für zwei beliebige Dichtematrizen gilt:

**Lemma von Klein:** 
$$\operatorname{Tr} \left( \rho_1 (\ln \rho_2 - \ln \rho_1) \right) \leq 0.$$

#### Allgemeine Entropie für klassische Ensemble

Für klassische Systeme ist die von Neumann Entropie durch das Integral:

$$S(\rho) = -k \int_{\Gamma} \mathrm{d}\Gamma \rho \ln(\rho)$$

gegeben. Für ein mikrokanonisches Ensemble erhält man direkt den bekannten Ausdruck, da  $\int d\Gamma \rho = 1$  ist.

# 6.2.3 Ergodizität

Betrachten wir ein System, dass während seiner Zeitentwicklung im Gleichgewicht die Kurve (q(t), p(t)) durchläuft. Intuitiv würden wir den Mittelwert einer Observablen dann ausdrücken durch:

$$\bar{A} = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0 + T} \mathrm{d}t \, A(q(t), p(t))$$

Ein System, in dem dieser zeitliche Mittelwert auch dem Ensemblemittelwert  $\langle A \rangle$  entspricht, nennt man:

 $\bar{A} = \langle A \rangle \ \forall \ t_0 \quad \Leftrightarrow \quad \text{ergodisches System.}$ 

Bei einem ergodischen System kommt die Trajektorie (q(t), p(t)) jedem Punkt des Phasenraumes auf der passenden Energieschale zu  $(q(t_0), p(t_0))$ beliebig nahe. Eine weitere Charakterisierung von Modellsystemen sind die sog. **mischenden Systeme**. Ein System, welches sich zu Beginn in einem Phasenraumvolumen  $\Sigma_0$  zu einem Energiefenster  $[E_1, E_2]$ befindet, kann sich aufgrund des Liouvillschen Theorems nicht vergrößern, kann aber **zerfasert** werden. Bei einem mischenden System sorgt dies dafür, dass jeder Punkt des Phasenraumes zum zugehörigen Energiefenster durch die Zeitentwicklung des Ausgangsvolumens  $\Sigma_0$  beliebig angenähert werden kann, ohne dass Dabei das Phasenraumvolumen vergrößert wird. Ein mischendes System ist immer auch ergodisch, umgekehrt gilt dies nicht.

Die Ergodizität eines Systems kann bei Änderung der äußeren Umstände gebrochen werden (Beispiel: Ferromagnet wird von hoher Temperatur heruntergekühlt), dies geht z.B. mit einer sog. **spontanen Symmetriebrechung** einher.

# 6.2.4 Temperatur und Gleichgewicht

Wir stellen uns ein vollständig isoliertes System vor, z.B. ein Gas in einem Container. In diesen Container setzten wir eine Trennwand, die das System in 2 Teilsysteme A und B aufteilt. Diese Trennwand lässt nur den Transfer von Energie zu. Die Hamiltonfunktion ist dann durch:

$$H = H_A + H_B + H'$$

gegeben, wobei H' den Energieaustausch beschreibt, der hier als klein angenommen wird, aber nötig ist, um ein Gleichgewicht zu erreichen. Sei E die Gesamtenergie und  $\Omega_{AB}(E, \Delta E)$ die mikrokanonische Zustandssumme des Gesamtsystems. Die Wahrscheinlichkeit, dass das System A eine Energie in  $[E_A, E_A + \Delta E]$  hat, ist dann gegeben durch (Gesetz bedingter Wahrscheinlichkeiten):

$$P(E_A) = \frac{\Omega_A(E_A, \Delta E)\Omega_B(E - E_A, \Delta E)}{\Omega_{AB}}$$

wobei  $\Omega_{H'}$  als klein vernachlässigt wird. Das Maximum von  $P(E_A)$  liege bei  $\tilde{E}_A$ . Man erhält hieraus durch Umschreiben die Gleichung:

$$\frac{\partial S_A}{\partial E_A}(\tilde{E}_A) = \frac{\partial S_B}{\partial E_B}(\tilde{E}_B)$$

wobei  $\tilde{E}_B = E - \tilde{E}_A$ . Man führt hier eine Neue Größe ein:

**Temperatur:** 
$$\frac{1}{T} := \frac{\partial S}{\partial E}(E)$$

Später wird sich zeigen, dass diese Temperatur im Wesentlichen mit unserer empirisch bekannten überein stimmt. Oft wird auch der Parameter

$$\beta = \frac{1}{kT}$$

verwendet. Im wahrscheinlichsten Zustand ist also

$$T_A = T_B$$
.

Dies entspricht der Intuitiven Vorstellung, die man von Temperatur hat. Es zeigt sich, dass Systeme im sog. "thermischen Kontakt" (Energieaustausch ohne Arbeit) ihre Temperatur ausgleichen. Die Entropie wirkt hier als treibende Größe.

Die Schärfe der Energieverteilung  $P(E_A)$  ergibt sich aus dem Zentralen Grenzwertsatz über die Energie der einzelnen Teilchen:

$$\frac{\Delta E}{\langle E \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$$

Sie ist für makroskopische Systeme also sehr scharf. Für allgemeine Observablen erhält man

$$\frac{\Delta A}{\langle A \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{V}}$$

# 6.2.5 Äußere Parameter und Druck

Als einen äußeren Parameter bezeichnen wir eine Größe, von dem die Hamiltonfunktion abhängt, sodass auch das Phasenraumvolumen und weitere Größen von diesem Parameter abhängen:

$$\bar{\Omega}(E,a) = \int \mathrm{d}\Gamma\Theta(E-H(a))$$

Der mittlere Wert einer Größe A bei der Energie E lässt sich durch das Integral:

$$\langle A \rangle = \frac{\int \mathrm{d}\Gamma \delta(E-H) A}{\int \mathrm{d}\Gamma \delta(E-H)} = \frac{1}{D(E)} \int \mathrm{d}\Gamma \delta(E-H(a)) A.$$

Unter Verwendung der Kettenregel zum bilden der Differenziale erhält man aus der Gleichung für das Phasenraumvolumen eine Gleichung für die Entropie:

$$dS = \frac{1}{T} \left( dE - \left\langle \frac{\partial H}{\partial a} \right\rangle da \right)$$
(6.7)

#### Druck und Volumen

Aus dem Kraftmittelwert von N Teilchen auf einen Kolben erhält man eine solche Form auch für den Druck:

**Druck:** 
$$P = -\left\langle \frac{\partial H}{\partial V} \right\rangle$$
.

Ist also das Volumen der äußere Parameter so erhalten wir:

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_V, \qquad \frac{P}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_E.$$

Der Index symbolisiert, dass die Größe im Index konstant gehalten werden soll. Umgeschrieben wird (6.7) im Falle von a = V zu:

$$\mathrm{d}E = \underbrace{T \,\mathrm{d}S}_{\mathrm{W\ddot{a}rmemenge}} \underbrace{-P \,\mathrm{d}V}_{\mathrm{Arbeit}} \,.$$

Man erhält also zwei typische Arten die Energie des Systems zu ändern, und zwar Wärme und Arbeit.

Betrachten wir erneut ein System wie zu Beginn von Abschnitt 6.2.4, nun allerdings mit Variablen Teilvolumen  $V = V_A + V_B$ . Durch eine Ähnliche Rechnung erhält man in diesem Falle für das Gleichgewicht (also die wahrscheinlichsten Werte für  $P(E_A, V_A)$ ):

$$T_A = T_B \,, \qquad P_A = P_B \,.$$

Im Gleichgewicht hat ein solches System also **gleichen Druck** und **gleiche Temperatur**, was der Intuition entspricht.

#### Chemisches Potenzial und Teilchenzahl

Ein weiterer äußerer Parameter ist die Teilchenzahl N. Entsprechend hat das Vollständige Differenzial von S einen weiteren Term:

$$dS = \frac{1}{T} dE + \frac{P}{T} dV - \frac{\mu}{T} dN$$
(6.8)

wobei man definiert hat:

$$\frac{\mu}{T} = -\left(\frac{\partial S}{\partial N}\right)_{E,V} \,.$$

 $\mu$  nennt man auch das **Chemische Potenzial**. Es gibt die relative Änderung der Anzahl von Zuständen bei der Änderung der Teilchenzahl an. Umgeschrieben wieder auf das Energiedifferenzial gibt dies einen Term  $+\mu \, dN$ , der also die Energie charakterisiert, die zu einer Teilchenzahländerung nötig ist. Will man Teilchen ins System hinzufügen, muss mal also Energie aufwenden.

#### **Ideales Gas**

Aus den bereits bestimmten Gleichungen für  $\overline{\Omega}$  usw. können wir nach diesem Formalismus aus der Entropie die **kalorische Zustandsgleichung** herleiten:

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{V,N} \qquad \Leftrightarrow \qquad E = \frac{3}{2}NkT$$

also die bekannte Gleichung mit der Zahl f = 3N an Freiheitsgraden. Analog ergibt sich die Ideale Gas Gleichung (auch thermische Zustandsgleichung):

$$\frac{P}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{E,N} \qquad \Leftrightarrow \qquad PV = NkT$$

# 6.2.6 Das Kanonische Ensemble

Wir wollen nun Systeme betrachten, die anders als beim mikrokanonischen Ensemble, mit ihrer Umgebung wechselwirken. Dazu betrachten wir als Erstes in einem Gedankenexperiment ein System A mit einer "Umgebung" B. Das System und die Umgebung sind gemeinsam nach außen isoliert. Die Umgebung B soll in dem Sinne größer sein als A, dass die Energiefluktuationen zwischen A und B aus Sicht von B sehr klein sind. Man bezeichnet daher B auch als **Wärmebad**. Ein solches Wärmebad könnte z.B. die Umgebungsluft sein. Dieses Wärmebad **gibt die Temperatur vor**, anders als beim mikrokanonischen Ensemble, wo die Energie vorgegeben ist. Man bezeichnet daher das kanonische Ensemble auch als TVN-Ensemble.

#### Die kanonische Dichtematrix

Wir betrachten den Hamiltonoperator des Gesamtsystems:

$$H = H_A + H_B + H' \approx H_A + H_B$$

mit einer kleinen Wechselwirkung H', die ein Gleichgewicht ermöglicht. Die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilsystem A im Zustand  $|An\rangle$  mit Eigenenergie  $E_{An}$  ist, erhalten wir aus dem mikrokanonischen Ensemble zu:

$$P(An) = \frac{\Omega_B(E - E_{An}, \Delta E)}{\Omega_{AB}(E, \Delta E)}$$

Aus einer Taylorentwicklung erhalten wir:

$$\ln \Omega_B(E - E_A, \Delta E) \approx \ln \Omega_B(\tilde{E}_B, \Delta E) + \frac{\tilde{E}_A - E_{An}}{kT}$$

wobei  $\tilde{E}_A$  die wahrscheinlichste Energie des Systemes A ist. T benötigt hier keinen Index, da A und B im Gleichgewicht dieselbe Temperatur haben. Also erhält man insgesamt durch einsetzten in die obige Gleichung für P(an):

Kanonische Dichtematrix: 
$$\rho_C = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-E_{An}/kT} |An\rangle \langle An| = \frac{1}{Z} e^{-H_A/kT}$$

wobei Z eine konstante ist, die nicht von der Energie  $E_{An}$  abhängt:

$$Z = \frac{\Omega_{AN}(E, \Delta E)}{\Omega_B(\tilde{E}_B, \Delta E)} e^{-\tilde{E}_A/kT}$$

Die Normierungskonstante kann man alleine aus der Normierung der P(An) bestimmen:

Kanonische Zustandssumme: 
$$Z(T) = \sum_{n} e^{-E_{An}/kT} = \text{Tr}_{A}e^{-H_{A}/kT}$$

Man nennt den Faktor

$$e^{-E_{An}/kT} = e^{-\beta E_{An}}$$

auch den Boltzmannfaktor. In einer klassischen Betrachtung erhält man:

$$\rho_C(q_A, p_A) = \frac{1}{Z} e^{-H_A(q_A, p_A)/kT}, \qquad Z = \int d\Gamma e^{-H_A(q_A, p_A)/kT}.$$

Da das Wärmebad nicht von Interesse ist, wird der Index A der Hamiltonfunktion im Folgenden nicht mehr mit geschrieben.

#### Entropie im kanonischen Ensemble

Wir betrachten nun die Entropie im kanonischen Ensemble. Anhand der kanonischen Dichtematrix kann man sich leicht klarmachen, dass gilt:

$$S_C = -k \operatorname{Tr}(\rho_C \ln \rho_C) = \frac{1}{T} \langle H \rangle + k \ln Z$$
(6.9)

Dabei ist  $\langle H \rangle = \overline{E} = \text{Tr}(\rho_C H)$  die **mittlere Energie** des betrachteten Systems (A). Man kann zeigen:

Die kanonische Dichtematrix, bzw. das kanonische Ensemble hat die größte von Neumann-Entropie, aller Ensemble mit der selben mittleren Energie  $\langle H \rangle$ .

Man kann auch umgekehrt aus dieser Forderung mittels einer Variation die kanonische Dichtematrix herleiten (Jaynes'sches Prinzip).

#### Äquivalenz zum mikrokanonischen Ensemble

Man kann zeigen, dass für die Energie im kanonischen Ensemble im thermodynamischen Limes (große N, V) gilt:

$$\langle H \rangle \propto N \,, \qquad {\Delta H \over \langle H \rangle} \propto {1 \over \sqrt{N}}$$

Dabei kann man zeigen, dass gilt:

$$(\Delta H)^2 = -\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial \beta} = kT^2 \frac{\partial E}{\partial T} := kT^2 C_V \,,$$

mit der Wärmekapazität  $C_V$ , die für gewöhnlich proportional zur Teilchenzahl ist. Die Energieverteilung wird also im thermodynamischen Limes scharf. Dadurch ist im Limes also die Vorgabe einer Temperatur äquivalent zur Vorgabe einer passenden Energie. Die Vorhersagen von mikrokanonischer und kanonischer Betrachtung werden also identisch.

#### Thermodynamische Größen

Wie wir im mikrokanonischen Ensemble bereits gesehen haben kann man über die Entropie viele (makroskopische) thermodynamische Größen berechnen. In Analogie dazu betrachten wir im kanonischen Ensemble die freie Energie:

**Freie Energie:**  $F = -kT \ln Z$ 

Diese hängt nach (6.9) mit der Entropie zusammen:

$$F = \bar{E} - TS_C.$$
(6.10)

Tatsächlich kann man für die Innere Energie mittels der Kettenregel zeigen:

$$\bar{E} = \langle H \rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T}\right)_{V,N}.$$
(6.11)

Mithilfe dieser Gleichungen erhält man zusätzlich durch immer weitere Verwendung der Ableitungsregeln:

$$S_C = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N}, \quad \Rightarrow \quad P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N}.$$

Insgesamt erhält man durch einen Vergleich mit dem Totalen Differenzial der Entropie im mikrokanonischen Ensemble (6.8):

$$\mathrm{d}F = -S_C \,\mathrm{d}T - P \,\mathrm{d}V + \mu \,\mathrm{d}N \,.$$

und mit (6.10):

$$\mathrm{d}\bar{E} = T\,\mathrm{d}S_C - P\,\mathrm{d}V + \mu\,\mathrm{d}N\,.$$

### 6.2.7 Virialtheorem und Gleichverteilungssatz

Wir betrachten ein **klassisches** Vielteilchensystem mit kanonischen Variablen  $q = (q_1, ..., q_{3N})$ und  $p = (p_1, ..., p_{3N})$  und der Hamiltonfunktion:

$$H = H_{\rm kin}(p) + V(q)$$

Wir bezeichnen eine beliebige Koordinate aus dem 6N-Tupel (q, p) als  $\gamma_i$ . Mittels der klassischen Version des kanonischen Ensembles kann man unter Verwendung partieller Integration, der Kettenregel und der Normierbarkeit (Randterme verschwinden) zeigen:

$$\left\langle \gamma_i \frac{\partial H}{\partial \gamma_k} \right\rangle = k T \delta_{ik} \,. \tag{6.12}$$

Für den Fall, dass  $\gamma_i$  und  $\gamma_j$  Koordinaten (nicht Impulse) sind erhält man das:

**Virialtheorem:** 
$$\left\langle \sum_{i=1}^{3N} q_i \frac{\partial V}{\partial q_i} \right\rangle = \left\langle -\sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{F}_i \right\rangle = 3NkT$$

Dabei nennt man den Ausdruck im Mittelwert auch Virial. Betrachten wir ein Potenzial, welches quadratisch in den Koordinaten  $q_i$  ist, in der Form, dass:

$$V = \sum_{i,j=1}^{3N} b_{ij} q_i q_j \quad \Rightarrow \quad \sum_{i=1}^{3N} q_i \frac{\partial V}{\partial q_i} = 2V.$$

Dann folgt aus dem Virialtheorem, dass  $\langle V \rangle = 3NkT/2$ . Allgemein gilt, da die kinetische Energie im klassischen Fall so gut wie immer quadratisch in den Impulsen ist, entsprechend der:

**Gleichverteilungssatz:** Jede Variable (Freiheitsgrad) eines Systems, die quadratisch in dessen Hamiltonfunktion eingeht, trägt **klassisch** kT/2 zur mittleren Energie bei.

Dies gilt da bei quadratisch eingehenden Größen nach (6.12) gilt:

$$\left\langle \gamma_i \frac{\partial H}{\partial \gamma_i} \right\rangle = \left\langle 2H_i \right\rangle \,.$$

Tatsächlich gilt auch für nicht harmonische Potenziale:

$$\left\langle \sum_{i=1}^{N} \mathbf{x}_{i} \cdot \mathbf{F}_{i} \right\rangle = -2 \langle H_{\mathrm{kin}} \rangle.$$

# 6.2.8 Großkanonisches Ensemble

Wir betrachten erneut zwei Untersysteme, die hier aber sowohl Energie als auch Teilchen austauschen können. Das Gesamtsystem sei wieder vollständig isoliert, sodass die Gesamtenergie und Gesamtteilchenzahl konstant sind. Analog zu den Betrachtungen des Kanonischen Ensembles u.Ä. ist die Wahrscheinlichkeit, dass im System A die Energie  $E_A$ , die Teilchenzahl  $N_A$  und das Volumen  $V_A$  vorliegt durch:

$$P(E_A, \Delta E, N_A, V_A) = \frac{\Omega_A(E_A, \Delta E, N_A, V_A) \,\Omega_B(E - E_A, \Delta E, N - N_A, V_B)}{\Omega(E, \Delta E, N, V)}$$

Dies führt auf die Gleichgewichtsbedingungen:

$$T_A = T_B, \qquad \mu_A = \mu_B, \qquad P_A = P_B.$$

Man nennt daher das Großkanonische Ensemble auch TPV-Ensemble.

#### Großkanonische Dichtematrix

Wir betrachten nun wieder den Fall, dass das Untersystem B bezüglich A ein Wärmebad und ein Teilchenreservoir darstellt, also dass Fluktuationen für B relativ gesehen sehr klein sind. Durch Betrachten der Wahrscheinlichsten Werte für  $E_B$  und  $N_B$  und Entwicklung um diese ergibt sich analog zum kanonischen Ensemble die Dichtematrix des Großkanonischen Ensembles. Dabei ist der Hilbertraum des Systems A die direkte Summe der Einzelräume für verschiedene Teilchenanzahlen  $N_A$  in System A:

$$\mathcal{H}_A = \bigoplus_{k=0}^N \mathcal{H}_{N_A=k} \, .$$

Dichtematrix des Großkanonischen Ensembles:

$$\rho_G = \frac{1}{Z_G} \exp\left(-\frac{E_{An} - \mu N_A}{kT}\right) \left|N_A An\right\rangle \left\langle N_A An\right| = \frac{1}{Z_G} \exp\left(-\frac{H_A - \mu \hat{N}_A}{kT}\right)$$

mit dem Teilchenzahloperator  $\hat{N}_A$  und der Großkanonischen Zustandssumme:

$$Z_G = \operatorname{Spur}\left(\exp\left(-\frac{H_A - \mu N_A}{kT}\right)\right)$$

Die großkanonische Zustandssumme kann man durch die kanonische Zustandssumme für  $N_A$  Teilchen ausdrücken:

$$Z_G = \sum_{N_A} e^{\mu N_A/kT} Z(N_A)$$

Dabei wirkt der Teilchenzahloperator in einem Unterraum mit fixer Teilchenzahl  $\mathcal{H}_{N_A=n}$  als  $n \cdot \mathbf{1}$ . Im klassischen Limes ergibt sich wieder, wie im kanonischen Fall:

$$\rho_G(N_A, q_A, p_A) = \frac{1}{Z_G} \exp\left(-\frac{H_A(q_A, p_A) - \mu N_A}{kT}\right)$$

 $\operatorname{mit}$ 

$$Z_G = \sum_{N_A} \int \frac{\mathrm{d}q_A \,\mathrm{d}p_A}{h^{3N_A} N_A!} e \exp\left(-\frac{H_A(q_A, p_A) - \mu N_A}{kT}\right) = \sum_{N_A} Z(N_A) e^{\mu N_A/kT}.$$

Man nennt  $e^{\beta\mu} := z$  auch die Fugazität.

#### Entropie im großkanonischen Ensemble

Die Entropie ist wieder die von Neumann Entropie, mit:

$$S_G = -k \operatorname{Spur} \left( \rho_G \ln \rho_G \right) = \frac{1}{T} \left( \overline{E} - \mu \overline{N} \right) + k \ln Z_G \,,$$

mit  $\bar{E} = \langle H \rangle$  und  $\bar{N} = \langle \hat{N} \rangle$ . Wir lassen jetzt den Index A weg, da wir uns ab jetzt nur noch für das System A interessieren. Man kann die großkanonische Zustandssummen, wie die kanonische Zustandssumme aus dem Jayneschen Prinzip durch ein Variationsprinzip, hier aber mit den Nebenbedingungen vorgegebener  $\langle H \rangle$  und  $\langle \hat{N} \rangle$  herleiten. Dementsprechend kann man natürlich auch zeigen, dass die Entropie für nicht scharfe Energie und Teilchenzahl durch  $\rho_G$  maximiert wird.

#### Thermodynamische Größen

Analog zum Vorgehen im kanonischen Ensemble definieren wir für das Großkanonische Ensemble das sog. Großkanonische Potenzial (engl.: grand potential):

$$\phi(T,\mu,V) := -kT \ln Z_G = \bar{E} - TS_G - \mu \bar{N}.$$
(6.13)

Durch Betrachtung der Ableitungen erhält man wieder eine Beziehung zwischen  $\phi$  und den Thermodynamischen Größen:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial T}\right)_{V,\mu} = -S_G, \qquad \left(\frac{\partial\phi}{\partial V}\right)_{T,\mu} = -P, \qquad \left(\frac{\partial\phi}{\partial\mu}\right)_{T,V} = -\bar{N}.$$

Dadurch wird das totale Differenzial von  $\phi$  zu:

$$\mathrm{d}\phi = -S_G \,\mathrm{d}T - P \,\mathrm{d}V - \bar{N} \,\mathrm{d}\mu \,.$$

Aus (6.13) erhält man aber (mit Produktregel) ein weiteres totales Differenzial und durch Vergleich der beiden erhält man:

$$\mathrm{d}\bar{E} = T\,\mathrm{d}S_G - P\,\mathrm{d}V + \mu\,\mathrm{d}\bar{N}\,,$$

wobei man  $\mu d\bar{N}$  auch die **chemische Arbeit** nennt.

### Äquivalenz der Ensemble

Im Thermodynamischen Limes - also für große Teilchenzahlen - wird das großkanonische Ensemble äquivalent zum kanonischen Ensemble (also auch zum mikrokanonischen). Dies verdeutlicht man sich wieder anhand der Flunktuationen. Die Teilchenfluktuation kann man herleiten zu:

$$\left(\frac{\Delta N}{\bar{N}}\right)^2 = -\frac{kT}{V^2} \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_{\mu,T}$$

Für Gleichgewichtssysteme ist diese Volumenänderung tendenziell klein und mit großem V wird die Fluktuation klein.

Für die Erwartungswerte von Energie und Teilchenzahl kann man leicht durch Betrachtung der unabhängigen Variablen  $\alpha$  und  $\beta$ :

$$\tilde{Z}_G(\beta, \alpha) := \operatorname{Spur}\left(e^{-\beta H - \alpha \hat{N}}\right) \quad \operatorname{mit} \quad \alpha = -\frac{\mu}{kT}, \quad \beta = \frac{1}{kT}$$

die folgenden Gleichungen bestimmen:

$$\bar{E}(\beta, \alpha) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \tilde{Z}_G, \qquad \bar{N}(\beta, \alpha) = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \tilde{Z}_G,$$

Bei der Transformation dieser Ableitungen von  $(\alpha, \beta)$  nach  $(T, \mu)$  muss dann aber die Kettenregel berücksichtigt werden.

#### Ensemble mikrokanonisch kanonisch großkanonisch phys. Situation vollständig isoliert an WB gekoppelt an WB und TR gek. unabh. Variablen E, V, NT, V, N $T, V, \mu$ $e^{-(H-\mu \hat{N})/kT}$ -H/kT $\Theta(H-E)\Theta(E+\Delta E-H)$ Dichtematrix $\overline{Z(T,V,N)}$ $\Omega(E, \Delta E, N, V)$ $Z_G(T,V,\mu)$ $Z_G = \operatorname{Spur}\left(e^{-\beta(H-\mu\hat{N})}\right)$ $Z = \operatorname{Spur}\left(e^{-\beta H}\right)$ Normierung $\Omega = \operatorname{Spur}\left(\Theta(H \in I_{\Delta E})\right)$ $F = -kT\ln Z$ thermodyn. Fkt. $S = k \ln \Omega$ $\phi = -kT\ln Z_G$

# 6.2.9 Gegenüberstellung der Ensemble

Tabelle 6.1: TR = Teilchenreservoir, WB = Wärmebad,  $I_{\Delta E}$  ist das vorgegebene Energieintervall  $[E, E + \Delta E]$ 

# 6.3 Thermodynamik

Die betrachtete Ensembletheorie führt auf den Kalkül der Thermodynamik. Mit ihr lässt sich im praktischen Gebrauch deutlich einfacher rechnen.

# 6.3.1 Der Nullte Hauptsatz der Thermodynamik

Der "nullte" Hauptsatz der Thermodynamik ist die historische Vorgehensweise eine Temperatur zur Charakterisierung von Gleichgewichtszuständen zu verwenden. Man nennt dies auch eine Äquivalenzrelation. Die Temperatur wird als transitive Größe eingeführt:

$$T_A = T_B \land T_B = T_C \quad \Rightarrow \quad T_A = T_C$$

Dies ist das Temperaturkonzept. Die praktischste Formulierung lautet:

**Nullter Hauptsatz:** Ist ein System mit Temperatur  $T_A$  im Gleichgewicht mit zwei Systemen der Temperaturen  $T_B$  und  $T_C$ , dann sind auch die Systeme mit  $T_B$  und  $T_C$ miteinander im Gleichgewicht.

# 6.3.2 Der Erste Hauptsatz der Thermodynamik

Wir haben bereits das totale Differenzial der Entropie (6.8) kennengelernt.

$$\mathrm{d}S = \frac{1}{T}\mathrm{d}E + \frac{P}{T}\mathrm{d}V - \frac{\mu}{T}\mathrm{d}N\,.$$

Die Entropie hängt hierbei nur von dem Zustand, nicht von der Art der Übergänge zwischen den Zuständen ab. Solche Funktionen nennt man auch Zustandsfunktionen oder Zustandsvariablen.

**Zustandsfunktionen** S, E, N, usw. hängen nicht von der Art eines Zustandsüberganges ab.

Somit sind T, P und  $\mu$  auch Zustandsfunktionen, da man sie ja durch Ableitungen der Entropie erhält. Durch Ausdrücken der Energie E(S, V, N) durch die Entropie und umstellen des Differenzials ist:

$$dE = \underbrace{TdS}_{\text{Wärme }\delta Q} + \underbrace{(-PdV)}_{\text{mech. Arbeit }\delta W} + \underbrace{\mu dN}_{\text{chem. Arbeit }\delta W_{\text{chem.}}}$$
(6.14)

Dabei verwendet man das  $\delta$ -Symbol um zu verdeutlichen, dass es sich um die Zufuhr einer kleinen Menge Arbeit/Wärme handelt und nicht um das Differenzial einer Zustandsfunktion. Für **benachbarte Gleichgewichtsprozesse** ergeben sich die Änderungen der Zustandsgrößen durch Betrachtung von  $\delta Q$ ,  $\delta W$  und  $\delta W_{\text{chem}}$ .

**Erster Hauptsatz:** Die innere Energie *E* ist eine Zustandsfunktion mit:

$$\Delta E = Q + W + W_{\text{chem.}}$$

Wobei Wärme und Arbeit nur Überträger der Energie und keine Zustandsfunktionen sind und daher auch nicht mit einem " $\Delta$ " gekennzeichnet sind).

Dieser Hauptsatz beschreibt auch die Unmöglichkeit eines Perpetuum Mobiles erster Art (zyklisch arbeitend), da nach dem Durchlauf von einem Zyklus dieselbe innere Energie vorliegen muss.

### 6.3.3 Statistische Bedeutung der Wärme

In den mikroskopischen Beschreibungen ist "Wärme" Q als solche nicht aufgetreten. Eine Zustandsfunktion ist Wärme ebenfalls nicht. Aber was ist Wärme dann? Um dieser Frage auf den Grund zu gehen, betrachtet man am einfachsten ein System bei fixer Teilchenzahl im kanonischen Ensemble. Es gilt:

$$dE = \operatorname{Spur} \left( H \, \mathrm{d}\rho + \rho \, \mathrm{d}H \right) \,.$$

Die Änderung des Hamiltonoperators kann z.B. durch Änderung von N oder V erfolgen. Die Änderung von  $\rho$  wir durch T erzeugt. Für die Entropie findet man analog:

$$\mathrm{d}S = -k\mathrm{Spur}\left(\ln\rho\,\mathrm{d}\rho\right)$$

wobei Spur  $(d\rho) = 0$ , wegen Spur  $(\rho) =$ Spur  $(\rho + d\rho) = 1$ , da die Normierung erhalten bleiben muss. Setzt man  $\rho = e^{-\beta H}/Z$  ein und variiert einen Parameter *a* in *H* (z.B. das Volumen), sodass:

$$\mathrm{d}H = \frac{\partial H}{\partial a} \,\mathrm{d}a$$

dann erhält man:

$$\mathrm{d}E = T\mathrm{d}S + \left\langle \frac{\partial H}{\partial a} \right\rangle \mathrm{d}a$$

Die Wärmemenge entspricht also einer Änderung Wahrscheinlichkeiten, nicht der Energieniveaus. Eine Wärmezufuhr erhöht die Wahrscheinlichkeit der Besetzung von Zuständen höherer Energie. Die Energiezufuhr durch Arbeit ändert die Energieniveaus und nicht die Entropie, wie man durch die von Neumann Gleichung mittels i $\hbar d\rho = [\rho, H] dt$ zeigen kann. Man erkennt also hier, dass es bei einer Zustandsänderung auf den Typ des Prozesses ankommt.

# 6.3.4 Thermodynamische Prozesse

Wir wollen nun Prozesse betrachten, deren Anfangs- und Endzustände im **thermodynamischen Gleichgewicht** sind. Stimmen Anfangs- und Endzustand überein, so liegt ein zyklischer Prozess / **Kreisprozess** vor.

### Intensive und Extensive Größen

Insbesondere werden wir **homogene** Systeme betrachten. In solchen Systemen skalieren Energie, Volumen und Teilchenzahl alle identisch mit einem Skalenparameter  $\lambda$ , s.d.:

$$E \to \lambda E$$
,  $N \to \lambda N$ ,  $V \to \lambda V$ ,

wobei dann für die Entropie aufgrund ihrer Additivität sofort folgt:

$$S(\lambda E, \lambda V, \lambda N) = \lambda S(E, V, N)$$
.

Solche Größen bezeichnet man als extensive Größen.

**Extensive und Intensive Größen:** Größen die linear mit der Systemgröße skalieren werden extensiv genannt (E, V, N, ...). Größen, die unabhängig von der Systemgröße sind, werden intensiv genannt  $(\mu, T, P, ...)$ .

Aus der Extensivität der Entropie kann man durch Bilden des totalen Differenzials nach  $\lambda$  und anschließendes Betrachten von  $\lambda = 1$  die sog.

**Gibbs-Duhem-Relation**  $E = TS - PV + \mu N$ 

herleiten. Aus dem totalen Differenzial dieser Gleichung folgt mit (6.14) die:

differentielle G-D-Rel. 
$$S dT - V dP + N d\mu = 0$$

Diese gelten für homogene Systeme. In einem solchen System kann man also T, P und  $\mu$  **nicht unabhängig** voneinander variieren, was mit der Alltagserfahrung übereinstimmt: Erhöht man z.B. die Temperatur in einem Kolben, ohne das Volumen zu vergrößern, so steigt der Druck. Mit der Gibbs-Duhem-Relation kann man für homogene Systeme das großkanonische Potenzial durch:

$$\phi = -PV$$

ausdrücken.

#### Typen von thermodynamischen Prozessen

Bei der Führung von thermodynamischen Prozessen kann man verschiedene Größen konstant halten. Diese verschiedenen Möglichkeiten haben eigene Bezeichnungen:

- isobar: P = const.
- isotherm: T = const.
- isochor: V = const.
- isentropisch: S = const.
- adiabatisch:  $\delta Q = 0$  bzw. Q = 0 (je nach Notation)

Adiabatengleichung: Für das ideale Gas bei einem adiabatischen Prozess gilt die sog. Adiabatengleichung:

Adiabatengleichung des Idealen Gases:  $TV^{2/3} = \text{const.}$ 

#### Quasi-statische Prozesse

Ein quasi-statischer Prozess ist ein idealer Prozess, der so "langsam" durchgeführt wird, dass das System dabei eine **Abfolge von Gleichgewichtszuständen** durchläuft. Für solche Prozesse gilt nach dem ersten Hauptsatz:

$$T dS = \delta Q.$$
 (6.15)

Wir nennen zusätzlich solche Prozesse quasi-statisch, bei denen lediglich Teilsysteme eine Abfolge von Gleichgewichtsprozessen durchlaufen. Dann können aber mit unseren Methoden auch nur diese Teilsysteme betrachtet werden.

#### Reversible und irreversible Prozesse

Ein reversibler Prozess ist ein Prozess, der auch in umgekehrter Reihenfolge ablaufen könnte, sodass nach der Umkehrung des Prozesses weder am System, noch an der Umgebung eine Veränderung zurückbleibt. Irreversibel sind Prozesse, die nicht reversibel sind. Alle **spontan ablaufenden Prozesse sind irreversibel**. Alle **reversiblen Prozesse müssen quasi-statisch sein**, da bei einem nicht quasi-statischen Prozesse ein Übergang von einem nicht-Gleichgewicht in ein Gleichgewicht stattfindet, der immer irreversibel ist. Die Umkehrung gilt nicht: Es gibt quasi statische irreversible Prozesse.

Es stellt sich die Frage: Wieso ist das der Fall? Die mikroskopischen Gleichungen der klassischen und auch der Quantenmechanik sind zeitumkehrinvariant. Wieso nehmen wir also in der makroskopischen Welt einen Zeitpfeil wahr, der in eine bestimmte Richtung zeigt? Durch verschiedene Beispielprozesse kann man sich verdeutlichen, dass die Irreversibilität mit der **Enropie** zusammenhängt. Die **Entropie wächst** bei einem irreversiblen Prozess an, auch ohne, dass man eine Wärmemenge zuführt, wie z.B. bei dem Vergrößern des Volumens eines Gases. Damit ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Mikrozustand

angenommen wird, der zu dem Makrozustand X vor dem irreversiblen Prozess passt, für makroskopische Systeme (große N) sehr gering:

$$P_X = \frac{\Omega(X)}{\Omega(Y)} = \exp\left(-\frac{1}{k}\left(S_Y - S_X\right)\right) \sim e^{-\Delta J N} \ll 1$$

Dabei ist J eine beliebige Größe, die bei der Prozessführung geändert wird, wie z.B. V oder N. Dabei Skaliert die Entropieänderung mit der Teilchenzahl und führt makroskopische Systeme verschwindet diese Wahrscheinlichkeit. Der Zeitpfeil zeigt in der makroskopischen Welt also in die **Richtung**, welche durch die positive Entropieänderung vorgegeben ist.

# 6.3.5 Arbeit und Wärme sind keine Zustandsfunktionen

Wie man anhand von vielen irreversiblen oder reversiblen Prozessen sehen kann, sind Arbeit W und Wärme Q keine Zustandsfunktionen, da sie entscheidend von der Art der Prozessführung abhängen.

# 6.3.6 Der Zweite Hauptsatz der Thermodynamik

Betrachten wir ein System, welches aus verschiedenen Teilsystemen, die für sich in einem Gleichgewichtszustand sind, besteht aber insgesamt aufgrund sog. Zwangsbedingungen nicht in ein Gleichgewicht relaxieren kann. Das Gesamtsystem sei dabei vollständig isoliert. Nach der Aufhebung aller Zwangsbedingungen stellt sich also ein globales Gleichgewicht ein, welchem eine finale Entropie S' zugeordnet werden kann. Dann ist diese Entropie nach dem Prinzip der maximalen Entropie maximal. Es gilt also:

**Prinzip von Clausius:** Bei einem Übergang eines abgeschlossenen Systems in einen globalen Gleichgewichtszustand ist die Entropieänderung nicht negativ:

$$\Delta S \geq 0$$

Bestehe das Gesamtsystem nun aus einem Teilsystem A und einem Wärmebad B, wobei  $Q_A$  die von B auf A übertragene Wärme ist. Aus Sicht von B ist diese Wärmemenge sehr klein, sodass für B der Übergang quasi statisch ist, also gilt:

$$\Delta S_B = -\frac{Q_A}{T_B} \,.$$

Da die Gesamtentropie nicht abnehmen kann ist:

$$\Delta S_A \ge \frac{Q_A}{T_B}$$

Dies ist der zweite Hauptsatz der Thermodynamik:

**Zweiter Hauptsatz:** Für die Änderung der Zustandsfunktion Entropie eines Systems gilt allgemein:

$$\Delta S \ge \sum_i \frac{Q^{(i)}}{T_B^{(i)}} \,,$$

wobei diese Summe über alle Teilschritte i verläuft, in denen jeweils die Wärme  $Q^{(i)}$  aus einem Wärmebad der Temperatur  $T_B^{(i)}$  aufgenommen wird.

• Für reversible (also auch quasi statische) Prozesse gilt nach (6.15):

$$\Delta S = \sum_{i} \frac{\delta Q^{(i)}}{T^{(i)}} \qquad \text{bzw.} \qquad \Delta S = \int_{a}^{e} \mathrm{d}S = \int_{a}^{e} \frac{\delta Q}{T} \tag{6.16}$$

• Für irreversible Effekte gilt immer die strenge Ungleichheit:

$$\Delta S > \sum_{i} \frac{Q^{(i)}}{T_B^{(i)}}$$

 $T_B$  ist hierbei immer die Temperatur eines Wärmebades. Für reversible Prozesse ist aber auch die Temperatur des Systems selbst wohldefiniert. Die explizite Integralberechnung wird später erklärt.

#### Anmerkungen zum zweiten Hauptsatzes:

- Über reversible Prozesse kann man Entropieänderung gemäß (6.16) messbar machen.
- Beachte, dass  $\int_a^e \delta Q$  von der Prozessführung abhängt und erst durch den sog. integrierenden Faktor 1/T Weg-unabhängig wird.
- Die ersten beiden Hauptsätze wurden von Clausius unter der Annahme, dass das Universum als Ganzes ein abgeschlossenes System ist, in die plakative Form gebracht:

### "Die Energie des Universums ist konstant; seine Entropie strebt einem Maximum zu."

• Für einen **zyklischen Prozess** (Anfangs- = Endzustand) ist wegen  $S' = S_0$ , also  $\Delta S = 0$ :

$$\oint \frac{\delta Q}{T} \leq 0$$

# 6.3.7 Kreisprozesse

Unter einem Kreisprozess versteht man einen thermodynamischen Prozess, der zyklisch abläuft, sodass sowohl das P-V-Diagramm als auch das T-S-Diagramm eine geschlossene

Kurve ist. Für einen quasi statischen zyklischen Prozess kann man die gesamte vom System geleistete Arbeit und die gesamte vom System aufgenommene Wärmemenge mittels:

$$W_g = \oint P \,\mathrm{d}V, \qquad Q = \oint T \,\mathrm{d}S$$

berechnen. Nach dem ersten Hauptsatz folgt, da sich bei einem zyklischen Prozess insgesamt die innere Energie nicht ändern darf:

$$Q = W_q$$
.

Man unterscheidet entsprechend zwischen zwei prinzipiellen Typen von zyklisch arbeitenden Maschinen:

- Arbeitsmaschine:  $W_g = Q > 0 \Rightarrow$  Durchlauf im Uhrzeigersinn
- Wärmepumpe/Kältemaschine:  $W_g = Q < 0 \Rightarrow$  Durchlauf gegen den Uhrzeigersinn.

#### **Carnot-Prozess**

Bei einem Carnot-Kreisprozess werden 4 Schritte quasi statisch durchlaufen:

1) Isotherme Expansion bei hoher System<br/>temperatur  $T_h$  (System erhält Wärme vom Bad):

$$Q_h = T_h(S_h - S_n) > 0$$

2) Adiabatische (= Isentropische, da quasi statisch) Expansion (System arbeitet):

Systemtemperatur kühlt von  $T_h$  zu  $T_c$ .

3) Isotherme Kompression (Bad erhält Wärme):

$$Q_c = T_c(S_n - S_h) < 0$$

4) Adiabatische (Isentropische) Kompression:

System temperatur steigt von  $T_c$  auf  $T_h$ .

Die Prozesse werden durch thermischen Kontakt mit einem heißen Wärmebad der Temperatur  $T_h$  und einem kalten Wärmebad der Temperatur  $T_c$  erzeugt. Wir definieren den Wirkungsgrad einer solchen Maschine als:

Wirkungsgrad: 
$$\eta = \frac{\text{geleistete Arbeit}}{\text{entnommene Wärme}}$$

In diesem Fall erhalten wir mit  $W_g = Q_h + Q_c$ :

$$\eta_c = \frac{W_g}{Q_h} = 1 - \frac{T_c}{T_h} < 1$$

wobei die entnommene Wärme nur  $Q_h$  ist, da  $Q_c$  an das kältere Reservoir abgegeben wird. Tatsächlich kann man allgemein zeigen, dass keine Kreismaschine, die Temperaturen im Intervall  $[T_c, T_h]$  verwendet, existiert, die einen höheren Wirkungsgrad besitzt: Die Universelle Grenze der Effizienz von Arbeitsmaschinen ist der Carnot Wirkungsgrad:

$$\eta_C = 1 - \frac{T_c}{T_h} \,.$$

#### Inverser Carnot-Prozess

Bei einem inversen, also umgekehrt durchlaufenen, Carnot-Prozess ändern sich z.T. die Vorzeichen usw. Analog zum Wirkungsrad definiert man die Heizeffizienz:

**Heizeffizienz:**  $\eta^{H} = \frac{\text{an das wärmere Bad übertragene Wärme}}{\text{vom System aufgenommene Arbeit}}$ 

Diese charakterisiert die Leistungsfähigkeit als **Wärmepumpe**. Im Falle der Carnot-Maschine lautet sie:

$$\eta_c^H = \frac{-Q_h}{W} = \frac{T_h}{T_h - T_c} > 1$$

Dass dieser Quotient größer als 1 ist macht Sinn, da nur so diese Heizmethode effizienter ist als die direkte Umwandlung von Arbeitsenergie in Wärme. Der Prozess ist nur dann effizient, wenn die Unterschiede der Temperaturen nicht zu groß sind.

Analog charakterisiert die Kühleffizienz die Leistungsfähigkeit als Kältemaschine:

Kühleffizienz: $\eta_c^k = \frac{\text{dem kälteren Reservoir entzogene Wärme}}{\text{von System aufgenommene Arbeit}}$ 

Für den Carnot-Prozess also:

$$\eta_c^k = \frac{Q_c}{W} = \frac{T_c}{T_h - T_c} \,.$$

Dies ist also ineffizient, wenn  $T_c$  wirklich klein sein soll. Um die Ausbeute zu steigern, verkettet man mehrere Kühlschritte.

# 6.3.8 Der Dritte Hauptsatz der Thermodynamik

Bereits von Walter Nernst wurde 1905 postuliert, dass die Entropieänderung in isothermen Prozessen für  $T \rightarrow 0$  verschwindet. Allgemein formulierte **Max Planck** 1930:

**Dritter Hauptsatz:** Bei T = 0 nimmt die Entropie einen konstanten Wert an (der auf 0 gesetzt wird) unabhängig von den anderen Systemparametern:

$$\lim_{T \to 0} \frac{S(T)}{N} = 0$$

Statistisch kann man dies darin begründen, dass die Entropie S(T = 0) von der Grundzustandsentartung abhängt. Sei  $E_0$  der Grundzustand mit Entartung  $g_0$ . Im kanonischen Ensemble lässt sich für kleine Temperaturen leicht zeigen:

$$\rho_c(T=0) = \rho_C(\beta=\infty) = \frac{\sum_{n=0}^{g_0} |n\rangle \langle n|}{g_0} := \frac{P_0}{g_0}$$

Also gilt:

$$S(T=0) = k \ln g_0$$

Für komplexe, reale Systeme geht man davon aus, dass die Grundzustandsentartung maximal von der Ordnung N ist, sodass der obige Grenzfall eintritt.

Es gibt aber Modelle mit hochgradig entarteter Grundzustandsenergie, mit  $g_0 = \mathcal{O}(e^N)$ , wie z.B. das sog. **Ising-Modell** auf einem Dreiecksgitter. Man geht aber davon aus, dass in verbesserten, dann aber nicht mehr analytisch untersuchbaren, Modellen diese Entartung aufgehoben wird.

Verwandt ist die Frage, wieso Wassereis eine geringere Dichte als flüssiges Wasser hat. Wassereis kristallisiert in einer sog. Wurzit Struktur. Die Sauerstoffatome sind dabei tetraedrisch angeordnet und die Coulomb Wechselwirkung bevorzugt für jedes Sauerstoffatom 2 nahe und zwei entfernte Wasserstoffatome (**Eisregel**). Dies lässt noch einige Zustände und somit eine recht hohe Entropie zu:

$$g_0 = \underbrace{2^{2N}}_{\text{Entartung ohne Eisregel}} \times \underbrace{\left(\frac{6}{16}\right)^N}_{\text{Korrektur durch Eisregel}} = \left(\frac{3}{2}\right)^N \implies \frac{S}{N} = k \ln(3/2)$$

wobei N die Anzahl der Sauerstoffatome ist. Es gibt ähnliche Effekte auch bei magnetischen Materialien, weshalb man diese auch Spin-Eis nennt.

Nach dem Dritten Hauptsatz muss man also, um T = 0 zu erreichen, auch S = 0 erreichen. An einem bestimmten Punkt existiert aber kein Wärmebad mehr, um die Temperatur durch Wärmeabgabe zu verringern. Daher müsste man die Temperatur quasi statisch, isentropisch also adiabatisch zu ändern. Dieses Vorgehen nennt man auch **adiabatisches Kühlen**. Aber auch hierdurch wird die Temperatur nicht auf null fallen, weil die Entropie nicht mit sinkt. In einer **endlichen Anzahl von Kühlschritten kann man** T = 0 **nie erreichen**!

### 6.3.9 Legendre-Transformation

Es ist häufig unpraktisch die Zustandsfunktionen S = (E, V, N) bzw. E = E(S, V, N)zu verwenden. Den Wechsel auf Funktionen von z.B. T, P, N wird durch eine Legendre-Transformation geleistet. Betrachtet man einfach  $T = (\partial_S E)_{V,N}(S, V, N)$  und löst nach Sauf, um dies in E = E(T(S, V, N), V, N)) geht **Information verloren**! Dies kann man in einem Beispiel zeigen: Man kann bei diesem Vorgehen hinterher nicht auf die Entropie zurückschließen:

$$E_1(S, V, N) = a \frac{S^2}{V}, \qquad E_2(S, V, N) = a \frac{(S+bV)^2}{V}$$
$$\Rightarrow \qquad S_1 = \frac{TV}{2a}, \qquad S_2 = \frac{TV}{2a} - bV$$

Wodurch sich durch erneutes Einsetzten in die Energie ergibt:

$$E_1(T, V, N) = E_2(T, V, N) = \frac{T^2 V}{4a}.$$

Es ist also offensichtlich Information verloren gegangen.

Wir suchen also eine Allgemeinere Funktion der gewünschten Variablen, die die gesamte Information enthält wir nennen diese **thermodynamische Potenziale** F. Daraus soll auch hin und her gerechnet werden können. Diese konstruieren wir für das obige Beispiel gemäß:

$$F(T, V, N) = E(S(T, V, N), V, N) - TS(T, V, N).$$

Mittels der Kettenregel kann man zeigen:

$$\frac{\partial F}{\partial T} = -S \,, \qquad \frac{\partial F}{\partial V} = -P \,.$$

Diese sog. Legendre Transformation (von E nach F) liefert also die gewünschte Eigenschaft. Da die Umkehrtransformation wieder eine Legendre Transformation ist; geht keine Information verloren.

Die Legendre Transformation ist allgemein das Mittel der Wahl, um aus einer gegebenen Funktion  $f(x_1, x_2, ...)$  eine Funktion der Ableitungen  $y_i = (\partial_{x_i} f)_{x_j, j \neq i}$  eine Funktion  $g(y_1, y_2, ...)$  zu erzeugen, für die gilt:  $(\partial_{y_i} g)_{y_i, j \neq i} \propto x_i$ .

### 6.3.10 Thermodynamische Potenziale

Betrachten wir nun den allgemeineren Fall:

$$E = E(S, V, N, a),$$

wobei a ein zusätzlicher äußerer Parameter ist, wie ein Magnetfeld, der im Hamiltonian des Systems auftritt. Der erste Hauptsatz verallgemeinert sich hier zur

Gibbs'schen Fundamentalform: 
$$dE = \underbrace{T \, dS}_{\delta Q} \underbrace{-P \, dV - X_a \, da}_{\delta W} + \underbrace{\mu \, dN}_{\delta W_{\text{chem.}}}$$

mit den bekannten partiellen Ableitungen. Man bezeichnet  $X_a = -(\partial_a E)_{S,V,N}$  auch als **verallgemeinerte Kraft** zum Parameter *a*. Die Möglichkeiten des Energietransfers fassen wir wie oben beschrieben zusammen.

#### Konjugierte intensive Variablen

Den extensiven Variablen S, V, N sind über die partiellen Ableitungen sog. konjugierte intensive Variablen zugeordnet:

$$S \longrightarrow T = \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{V,N,a}$$
$$V \longrightarrow P = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_{S,N,a}$$
$$N \longrightarrow \mu = \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{V,S,a}$$

#### Isotherme Prozesse - Freie Energie

Da in der Realität Größen wie die Temperatur leichter einzustellen sind, als Größen, wie die Entropie, möchte man die thermodynamische Beschreibung gerne auf die intensiven Größen verlegen. Wir betrachten also wie schon im obigen Beispiel die **Freie Energie**:

# **Freie Energie:** F(T, V, N, a) = E(S(T, V, N, a), V, N, a) - TS(T, V, N, a)

mit dem Differenzial:

$$\mathrm{d}F = -S\,\mathrm{d}T - P\,\mathrm{d}V + \mu\,\mathrm{d}N - X_a\,\mathrm{d}a\,.$$

Dabei gilt:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial T} \end{pmatrix}_{V,N,a} = -S , \qquad \qquad \begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial V} \end{pmatrix}_{T,N,a} = -P \\ \begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial N} \end{pmatrix}_{T,V,a} = \mu , \qquad \qquad \begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial a} \end{pmatrix}_{T,N,V} = -X_a$$

Wir erkennen F also als die schon aus dem kanonischen Ensemble bekannte Größe wieder. Die freie Energie ist eine sehr praktische Größe, wenn es um **isotherme quasi-statische Prozesse mit fixer Teilchenzahl** geht, da dann  $(dF)_{T,V} = \delta W$  gilt, während  $(dE)_{T,V} \neq \delta W$ , da um die Temperatur konstant zu halten eine Wärmemenge aufgenommen werden muss.

#### Isobare Prozesse - Enthalpie

Analog nehmen wir eine Ersetzung von  $V \to P$  vor und erhalten die

**Enthalpie:** H(S, P, N, a) = E(S, V(S, P, N, a), N, a) + PV(S, P, N, a).

Diese hat das totale Differenzial:

$$\mathrm{d} H = T \, \mathrm{d} S + V \, \mathrm{d} P + \mu \mathrm{d} N - X_a \, \mathrm{d} a \,,$$

d.h. erneut:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial S} \end{pmatrix}_{P,N,a} = T , \qquad \qquad \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial P} \end{pmatrix}_{S,N,a} = V \\ \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial N} \end{pmatrix}_{S,P,a} = \mu , \qquad \qquad \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial a} \end{pmatrix}_{S,P,N} = -X_a$$

Hier gilt für einen quasi-statischen isobaren Prozess, bei N, a = const.:

$$(\mathrm{d}H)_{P,N,a} = T \,\mathrm{d}S = \delta Q \,,$$

also gibt  $(dH)_{P,N,a}$  direkt den Wärmetransfer an. Dies folgt auch allgemein aus dem ersten Hauptsatz:  $\Delta Q = \Delta E + P\Delta V = \Delta H$ .

Für einen **quasi-statischen**, isobaren und adiabatischen Prozess gilt  $(dH)_{S,P} = \mu dN - X_a da$ . Dies gilt, da  $dS \propto \delta Q = 0$  der "übrige" Anteil der Energie, also der mögliche Arbeitstransfer des Systems ist.

#### Isotherme, isobare Prozesse - Freie Enthalpie

Analog ist im Falle eines isothermen, isobaren Prozesses ein gemeinsamer Variablenwechsel  $S \to T, V \to P$  nützlich. Die erhaltene Funktion ist die

**Freie Enthalpie:** 
$$G(T, P, N, a) = E - TS + PV$$
.

Die Abhängigkeiten sind entsprechend zu verstehen. Für die Ersetzung muss das Gleichungssystem für T, P nach S, V aufgelöst werden. Das totale Differenzial lautet:

$$\mathrm{d}G = -S\,\mathrm{d}T + V\,\mathrm{d}P + \mu\,\mathrm{d}N - X_a\,\mathrm{d}a\,.$$

Die partiellen Ableitungen ergeben sich wie zuvor. Für einen isothermen, isobaren Prozess gilt:

$$(\mathrm{d}G)_{T,P} = \mu \,\mathrm{d}N - X_a \,\mathrm{d}a \,.$$

Die freie Enthalpie gibt somit den möglichen Energietransfer für ein System an, das sowohl an ein Wärmebad gekoppelt ist, als auch an einen konstanten äußeren Druck.

#### Zusammenhang zum großkanonischen Potenzial

Als Letztes führen wir den Übergang zu T, V und  $\mu$  als Variablen durch. Das führt auf das

# **Großkanonisches Potenzial:** $\phi(T, V, \mu, a) = E - TS - \mu N$ ,

mit dem totalen Differenzial:

$$\mathrm{d}\phi = -S\,\mathrm{d}T - P\,\mathrm{d}V - N\,\mathrm{d}\mu - X_a\,\mathrm{d}a\,.$$

und wieder analogen partiellen Ableitungen. Das heißt

 $(\mathrm{d}\phi)_{T,\mu} = -P\,\mathrm{d}V - X_a\,\mathrm{d}a$ 

gibt den freien Energieaustausch an, wenn T und  $\mu$  konstant gehalten werden.

# 6.3.11 Extremaleigenschaften der thermodynamischen Potenziale

In einem gegebenen Gleichgewichtszustand V, N, S ist die **Energie minimal**. Gleichzeitig ist die **Entropie maximal**. Betrachten wir die Änderung nach einem noch nicht fixierten, zusätzlichen Parameter x:

$$\mathrm{d}_0^n Y = \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} Y\Big|_{x=x_0}$$

Die Extremaleigenschaften von S und E lassen sich dann ausdrücken durch:

$$d_0 S = d_0 E = 0$$
,  $d_0^2 E > 0$ ,  $d_0^2 S < 0$ .

Für die verschiedenen physikalischen Situationen der thermodynamischen Potenziale – z.B. ein Gleichgewichtszustand mit vorgegebenen T, V, N für die freie Energie – lässt sich zeigen, dass für alle thermodynamischen Potenziale gilt:

Alle thermodynamischen Potenziale bis auf die Entropie nehmen im Gleichgewichtszustand ihrer entsprechenden Variablen ein Minimum an. Die Entropie nimmt hingegen ein Maximum an Bezüglich eines noch nicht fixierten Parameters gilt daher für ein thermodynamisches Potenzial  $V \neq S$ :

$$d_0 V = 0$$
  $d_0^2 V > 0$ 

Besonders wichtig ist, dass alle thermodynamischen Potenziale für homogene Systeme in den extensiven Parametern **konvex** und in den intensiven Parametern **konkav** sind, sodass die Legendre-Transformation stets durchgeführt werden kann.

### 6.3.12 Maxwell-Relationen und Kalkül

Die Maxwell-Relationen sind Beziehungen zwischen den verschiedenen kanonischen Variablen. Betrachtet man allgemein eine Funktion  $f(x_1, x_2, ...)$  mit dem totalen Differenzial  $df := u_1 dx_1 + u_2 dx_2 + ...,$  so gilt:

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_2} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} = \frac{\partial u_2}{\partial x_1}$$

also folgt:

$$\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2}\right)_{x_1,x_3,\dots} = \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_1}\right)_{x_2,x_3,\dots}.$$

#### **Beispiel:**

Betrachten wir z.B. E(S, V, N) so gilt:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_{S,N} = -\left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_{V,N}$$

Dies lässt sich auch auf die anderen Potenziale und ihre jeweiligen Variablen anwenden. Es ergibt sich eine allgemeine **Baukastenregel**:

- Konjugierte Variablen ((T, S), (V, P), ...) stehen in Maxwell-Relationen diagonal zueinander.
- Es wird auf der einen Seite jeweils die Variable konstant gehalten, nach der auf der anderen Seite abgeleitet wird.
- Eine nicht verwendete konjugierte Variable wird auf beiden Seiten konstant gehalten.
- Es tritt ein "–"-Zeichen auf, wenn die "Zähler" aus unterschiedlichen Gruppen (S, P, N) und  $(T, V, \mu)$  stammen.

#### Motivation als Integrabilitätsbedingung

Man nennt diese Maxwell-Relationen aus dem folgenden Grund auch Integrabilitätsbedingungen. Betrachten wir ein zweidimensionales sog. Pfaff'sches Differenzial:

$$\delta g = A(x, y) \,\mathrm{d}x + B(x, y) \,\mathrm{d}y \,.$$

Dann ist ein Wegintegral über  $\delta g$  definiert als

$$\int_{P_1}^{P_2} \delta g = \int_{P_1}^{P_2} \begin{pmatrix} A(x,y) \\ B(x,y) \end{pmatrix} \cdot d\mathbf{x} = \int_0^1 \left( A(x(t), y(t)) \dot{x}(t) + B(x(t), y(t)) \dot{y}(t) \right) dt$$

bei geeigneter Parametrisierung. Dieses ist **Weg-unabhängig**, wenn der Vektor  $(A(x, y), B(x, y))^T$ als Gradient einer Funktion f(x, y) dargestellt werden kann. Dann gilt  $\delta g = df$ . Dafür muss die Bedingung:

$$\left(\frac{\partial A}{\partial y}\right)_x = \left(\frac{\partial B}{\partial x}\right)_y \qquad (\Leftrightarrow \quad \operatorname{rot} \nabla f = 0)$$

erfüllt sein. Das Differenzial heißt dann auch exakt. Für **Zustandsfunktionen**, also alle thermodynamischen Potenziale gilt diese **Wegunabhängigkeit** nach Konstruktion.

#### Weitere Verknüpfung

Aus der Kettenregel der Jacobi-Determinanten:

$$\frac{\partial(f,g)}{\partial(x,y)} = \frac{\partial(f,g)}{\partial(u,v)} \frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}$$

folgt insb. der Spezialfall:

$$\frac{\partial(f,v)}{\partial(u,v)} = \left(\frac{\partial f}{\partial u}\right)_v = \frac{\partial(v,f)}{\partial(v,u)}.$$

Daraus ergibt sich:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial u}\right)_v \left(\frac{\partial v}{\partial f}\right)_u \left(\frac{\partial u}{\partial v}\right)_f = -1\,.$$

Dies widerspricht nicht der gewöhnlichen Kettenregel. Bei dieser werden nämlich immer dieselben Größen konstant gehalten:

$$\left(\frac{\partial f(u(x))}{\partial x}\right)_v = \left(\frac{\partial f}{\partial u}\right)_v \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_v$$

# 6.3.13 Responsefunktion

Für thermodynamische Systeme spielen eine Reihe von experimentell bestimmbaren Materialeigenschaften, die die Änderung von extensiven Systemparametern bei der Änderung von intensiven Parametern beschreiben. Diese hängen z.T. von der Prozessführung ab, sodass es praktisch ist verschiedene thermodynamische Potenziale für die Berechnung zu verwenden.

#### Wärmekapazität

(extensiv)

(isochor:<sup>7</sup>) 
$$C_V = \left(\frac{\delta Q}{\mathrm{d}T}\right)_{V,N} = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V,N} = \left(\frac{\partial E}{\partial S}\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{V,N} = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{V,N}$$
  
(isobar:)  $C_P = \left(\frac{\delta Q}{\mathrm{d}T}\right)_{P,N} = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{P,N} = \left(\frac{\partial H}{\partial S}\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{P,N} = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_{P,N}$ 

Hierbei muss in H(S, P, N) entsprechend zunächst S durch T, P, N ausgedrückt werden, wie z.B. im idealen einatomigen Gas: H = E + PV = 5NkT/2.

### Spezifische Wärme

(intensiv)

Man kann die Wärmekapazitäten auf die Masse oder die Teilchenanzahl / Stoffmenge (in Mol) der Substanz normieren, um eine intensive Größe zu erhalten.

#### Kompressibilität

(intensiv)

(isotherm:) 
$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_{T,N}$$
  
(adiabatisch, isentropisch:)  $\kappa_S = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_{S,N}$ 

1 (017)

#### Thermischer Ausdehnungskoeffizient

(intensiv)

$$\alpha = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_{P,N}$$

<sup>7</sup>Diese Variante ergibt sich auch sofort aus  $\delta Q = dE - \delta W$ .

### Zusammenhang zwischen den Resoponsefunktionen

Mit den Tools aus Kapitel 6.3.12 kann man verschiedene Zusammenhänge zwischen den Responsefunktionen beweisen. Als Beispiel betrachten wir (durchgehend bei N = const.):

$$\kappa_{S} = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial P} \right)_{S} = -\frac{1}{V} \frac{\partial (V, S)}{\partial (P, S)} = -\frac{1}{V} \frac{\partial (V, S)}{\partial (V, T)} \frac{\partial (V, T)}{\partial (P, T)} \frac{\partial (P, T)}{\partial (P, S)}$$
$$= -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V} \left( \frac{\partial V}{\partial P} \right)_{T} \left( \frac{\partial T}{\partial S} \right)_{P} = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial P} \right)_{T} \frac{\left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V}}{\left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{P}} = \kappa_{T} \frac{C_{V}}{C_{P}}$$

Es gelten die Zusammenhänge:

$$\frac{\kappa_S}{\kappa_T} = \frac{C_V}{C_P}, \qquad C_P - C_V = T \frac{V\alpha^2}{\kappa_T} > 0.$$
(6.17)

Die Kombination der Gleichungen bedeutet auch, dass i.A. Adiabaten im P-V-Diagramm steiler sind als Isothermen.

# 6.3.14 Stabilität und Responsefunktionen

#### Spezifische Wärme

Man kann im kanonischen Ensemble relativ leicht zeigen:

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{V,N} = \frac{1}{kT^2} (\Delta E)^2 \qquad \Rightarrow \qquad C_V \ge 0$$

Dies ist ein Beispiel für ein Fluktuations-Response-Theorem.

#### Kompressibilität

Ähnlich kann man im großkanonischen Ensemble mittels des thermodynamischen Kalküls zeigen:

$$\kappa_T = \frac{V}{N^2} \frac{1}{kT} (\Delta N)^2 \qquad \Rightarrow \qquad \kappa_T \ge 0$$

Dann gilt mit (6.17):

$$C_P \ge C_V \ge 0 \,.$$

Die gefundenen Ungleichungen nennt man auch **Stabilitätsbedingungen**, da sie angeben, dass das System bei kleinen Schwankungen in den Ursprünglichen Zustand zurückstrebt. Dies kann man sich anhand der Vorzeichen entsprechend klarmachen. Dies führt allgemein auf

**Prinzip von Le Chatelier:** Wenn ein System in einem stabilen Gleichgewichtszustand ist, führt jede spontane Änderung seiner Parameter zu Reaktionen, die das System wieder ins Gleichgewicht zurückführen.

Man kann noch eine weitere Aussage über die Wärmekapazität treffen. Nach dem Dritten Hauptsatz muss

$$S(T) - S(T = 0) = \int_0^T \frac{C(T')}{T'} \, \mathrm{d}T'^8$$

endlich sein. Dies kann nur gelten, wenn

$$C_V, C_P \to 0$$
 für  $T \to 0$ .

# 6.3.15 Absolute und Empirische Temperatur

Die absolute thermodynamischen Temperatur haben wir bereits festgelegt. Die offene Frage ist, wie dies mit unserer Temperaturskala (nennen wir sie  $\theta$ ), die z.B. durch die Höhe einer Quecksilbersäule gegeben ist, zusammenhängt. Wir nehmen einen monotonen Zusammenhang zwischen T und  $\theta$  an. Mittels der Maxwell-Relationen kann man zeigen:

$$\frac{1}{T}\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}\theta} = -\left(\frac{\partial V}{\partial\theta}\right)_P \left(\frac{\mathrm{d}P}{\delta Q}\right)_{\theta} =: f(\theta)$$

dabei sind beide Bestandteile von  $f(\theta)$  experimentell bestimmbar. Die Lösung dieser Differenzialgleichung ist leicht und lautet:

$$T \propto \exp\left(\int f(\theta) \,\mathrm{d}\theta\right)$$

Die absolute Temperaturskala T ist also durch die empirische Temperaturskala  $\theta$  bis auf einen freien Skalenfaktor C festgelegt.

Man definiert das **Kelvin** als den 1/273.16-ten Teil der thermodynamischen Temperatur des Triple-Punktes von Wasser, der also bei  $273.16 \text{ K} = 0.01 \text{ }^{\circ}\text{C}$  liegt. Daraus kann man dann bei gegebenen Druck das Volumen usw. bestimmen, wodurch man die Boltzmann-Konstante erhält.

# 6.3.16 Phasendiagramme

Ein Phasendiagramm hat üblicherweise die Form:



Abbildung 6.1: Abb. 1: schematisches Phasendiagramm für Wasser

<sup>8</sup>Es gilt z.B.  $C_V = T(dS/dT)_{V,n}$
Dabei nennt man die Kurve zwischen der Gas- und der flüssigen Phase die Verdampfungskurve, Die zwischen der festen und der Gasförmigen Phase Sublimationskurve und Die zwischen der festen und der flüssigen Phase Schmelzkurve. Oberhalb des kritischen Punktes lassen sich flüssige und gasförmige Phase nicht mehr unterscheiden. Am Tripelpunkt liegen alle drei Phasen gleichberechtigt vor. Die nötige Energie um vom festen in den flüssigen Zustand überzugehen nennt man auch latente Wärme.

Das obige Phasendiagramm zeigt die Anomalie für Wasser: Bei steigendem Druck bei gleichbleibender Temperatur gibt, ist die flüssige Phase der festen bevorzugt. Für die meisten anderen Materialien ist diese Kurve nach rechts geneigt.

## Phasenkoexistenz

Wir betrachten ein System mit n verschiedenen (nicht wechselwirkenden) Stoffkomponenten und r Phasen (p). Dabei gelten folgende Gleichgewichtsbedingungen:

- T, P muss für alle Komponenten und Phasen gleich sein.
- $\mu$  muss innerhalb aller Komponenten für jede Phasen gleich sein. Dies ergibt  $n \cdot (r-1)$  Gleichungen für die  $\mu_k^{(p)}$

Der erste Punkt ist bereits aus der Ensembletheorie bekannt. Im folgenden sind  $c_k^{(p)}$  die Anteile der Teilchen von Komponente k in Phase p:

$$c_k^{(p)} = \frac{N_k^{(p)}}{N^{(p)}}, \qquad N^{(p)} = \sum_{k=1}^n N_k^{(p)}.$$

Das ergibt r Gleichungen für die  $c_k^{(p)} p = 1...r$ :

$$\sum_{k=1}^{n} c_k^{(p)} = 1, \qquad p = 1...r.$$

Insgesamt liegen

$$\underbrace{2}_{T,P} + \underbrace{n \cdot r}_{c_k^{(p)}} \quad \text{Variablen}$$

und

$$r + n(r - 1)$$
 Bedingungen

für die Funktionen  $\mu_k^{(p)}$ vor. Dies führt auf

Gibbs'sche Phasenregel: f = 2 + n - r

freie Parameter des Systems. Diese gilt auch, wenn nicht jede Komponente in jeder Phase auftritt. Dabei gibt  $r_{\text{max}} = 2 + n$  die maximale Anzahl koexistierender Phasen an. Für nur eine Stoffart n = 1 mit r = 3 Phasen können somit maximal 3 Phasen koexistieren, dann ist aber f = 0 und somit sind keine Parameter mehr wählbar: Der Raum für die Koexistenz ist ein Punkt, also der Tripelpunkt. Koexistieren 2 Phasen, so ist f = 1 und der Koexistienzraum ist eine Kurve, wie z.B. die Verdampfungskurve. Bei nur 1 Phase ist f = 2 und der Raum eine Fläche.

## Clausius-Clapeyron-Gleichung

Bei der Koexistenz zweier Phasen (A und B) gilt entlang einer Kurve  $P_c(T)$ :

$$\mu^{(A)}(T, P_c(T)) = \mu^{(B)}(T, P_c(T)) \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}\mu^{(A)}}{\mathrm{d}T} = \frac{\mathrm{d}\mu^{(B)}}{\mathrm{d}T} \,.$$

Mit der differentiellen Gibbs-Duhem-Relation folgt daher:

$$-s_A + v_A \frac{\mathrm{d}P_c}{\mathrm{d}T} = -s_B + v_B \frac{\mathrm{d}P_c}{\mathrm{d}T}$$

entlang der Phasenkoexistenzkurve, wobei  $s_i = S_i/N_i$  und  $v_i = V_i/N_i$  das spezifische Volumen und die spezifische Entropie ist. Dadurch gilt:

Clausius-Clapeyron-Gl.: 
$$\frac{\mathrm{d}P_c}{\mathrm{d}T} = \frac{1}{T} \frac{Q_L^{\mathrm{mol}}}{v_B^{\mathrm{mol}} - v_A^{\mathrm{mol}}}$$

wobe<br/>i $Q_L$  die molare latente Wärme ist und  $v_i^{\rm mol}$  die molaren Volumen der beiden Phasen sind. Dabe<br/>i können all die Größen auf der rechten Seite noch von der Temperatur abhängen. Die Linkskrümmung der Verdampfungskurve von Wasser kann also durch die Volumen<br/>anomalie  $v_{\rm fl.} < v_{\rm fest.}$ erklärt werden.

# 6.3.17 Van-der-Waals-Zustandsgleichung

Die Van-der-Waals-Gleichung ist die einfachste Theorie, die die Koexistenz der flüssigen und gasförmigen Phase, sowie den kritischen Punkt beschreibt. Hierzu betrachten wir ein klassisches System mit einem Wechselwirkungsterm  $U(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|) := U(r)$  in der Hamiltonfunktion. Wir nehmen an dass diese Wechselwirkung eine Kombination aus einem attraktiven Potenzial w(r) für  $r > \sigma$  und einem Hart-Schalen-Potenzial (unendliche Grenze  $\leftrightarrow$ Pauli-Prinzip)  $U_{\text{HS}}$  für  $r < \sigma$  besteht. Die Berechnung der kanonischen Zustandssumme führt auf die Integrale

$$I := \left( \int \mathrm{d}^3 x_1 \dots \mathrm{d}^3 x_N \, e^{-\mathrm{HS}} \right) \times \frac{\int \mathrm{d}^3 x_1 \dots \mathrm{d}^3 x_N e^{-\mathrm{HS}} e^{-\sum w(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|)/2kT}}{\int \mathrm{d}^3 x_1 \dots \mathrm{d}^3 x_N \, e^{-\mathrm{HS}}}$$

wobei HS =  $\sum U_{\rm HS}(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|)/kT$ . Zunächst ist eine sinnvolle Abschätzung:

$$\int \mathrm{d}^3 x_1 \dots \mathrm{d}^3 x_N \, e^{-\mathrm{HS}} \approx (V - V')^N, \quad \mathrm{mit} \quad V' = bN.$$

Für den zweiten Faktor nimmt man an, dass der Abstand zwischen den relevanten Partnern größer ist als  $\sigma$  und kleiner als die typische Wechselwirkungslänge ist:

$$\sum_{j \neq i} w(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|) \approx \frac{N-1}{V} \int d^3 w(\mathbf{x}) =: (N-1)\bar{w}.$$

Dies nennt man auch Molekularfeldnäherung. Mit  $\bar{w} = -2a/V$ ,  $a = |\int d^3 w(x)|/2$  erhält man:

$$Z(T, V, N) = \frac{(V - Nb)^N}{\lambda_T^{3N} N!} e^{N^2 a/(VkT)}$$

a und b werden jetzt als materialspezifische Parameter betrachtet. Dadurch erhält man in der Stirling Näherung  $N! = N^N e^{-N}$ :

$$P = \frac{kTN}{V - Nb} - \frac{N^2a}{V^2}, \qquad E = \frac{3}{2}NkT - \frac{N^2a}{V}$$

Die thermische Zustandsgleichung nennt man unter Verwendung des spezifischen Volumens v = V/N auch die:

van-der-Waals Zustandsgl.: 
$$P = \frac{kT}{v - bv} - \frac{a}{v^2}$$
.

Dabei nennt man b das **Kovolumen** und a den **Kohäsionsparameter**. Für hohe Temperaturen sind Isothermen im P-V-Diagramm monoton fallende Kurven, analog zum idealen Fall. Bei der kritischen Temperatur erhält man jedoch einen **Sattelpunkt**! Diesen erhält man zu:

$$v_c = 3b$$
,  $kT_C = \frac{8}{27} \frac{a}{b}$ ,  $P_c = \frac{a}{27b^2}$ .

Dadurch erhält man den universellen Wert:

$$\frac{kT_c}{P_c v_c} = \frac{8}{3} \,.$$

Für noch niedrigere Temperaturen erhält man eine geschwungene Kurve mit Minimum und Maximum, sodass der Sattelpunkt zu einem echten Wendepunkt wird. In diesem Bereich gilt jedoch:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T > 0\,,$$

sodass  $\kappa_T < 0$  was den Fluktuations-Response-Theoremen widerspricht. Es liegt also in dieser Form kein thermodynamisch stabiles System vor. Um dieses Problem zu umgehen, interpretiert man diesen Bereich als **Koexistenzbereich** der gasförmigen und flüssigen Phase.

## Maxwell-Konsturktion

Offenbar beschreibt der Wendebereich der Van-Der-Waals Zustandsgleichung kein zulässiges thermodynamisches System. Wir interpretieren diesen Bereich als die **Koexistenz von zwei Phasen** (gasförmig, flüssig) unterschiedlicher Dichten. Um nun passend zu interpolieren, betrachten wir die spezifische freie Energie (wir betrachten das System ja bei konstanter Temperatur) f(T, v) = F(T, V)/N, sodass:

$$P = -\left(\frac{\partial f}{\partial v}\right)_T$$

was sich auf f(T, v) integrieren lässt. Betrachten wir nun den heterogenen Zustand zweier Phasen mit den relativen Stoffmengenanteilen  $c_i = \frac{v_i - v}{v_2 - v_1}$ . Die freie Energiedichte ist dann insgesamt durch:

$$f_h = c_1 f_1 + c_2 f_2$$

Ausgehend von Überlegungen bezüglich der Beträge zu P nach der obigen Abbildung ist eine Gerade, die so gewählt wird, dass  $F_1 = F_2$  gilt die beste Wahl, um die freie Energiedichte zu minimieren! Die Punkte A und B liegen immer eben genau bei den spezifischen Volumina  $v_1$  und  $v_2$  der beiden Phasen.

Je näher man der kritischen Temperatur  $T_c$  kommt, umso geringer wird die Breite dieser Interpolationsgerade, bis sie bei  $T_c$  genau verschwindet. Projiziert in die *P*-*T*-Ebene erhalten wir genau das Verhalten, welches wir im Phasendiagramm am Beginn von 6.3.16 gesehen haben.

#### Der kritische Punkt

Durch Betrachtung der sog. reduzierten Variablen  $P_r = P/P_C$ ,  $v_R = v/v_c$ ,  $T_r = T/T_c$  erhält man aus der Van-Der-Waals-Gleichung eine dimensionslose Gleichung:

$$P_r = \frac{8T_r}{3v_r - 1} - \frac{3}{v_r^2}$$

Entlang  $v = v_c$  erhalten wir dann:

$$\kappa_T = \frac{T_c}{6P_c} \frac{1}{(T - T_c)}$$

Die Kompressibilität divergiert also in der Nähe des kritischen Punktes. Das heißt es liegen sehr hohe lokale Fluktuation der Teilchendichte vor! Dies erzeugt zudem eine erhöhte Lichtstreuung, die man auch die kritische Opalesenz nennt. Die spezifischen Volumen der verschiedenen Phasen nähern sich dabei proportional zu  $|T_r - 1|^{1/2}$  an. Den auftretenden Exponent nennt man auch den kritischen Exponent, der sich aus unserer Mean-Field Theorie zu 1/2 ergeben hat. Experimentell erhält man aber einen Wert von 0.326. Diese korrekten Werte vorherzusagen benötigt man deutlich aufwändigere Methoden der Renormierungsgruppentheorie.

## 6.3.18 Chemisches Gleichgewicht und Massenwirkungsgesetz

Eine wichtige Anwendung der statischen Physik bzw. der Thermodynamik sind die chemischen Reaktionen. Das Standardbeispiel ist die Ammoniaksynthese:

$$N_2 + 3 H_2 \rightleftharpoons 2 NH_3$$
.

Diese Reaktion ist eine Gleichgewichtsreaktion, was durch die Doppelpfeile symbolisiert wird. Ziel der Synthese ist es dieses Gleichgewicht auf die rechte Seite zu Drücken.

Für die rein mathematische Betrachtung ist es praktisch alle Produkte und Edukte auf eine Seite der Gleichung zu schreiben. Dann ist eine allgemeine Chemische Reaktion mit n Partnern  $A_j$  und stöchiometrischen Koeffizienten  $\nu_j$ :

$$0 \rightleftharpoons \sum_{j=1}^{n} v_j A_j \, .$$

Dabei ist  $\nu_j > 0$  für die Produkte und  $\nu_j < 0$  für die Edukte. Wir betrachten nun eine Reaktion in der Gasphase. Einstellbare Parameter sind T und P. Das zugehörige Potenzial ist dann die **freie Enthalpie**  $G = G(T, P, N_1, ..., N_n)$ . Da T und P von außen vorgegeben sind, gilt:

$$(\mathrm{d}G)_{T,P} = \sum_{j=1}^{n} \mu_j \,\mathrm{d}N_j \,.$$

Im Gleichgewichtszustand ist dG = 0. Dies liefert eine Bestimmungsgleichung für die  $\mu_j$ . Die Änderungen  $dN_j$  sind aber gemäß der Reaktionsgleichung abhängig von: (hier nur z.B. zu  $N_1$ )

$$\mathrm{d}N_j = \frac{\nu_j}{\nu_1} \,\mathrm{d}N_1 \propto \nu_j \,.$$

Somit folgt insgesamt die Stabilitätsbedingung des chemischen Gleichgewichtes:

$$\sum_{j=1}^{n} \mu_j \nu_j = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \prod_{j=1}^{n} e^{\mu_j \nu_j} = 1.$$

Weitere explizite Berechnung benötigt zusätzliche Informationen über die Reaktionspartner.

## Gemisch aus Idealen Gasen

Dazu betrachten wir die Reaktionspartner als ideale Gase mit den Zustandsgleichungen  $P_j = N_j kT/V$ , j = 1, ..., n. Der Gesamtdruck lautet  $P = NkT/V = \sum P_j$ . Dies nennt man auch das

**Dalton Gesetz:** Jede Komponente eines Gases trägt einen **Partialdruck**  $P_j = c_j P$ , wobei  $c_j = N_j/N$  mit  $N = \sum N_j$ , zum Gesamtdruck bei.

Man kann zeigen, dass für ein ideales Molekülgas mit zusätzlichen Rotations- und Schwingungsfreiheitsgraden bei  $T_{\rm rot} << T << T_{\rm osz}$  gilt:

$$\mu_j = E_j^{\rm el} - c_{P,j}T\ln(kT) - kT\zeta_j + kT\ln(P_j)$$

mit einem elektronischen Beitrag  $E_j^{\text{el}}$ , der spezifischen Wärme pro Molekül  $c_{P,j}$  und einer chemischen Konstante  $\zeta_j(T_{\text{rot}})$ . Ersetzt mach nach dem Dalton-Gesetz hier  $P_j = c_j P$  und verwendet die Stabilitätsbedingung so ergibt sich:



wobei K von den Materialeigenschaften aber nicht mehr von den Konzentrationen abhängt. Dabei gilt:

$$K(T, P) \propto e^{-\Delta E/KT} \cdot T^{\Delta c_p/k} \cdot P^{-\Delta \nu}$$

wobei  $\Delta A$  die über die stöchiometrischen Koeffizienten gewichtete Größe ist (z.B.  $\Delta E = \sum \nu_j E_j^{\text{el}}$  und  $\Delta \nu = \sum \nu_j$ ). Dass dieses Massenwirkungsgesetz eine Möglichkeit zur Bestimmung der Übergangsmenge von Produkten zu Edukten ist, wird klar, wenn man umschreibt:

$$\prod_{\text{Produkte}} c_j^{\nu_j} = K(T, P) \prod_{\text{Edukte}} c_j^{|\nu_j|} \,.$$

Allgemein nennt man dies auch das Prinzip des kleinsten Zwanges:

- Bei Temperaturerhöhung verschiebt sich das Gleichgewicht in die Richtung in der die Energie am besten aufgenommen wird, d.h. auf die Seite auf der  $c_p$  groß ist oder die frei werdende Energie  $\Delta E$  kleiner ist.
- Bei Druckerhöhung verschiebt sich das Gleichgewicht in Richtung des geringeren Volumens, also geringerer Teilchenanzahl (Moleküle haben typischerweise ein viel kleineres Volumen pro Atom als freie Atome).

# 6.4 Ideale Quantengase

Wir möchten nun die thermodynamischen Eigenschaften von nicht wechselwirkenden Quanten-Vielteilchensystemen untersuchen. Der größte Unterschied zu klassischen Systemen ist die **Ununterscheidbarkeit** identischer Teilchen, die sich auf mögliche Energiezustände auswirkt. Bei hohen Temperaturen kann man ideale Quantengase wieder recht gut als klassische Gase betrachten.

# 6.4.1 Fockraum

## Periodische Randbedingungen

Wir betrachten zunächst ein einzelnes Teilchen in einem Volumen  $V = L^3$ . In der Quantenmechnaik haben wir typischerweise mit offenen Randbedingungen gerechnet, sodass am Rand des Integrationsvolumens (meistens  $r \to \infty$ ) die Wahrscheinlichkeitsdichten verschwinden. Der Hamiltonoperator für ein solches Einteilchensystem ist:

$$H_1 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\text{Wand})$$

Freie Randbedingungen sind nicht die einfachste Beschreibung, die wir wählen können. Da später im thermodynamischen Limes die Randbedingungen keine Rolle mehr spielen wählen wir sog. **periodische Randbedingungen**, d.h. für die Wellenfunktion eines Teilchens gilt:

$$\langle \mathbf{x} + L \mathbf{e}_i | \psi \rangle = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle.$$

Diese Randbedingungen haben den Vorteil, dass es gar keinen expliziten Rand mehr gibt. Da der Rand eines solchen Systems gegenüber seinem Volumen klein ist, spielt das für die tatsächlichen Ergebnisse keine Rolle. Auch der 1-Teilchen Hilbertraum des obigen Operators muss den Spin berücksichtigen:

$$|q\rangle := |\mathbf{p}, m_s\rangle = |\mathbf{p}\rangle \otimes |m_s\rangle \in \mathcal{H}_{\mathrm{orbit}} \otimes \mathcal{H}_{\mathrm{Spin}} = \mathcal{H}_1$$

mit der Energie

$$\epsilon_q = \epsilon_p = \frac{p^2}{2m}$$

und den Ortswellenfunktionen:

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}/\hbar} \,.$$

Damit die periodischen Randbedingungen erfüllt sind, muss aber gelten:

$$\mathbf{p} = \frac{2\pi\hbar}{L} \begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \end{pmatrix}, \qquad \nu_i \in \mathbb{N}_0.$$

Für  $V \to \infty$  geht also der Abstand zweier benachbarter Impulse gegen 0. Das Volumen eines Impulszustandes ist dann durch:

$$\Delta^3 = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} = \frac{h^3}{V}$$

gegeben. Dies entspricht genau dem Faktor die wir bereits früher in der klassischen Ensembletheorie verwenden mussten.

Als Basis des Einteilchen-Hilbertraumes  $\mathcal{H}_1$  haben wir somit eine abzählbare Menge von Zuständen.

## Verallgemeinerung auf N Teilchen

Für ein System aus N Teilchen ist der Hilbertraum zunächst durch das n-fache Tensorprodukt des Einteilchen-Hilbertraumes gegeben. Dabei ist

$$H_N = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\text{Wand}).$$

Eine Basis von  $\mathcal{H}$  ist dann die Menge der Produktzustände

$$|q^{(1)}\rangle\otimes...\otimes|q^{(n)}\rangle$$

mit  $|q^{(j)}\rangle \in \{|q_1\rangle, |q_2\rangle, ...\}$  für j = 1, ..., N. Für identische ununterscheidbare Teilchen müssen physikalische Zustände nach einem der Postulate der Quantenmechanik symmetrisch bzw. antisymmetrisch unter Permutation der Teilchenindizes sein. D.h. wir müssen in  $\mathcal{H}_N$  Zustände der Form:

$$\frac{\mathcal{N}}{N!} \sum_{P} (\pm 1)^{P} |q^{(P(1))}\rangle \otimes |q^{(P(2))}\rangle \otimes ... \otimes |q^{(P(3))}\rangle$$

betrachten, wobei P alle N! Permutationen der Zahlenfolge 1...N durchläuft. Der Exponent P ist die Anzahl an zweier Vertauschungen (Transpositionen) aus der die Permutation hervorgeht. Hierbei gilt + für **Bosonen** und – für **Fermionen**.  $\mathcal{N}$  ist ein Normierungsfaktor:

$$\mathcal{N} = \sqrt{\frac{N!}{\prod_q n_q !}} \,,$$

wobei  $n_q \in \mathbb{N}_0$  die Anzahl der Teilchen im Einteilchenzustand  $|q\rangle$  angibt. Man nennt dies auch die **Besetzungszahl**. Für Fermionen gibt es offenbar keine vollständig antisymmetrischen Zustände, für  $n_q > 1$  ist. Das nennt man auch das **Pauli-Prinzip**. Die Summe über alle  $n_q$  muss natürlich N sein:

$$\sum_{q} n_q = N$$

Jeder der vollständig symmetrische oder antisymmetrischen Zustände ist eindeutig gegeben, wenn für jeden Zustand  $|q\rangle$  die Besetzungszahl  $n_q$  gegebene ist. Daher bezeichnen wir die Zustände mit:

$$|\psi\rangle = |n_{q_1}, n_{q_2}, \ldots\rangle.$$

Der Hamiltonoperator wirkt dann insbesondere wie:

$$H_N|\psi\rangle = \underbrace{\left(\sum_q \epsilon_q n_q\right)}_{=E} |\psi\rangle$$

Aus der Quantenfeldtheorie folgt aus gründen der Erhaltung der Kausalität zudem das **Spin-Statistik-Theorem:** Teilchen mit ganzzahligem Spin (S) sind Bosonen und Teilchen mit halbzahligem Spin sind Fermionen. Da sich bei zusammengesetzten Zuständen / Teilchen die Spins addieren sind z.B. zwei Fermionen zusammen ein Boson, wie z.B. das H-Atom.

#### Fock-Raum

Wir möchten nun gerne im großkanonischen Ensemble arbeiten, da es i.A. schwierig ist für eine fixe Teilchen zahl die Besetzungszahlen zu bestimmen. Daher betrachten wir als "Trick" das großkanonische Ensemble mit chemischem Potenzial und erhalten  $\bar{N}(T, V, \mu)$ und rechnen im thermodynamischen Limes zurück auf  $\mu(T, V, \bar{N})$ . Unser verwendeter Hilbertraum muss nun alle Teilchenzahlen beinhalten. Dieser heißt

**Fock-Raum:** 
$$\mathcal{H}^{\pm} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2^{\pm} \oplus \mathcal{H}_3^{\pm} \oplus ...$$

mit + für Bosonen und – für Fermionen. In der Besetzungszahldarstellung gilt also:

Bosonen: 
$$\mathcal{H}^+ = \{ |n_{q_1}, n_{q_2}, ... \rangle | n_{q_i} = 0, 1, 2... \}$$
  
Fermionen:  $\mathcal{H}^- = \{ |n_{q_1}, n_{q_2}, ... \rangle | n_{q_i} = 0, 1 \}$ 

Dadurch, dass wir die  $n_{q_i}$  beliebig lassen ist die Teilchenzahl frei. Dabei ist  $|0, 0, ...\rangle := |0\rangle$  der Vakuumzusstand und  $|0, 0, ..., 0, 1, 0, ...0\rangle := |q_i\rangle$  der Einteilchen-Zustand.

## 6.4.2 Großkanonisches Potenzial und Verteilungen

Die großkanonische Zustandssumme lässt sich dann berechnen durch:

$$Z_G = \sum_{N=0}^{\infty} \operatorname{Tr}_N \left[ e^{-\beta(H-\mu N)} \right] = \sum_{N=0}^{\infty} \left( \sum_{n_{q_1}, n_{q_2}, \dots \text{ s.d. } \sum n_q = N} \exp \left[ -\beta \left( \sum_q \epsilon_q n_q - \mu \sum_q n_q \right) \right] \right).$$

Dabei muss gelten:  $\sum_q n_q = N$ , weshalb die einzelnen Summen (ohne die Summe über N) nicht mehr entkoppelt. Da aber zusätzlich über N summiert wird, sind alle Kombinationen von  $n_{q_i}$  möglich, sodass die Bedingung wegfällt und mit ihr die Summe über N:

$$Z_G = \sum_{n_{q_1}, n_{q_2}, \dots} \exp\left[-\beta \sum_q \left(\epsilon_q - \mu\right) n_q\right]$$

Diese Vielfachsumme lässt sich in das Produkt der Einzelsummen zerlegen. Dann erhält man für Bosonen mittels der geometrischen Reihe und für Fermionen  $(n_q \in \{0, 1\})$ :

$$Z_G = \begin{cases} \prod_q \left( \frac{1}{1 - \exp(-\beta(\epsilon_q - \mu))} \right) & \text{für Bosonen} \\ \prod_q \left[ 1 + \exp(-\beta(\epsilon_q - \mu)) \right] & \text{für Fermionen} \end{cases}.$$

Im Folgenden werden oft zweizeilige Gleichungen ( $\pm$ -Zeichen) auftreten, wobei die **obere** immer für **Bosonen** gilt und die **untere** für **Fermionen**. Das großkanonische Potenzial erhält man entsprechend zu:

$$\phi = \pm \frac{1}{\beta} \sum_{q} \ln \left( 1 \mp e^{-\beta(\epsilon_q - \mu)} \right)$$

Daraus erhalten wir den Erwartungswert der Gesamtteilchenzahl zu:

$$N = \sum_{q} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_q - \mu)} \mp 1} := \sum_{q} n_{B/F} ,$$

wobei man bezeichnet:

Bose Verteilung: 
$$n_B = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_q - \mu))} - 1}$$
  
Fermi Verteilung:  $n_F = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_q + \mu)} + 1}$ 

Über einen Ableitungstrick mit dem Logarithmus kann man zeigen, dass  $n_{B/F}$  eben die **mittlere Besetzungszahl des Einteilchenzustandes** zur entsprechenden Energie ist. Da die mittlere Besetzungszahl nicht negativ sein kann, muss gelten:

für Bosonen: 
$$\mu \leq \min_{a} \{ \epsilon_q \}$$
.

Außerdem ist diese Bedingung nötig um überhaupt die geometrische Reihe bei der Bestimmung der Bose Verteilung verwenden zu können. Die mittlere Energie erhält man entsprechend aus dem Erwartungswert bezüglich der Besetzungsazahlen:

$$E = \bar{E} = \sum_{q} \epsilon_q \langle n_q \rangle$$

Im klassischen Grenzfall gehen beide Verteilungen in die Boltzmann Verteilung über.

# 6.4.3 Thermodynamischer Grenzfall und Einteilchenzustandsdichte

Man kann die Ausdrücke für N, E und  $\phi$  auch in Integralformen überführen. Allgemein ist eine Größe  $A(\epsilon_q)$  unter der Annahme, dass  $\epsilon_q = \epsilon_q(p)$  unabhängig von den Spins ist:

$$\sum_{q} A(\epsilon_q) = g_s \frac{1}{\Delta^3} \sum_{\mathbf{p}} \Delta^3 A(\epsilon_q) \,.$$

Wir betrachten hier einen Einteilchenzustand, d.h.  $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3$ . Der Faktor  $g_s = 2S + 1$ beschreibt die Spin-Entartung.  $\Delta^3 = (2\pi\hbar)^3/V = \Delta p$  haben wir künstlich eingefügt. Im thermodynamischen Limes für  $V \to \infty$  kann man diesen Ausdruck als Riemann-Integral auffassen, sodass:

$$\sum_{q} A(\epsilon_q) \to \frac{g_s V}{(2\pi\hbar)^3} \int \mathrm{d}^3 p \, A(\epsilon_p) \,.$$

Häufig hängt  $\epsilon_p$  nur vom Betrag des Impulses ab, sodass man Kugelkoordinaten verwenden kann:  $d^3p \rightarrow 4\pi dp$ . Im nichtrelativistischen Fall  $\epsilon_p = p^2/2m$  kann man dies durch eine Substitution umformen in:

$$\left(E = \frac{p^2}{2m}\right) \quad \Rightarrow \quad \sum_q A(\epsilon_q) \to \frac{g_s V m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty A(\epsilon) \sqrt{\epsilon} \, \mathrm{d}\epsilon \, .$$

Häufig betrachtet man auch anstatt der Energie  $\epsilon$  den dimensionslosen Parameter  $x = \beta \epsilon$ . Dann erhält man beispielsweise:

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{\lambda_T^3} \frac{2g_s}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \mathrm{d}x \, \frac{\sqrt{x}}{e^x z^{-1} \mp 1} \tag{6.18}$$

mit der thermischen Wellenlänge  $\lambda_T$  und der Fugazität  $z = e^{\beta\mu}$ . Der Faktor  $\sqrt{\epsilon}$  beschreibt eine Gewichtung der Energiezustände, also im Prinzip eine Erhöhung der Anzahl an möglichen Zuständen zur jeweiligen Energie. Dies führt auf den Begriff der Zustandsdichte.

## Zustandsdichte - Density of States (DOS)

Die Einteilchenzustandsdichte ist durch

$$g(\epsilon) = \sum_{\mathbf{p}} \delta(\epsilon_p - \epsilon) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \,\delta(\epsilon_p - \epsilon)$$

gegeben. Damit lässt sich umschreiben:

$$\frac{g_s V}{(2\pi\hbar)^3} \int \mathrm{d}^3 p \, A(\epsilon_p) = \frac{g_s V}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \int \mathrm{d}^3 p \, A(\epsilon) \delta(\epsilon_p - \epsilon) = g_s \int_0^\infty A(\epsilon) g(\epsilon) \, \mathrm{d}\epsilon$$

Für nichtrelativistische Dispersion ist die Einteilchenzustandsdichte in 3D durch:

$$\left(E = \frac{p^2}{2m}\right) \quad \Rightarrow \quad g(\epsilon) = \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\sqrt{\epsilon} \,,$$

gegeben, die für Bosonen und Fermionen gleich ist (muss sie ja auch, da sie eine Einteilchenzustandsdichte ist). Damit kann man die Energie und die Teilchenzahl umeschreiben zu:

$$E = g_s \int_0^\infty \epsilon \, n_{B/F} \, g(\epsilon) \, \mathrm{d}\epsilon \,, \quad N = g_s \int_0^\infty n_{B/F} \, g(\epsilon) \, \mathrm{d}\epsilon \,.$$

Analog erhält man für das großkanonische Potenzial:

$$\phi = \pm \frac{g_s V m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3 \beta} \int_0^\infty \mathrm{d}\epsilon \,\sqrt{\epsilon} \,\ln\left(1 \mp e^{-\beta(\epsilon-\mu)}\right)$$

Dies lässt sich mittels Partieller Integration umschreiben zu:

$$\phi = -\frac{4g_s V}{3\sqrt{\pi}\lambda_T^3\beta} \int_0^\infty \mathrm{d}x \, \frac{x^{3/2}}{e^x z^- \mp 1} \, .$$

Da das ideale Quantengas ein homogenes System ist, folgt mit  $\phi = -PV$ :

$$PV = \frac{2}{3}E\,,$$

wie für ein klassisches Gas.

# 6.4.4 Klassischer Grenzfall

Bei hohen Temperaturen gilt:  $z = e^{\beta\mu} \ll 1$ . Klassisches Verhalten erwarten wir für  $\lambda_T^3 \ll V/N$ . Das ist äquivalent zu:  $\lambda_T \ll (V/N)^{1/3}$ , was sich interpretieren lässt als:

Man erwartet klassisches Verhalten, wenn die Delokalisierung, gegeben durch  $\lambda_T$  sehr viel kleiner als der mittlere Abstand der Teilchen  $1/\sqrt[3]{\rho}$  ist.

Aus Gl. 6.18 erhält man dann, nach einer Entwicklung um die Fugazität in führender Ordnung (**Virialentwicklung**):

$$\frac{1}{e^x z^{-1} \mp 1} = \frac{z e^{-x}}{1 \mp z e^{-x}} = z e^{-x} (1 \pm z e^{-x} + \mathcal{O}(z^2))$$

das Integral:

$$\int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^x z^{-1} \mp 1} \, \mathrm{d}x \approx z \, \Gamma(3/2) \pm z^2 \frac{1}{2^{3/2}} \, \Gamma(3/2) + \mathcal{O}(z^3) \,, \quad \Gamma(3/2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

Damit kann man nun Gl. 6.18 iterativ nach z auflösen und erhält:

$$z = \frac{\lambda_T^3 N}{g_s V} \mp \frac{1}{2^{3/2}} \left(\frac{\lambda_T^2 N}{g_s V}\right)^2 + \mathcal{O}\left(\frac{\lambda_T^3}{V/N}\right)^3$$

Damit erhält man den Fall des idealen klassischen Gases für  $g_s = 1$  erster Ordnung. Analog gehen wir für das großkanonische Potenzial vor, wobei das Integral leicht verschieden ist

(die Argumente der  $\Gamma$ -Funktion weichen ab) und erhalten unter Verwendung der Fugazität von oben:

$$PV = -\phi = NkT \left[ 1 \mp \frac{\lambda_T^3 N}{2^{5/2} g_s V} + \mathcal{O}\left(\frac{\lambda_T^3 N}{V}\right)^2 \right]$$

Das heißt es folgt der klassische Grenzfall für  $\lambda_T^3 >> V/N$ . Für Fermionen ist der Druck im Gegensatz zu Bosonen leicht erhöht, was aus dem Pauli-Prinzip (Fermionen), bzw. der sog. Clusterbildung (Bosonen) resultiert. Dies nennt man auch die **Austauschkorrektur**.

## 6.4.5 Das entartete Fermi-Gas

Wir betrachten nun das Verhalten eines Gases von Fermionen im thermodynamischen Limes in verschiedenen Grenzfällen.

## Grundzustand

Im Grundzustand, also für sehr kleine Temperaturen  $T \rightarrow 0$ , werden die Impulse sukzessive, dem Pauli Prinzip folgend, aufgefüllt, was die **Fermi Kugel** (im Impulsraum) ergibt:

$$N = g_s \sum_{p \le p_F} 1 = g_s \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p \,\Theta(p_F - p) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{p_F}{\hbar} = k_F = \left(\frac{6}{g_s}\pi^2 n\right)^{1/3}$$

mit n = N/V. Dabei nennt man  $p_F$  auch den **Fermi Impuls.** Daher erhält man im nichtrelativistischen Fall die **Fermi Energie:**  $\epsilon_F = p_F^2/2m$ . Daraus lässt sich dann die gesamte innere Energie durch:

$$E(T=0) = \frac{g_s V}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p \,\epsilon_p \Theta(p_F - p) = \frac{3}{5} \epsilon_F N \tag{6.19}$$

bestimmen. Hieraus erhält man auch einen Druck für T = 0, den man daher auch **Ent**artungsdruck. nennt. Dieser Druck stabilisiert u.U. einen Stern bei seinem Gravitativen Kollaps.

Tatsächlich ist für den Grenzfall  $T \rightarrow 0$  die Fermi-Verteilung annähernd eine Stufenfunktion:

$$\lim_{T \to 0} n_F(\epsilon - \mu) = \Theta(\mu - \epsilon) \,.$$

Bei T = 0 entspricht dem chemischen Potenzial also genau der obigen Fermi-Energie.

## Niedrige Temperaturen

Bei niedrigen Temperaturen weicht die Fermi-Verteilung nur leicht von der Stufenform ab. Bei Raumtemperatur beträgt diese Aufweichung  $\sim 2kT \approx 50$  meV. Die Integrale die oben besprochen wurden lassen sich für kleine Temperaturen entwickeln. Diese Entwicklung muss im Rahmen von asymptotischen Reihen verstanden werden. Diese Näherung heißt auch die **Sommerfeld-Entwicklung**. Hierzu betrachtet man nur den führenden Term, für den man das Integral:

$$\int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}x \, x^2 \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} = \frac{\pi^2}{3} \, .$$

Dadurch erhält man den Zusammenhang:

$$\mu = \epsilon_F \left( 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 + \mathcal{O}(T^4) \right) \,.$$

Das Chemische Potenzial sinkt also für wachsende Temperaturen gegenüber  $\epsilon_F$ . Analoges erhalten wir für die Energie:

$$E = \frac{3}{5} N \epsilon_F \left( 1 + \frac{5}{12} \pi^2 \left( \frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 + \mathcal{O}(T^4) \right) \,.$$

Dies ist mit Gl. 6.19 kompatibel. Daraus folgt zudem:

$$C_V = \frac{\pi^2}{2} Nk \frac{T}{T_F}, \qquad T_F = \frac{\epsilon_F}{T}.$$

Für große Temperaturen erreichen wir gemäß dem Virialsatz  $3/2k_BT$ . Dabei ist  $C_V$  für tiefe Temperaturen niedriger, da nicht alle Freiheitsgrade weit über der Fermi-Kante angeregt werden können. Analoges gilt für den **Druck**. Für die **Entropie** finden wir in Einklang mit dem 3. Hauptsatz aus der Gibbs-Duhem-Relation:

$$S = kN \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F} + \mathcal{O}(T^3) \,.$$

# 6.4.6 Bose-Einstein-Kondensation

Wir betrachten nun ein ideales Bose-Gas (der Übersichtlichkeit halber mit  $g_s = 1$ . Hier gilt im Gegensatz zu Fermionen das Pauli-Prinzip nicht. D.h. der Grundzustand lautet:

$$\langle n_{\mathbf{p}=0} \rangle_{T=0} = N$$

Nun wollen wir das Verhalten für kleine aber reale Temperaturen betrachten, d.h. wir untersuchen die sog **makroskopische Besetzung**:

$$\langle n_{\mathbf{p}=0} \rangle_{T < T_C} \propto N$$

des Grundzustandes unterhalb einer bestimmten kritischen Temperatur. Diesen Übergang nennt man Bose-Einstein-Kondensation. Wir gehen hierbei von einer **quadratischen Dispersionsrelation** aus. Es interessiert der Teilchenanteil, der im Kondensat ist, d.h.

$$n_c = \frac{\langle n_{\mathbf{p}=0} \rangle}{V} > 0 \,.$$

Dazu werden Integrale wie in 6.4.3 für N betrachtet. Diese lassen sich nicht elementar lösen, aber durch  $\zeta$ - und  $\Gamma$ -Funktionen ausdrücken. Für Temperaturen unterhalb der kritischen Temperatur erwarten wir, dass die Fugazität z = 1 ist damit n konstant bleiben kann. Man erhält:

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk} \zeta(3/2)^{-2/3} n^{-2/3} \quad \Leftrightarrow \quad \lambda_{T_C} \sim n^{-1/3}$$

Der Übergang zur Bose-Einstein Kondensation findet also an dem Punkt statt, an dem der Überlapp der Ortswellenfunktionen der einzelnen Teilchen spürbar wird, sodass quantenmechanische Effekte zu erwarten sind.

Nun ist das Problem, dass für noch kleinere Temperaturen für erhaltene Teilchendichte z > 1 gelten müsste, s.d.  $\mu > 0$  und somit  $n_B(E - \mu) < 0$  was unphysikalisch ist. Das Problem ist, dass die Zustandsdichte des thermodynamischen Limes aus 6.4.3 für **quadratische Dispersionsrelationen den niedrigsten Energiezustand** ( $\epsilon = 0$ ) aufgrund des  $g(\epsilon) \propto \sqrt{\epsilon}$  Verhaltens **nicht berücksichtigt**. Um dieses Problem zu beheben wird im Thermodynamischen Limes nun der Grundzustand separat behandelt:

$$N = \langle n_{\mathbf{p}=0} \rangle + \sum_{q, \epsilon_q \neq 0} n_V(\epsilon_q - \mu) = \underbrace{\frac{1}{z^{-1} - 1}}_{=n_c V} + \underbrace{\frac{V}{\lambda_T} f(z)}_{=n' V}.$$

Dabei ist f(z) wieder ein Integral vom bekannten Typ über Zustandsdichte und Bose-Verteilung. Des kann man natürlich auch auf das Volumen beziehen, um wieder Dichten zu erhalten. Dabei betrachten wir die Teilchendichte im Kondensat  $n_c$  und die angeregten Teilchen n'. Wir betrachten zwei Grenzfälle:

- $T > T_c$ : Im Thermodynamischen Limes für endliche Temperaturen kann  $n_c$  gegenüber n' vernachlässigt werden, da z < 1 ist und der Term somit für große V verschwindet.
- $T < T_c$ : Unterhalb von  $T_c$  kann n' nicht mehr groß genug sein, um die Konstante Gesamtanzahldichte n zu erhalten. Daher muss  $n_c = \mathcal{O}(1)$  und somit:

$$\frac{1}{z^{-1}-1} = \mathcal{O}(N) \quad \Rightarrow \quad z = 1 - \mathcal{O}(1/N) \,.$$

Das heißt man kann in obiger Gleichung annähern für n' z = 1 ansetzen, sodass unter Verwendung von  $T_c$  von oben folgt:

$$n_c = n - n' = \begin{cases} 0, & T > T_C \\ \left(1 - \left(\frac{T}{T_C}\right)^{3/2}\right) n, & T \le T_C \end{cases}.$$

Das chemische Potenzial ist dabei zunächst annähernd 0 ( $z \approx 1$ ) und wird dann im klassischen Regime negativ. Man bezeichnet in einem solchen **Phasenübergang** einen Parameter, der uns angibt, in welcher Phase wir uns befinden als **Ordnungsparameter**; hier ist er  $|\varphi| = \sqrt{n_c/n}$ .

Es handelt sich hier um einen **Phasenübergang eines nicht-wechselwirkenden** Systems! Thermodynamische Größen in der Region  $T \approx T_c$  erhält man am leichtesten über die Energie, da für diese nur die angeregten Teilchen (mit z = 1) berücksichtigt werden müssen. Erstaunlicherweise gilt für  $T \sim T_c$ :

$$C_V = 1.925 \left(\frac{T}{T_C}\right)^{3/2} Nk > \frac{3}{2}NkT$$

Die spezifische Wärme hat tatsächlich bei  $T_c$  einen Peak, der von dem Phasenübergang, d.h. durch die Zufuhr von "neuen Teilchen"<sup>9</sup> entsteht. Real messbare Effekt von Bose-Einstein Kondensation kann man z.B. bei **suprafluidem <sup>4</sup>He** beobachten. Die Effekte sind aber nicht nur auf die Kondensation zurückzuführen. Insbesondere folgen die niederenergetischen Zustände in <sup>4</sup>He einer linearen Dispersionsrealtion (ähnlich dem Debye Modell) weshalb  $C_V$  zunächst nicht mit  $T^{3/2}$  wir im idealen Fall, sondern mit  $T^3$  anwächst. Explizit konnte die Bose-Einstein Kondensation in **ultra kalten Atomgasen** untersucht werden (mehrere Nobelpreise nach 1995).

# 6.4.7 Photonengas

Wir betrachten ein freies nicht wechselwirkendes Photonengas aus quantisierten Photonen der Dispersionsrelation

$$\epsilon_{\mathbf{p}} = \omega_p \hbar = cp \,.$$

Zusätzlich betrachten wir einen weiteren Freiheitsgrad, die sog. **Helizität** (~ Polarisierung) mit den Werten  $\lambda = \pm 1^{10}$ . Unser Modell ist ein idealer Hohlraumstrahler einer Temperatur *T*, der mit dem Strahlungsfeld, oder eben Photonengas, bei allen Frequenzen wechselwirken kann. Damit lautet die kanonische Zustandssumme:

$$Z = \sum_{\{n_{\mathbf{p},\lambda}\}} \exp\left(-\beta \sum_{\mathbf{p},\lambda} \epsilon_p n_{\mathbf{p},\lambda}\right) ,$$

wobei  $n_{\mathbf{p},\lambda}$  die Besetzungszahl des Zustandes ( $\mathbf{p}, \lambda$ ) ist. Dabei können wir die Photonenanzahl selbst nicht festlegen, da durch die Wechselwirkung mit dem Hohlraumstrahler ständig Photonen emittiert und absorbiert werden. Die freie Energie ist unter Teilchenzahlschwankungen aber Minimal, also ist  $\mu = \partial F/\partial N = 0$ . Das **chemische Potenzial verschwindet** also.<sup>11</sup> Somit sind hier kanonische und großkanonische Zustandssumme identisch. Diese Summe faktorisiert, wie so oft für nicht wechselwirkende Systeme, sodass unter Verwendung der geometrischen Reihe gilt:

$$Z = Z_G = \prod_{\mathbf{p}} \left[ \frac{1}{1 - e^{-\beta \epsilon_{\mathbf{p}}}} \right]^2$$

Der Exponent 2 Stammt aus der Helizitätsentartung. Im thermodynamischen Limes unter periodischen Randbedingung erhält man wie schon in letzten Kapitel:

$$F = 2kT \sum_{\mathbf{p}} \ln\left(1 - e^{-\epsilon_p/kT}\right) = \frac{2VkT}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \ln\left(1 - e^{-\epsilon_p/kT}\right)$$

Dieses Integral lässt sich analytisch Lösen und man erhält:

$$F=\phi=-\frac{4\sigma}{3c}\,VT^4$$

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup>Neu bedeutet aus dem Kondensat, diese konnten ja vorher keine Wärme aufnehmen.

<sup>&</sup>lt;sup>10</sup>Es existierten links und rechts zirkular polarisierte Lichtwellen, bzw. zwei unabhängige Polarisationsrichtungen.

<sup>&</sup>lt;sup>11</sup>Dies gilt auch für quasi Teilchen wie Phononen, Magnonen und Plasmonen

mit der Stefan-Boltzmann-Konstante  $\sigma = \pi^2 k^4/60\hbar^3 c^2$ . Daraus folgt per Legendre-Transformation die Energiedichte und spezifische Wärmekapazität:

$$u = \frac{4\sigma}{c} T^4 \quad \Rightarrow C_V = \frac{16\sigma}{c} T^3.$$

Das ist das **Stefan-Boltzmann-Gesetz**. Allgemein gilt: **Eine Wärmekapazität**  $\propto T^3$  **beschreibt also relativistische / lineare Anregungszustände**. Da Photonen Bosonen sind, kann man nun unter der Verwendung der Bose-Einstein Verteilung die Anzahl der Moden in einem bestimmten Frequenzintervall bestimmen. Dazu betrachtet man die Einteilchen-Zustandsdichte:

$$g(p) = 2\langle n_{\mathbf{p},\lambda} \rangle V \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \quad \Rightarrow \quad g(\omega) = \frac{V}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^2 \,\mathrm{d}\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \,.$$

Dabei trägt das Photon die Energie  $\hbar\omega$ , also ist die Wahrscheinlichkeit die Mode zu  $\omega$  zu besetzen identisch mit der Energie Energiedichte bis auf einen Faktor  $\hbar\omega/V$ . Das hießt:

**Spektrale Energiedichte:** 
$$u(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}$$

Dies ist das **Plancksche Strahlungsgesetz**. Daraus erhält man als Maximum das Wiensche Verschiebungsgesetz und für  $\hbar \omega >> kT$  das klassische Rayleight-Jeans-Gesetz inklusive seiner Ultraviolettkatastrophe. Dieses erhält man auch direkt aus klassischen Überlegungen mit dem Gleichverteilungssatz. Durch Betrachtung der Energie, die in einen bestimmten Bereich abgestrahlt wird erhält man das

Schwarzkörper-Strahlungsgesetz: 
$$P = \sigma A T^4$$
.

Dabei ist P die insgesamt abgestrahlte Leistung.

# 6.4.8 Phononen

Nun wollen wir noch die Gitterschwingungen eines Kristalls untersuchen. Dazu betrachten wir in erster Näherung eine Kette aus Teilchen, die harmonisch an ihre nächsten Partner gekoppelt sind. Dann lautet der Hamiltonoperator mit der Position  $u_j$  des *j*-ten Teilchen relativ zur Gleichgewichtslage:

$$H = \sum_{j} \frac{m}{2} \dot{u}_{j}^{2} + \frac{f}{2} (u_{j} - u_{j-1})^{2}.$$

Wir verwenden wieder periodische Randbedingungen, s.d.  $u_j = u_{j+N}$ . Durch Einführung der sog. Normalkoordinaten(Impulse)  $Q_k(P_k)$ 

$$u_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikaj} Q_k , \qquad p_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikaj} P_k ,$$

mit dem Gleichgewichtsabstand a, erhält man:

$$H = \sum_{k} \left( \frac{1}{2m} P_k P_{-k} + \frac{m\omega_k^2}{2} Q_k Q_{k-1} \right)$$

mit der Dispersionsrelation

$$\omega_k = 2\sqrt{\frac{f}{m}} \left| \sin ka/2 \right|.$$

Dabei ist k zwischen  $-\pi/a$  und  $\pi/a$  eingeschränkt, da aufgrund der periodischen Randbedingungen  $\exp(ikaN) = 1$  gelten muss. Dadurch erhalten wir N-Moden in der Kette.

## Quantenmechanik

Ausgehend von dieser klassischen Beschreibung fassen wir jetzt die Variablen  $u_j$  und  $p_j$ als Operatoren auf, wobei sie die Vertauschungsrelation  $[u_j, p_l] = i\hbar \delta_{jl}$ , woraus folgt:

$$[Q_k, P'_k] = i\hbar \delta_{k,-k'}, \qquad [Q_k, Q_{k'}] = [P_k, P_{k'}] = 0.$$

Dabei ist  $Q_k^{\dagger} = Q_{-k}$  und  $P_k^{\dagger} = P_{-k}$ . Wie schon beim Harmonischen Oszillator kann man die  $Q_k$  und  $P_k$  durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken:

$$Q_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k m}} (a_k + a_{-k}^{\dagger}), \qquad P_k = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_k m}{2}} (a_k - a_{-k}^{\dagger})$$

woraus die kanonische Form des Hamiltonoperators folgt:

$$H = \sum_{k} \hbar \omega_k \left( n_k + \frac{1}{2} \right) , \qquad n_k = a_k^{\dagger} a_k .$$

Dabei erfüllen die Erzeuger und Vernichter:  $[a_k, a_{k'}^{\dagger}] = \delta_{kk'}$  und  $[a_k, a_{k'}] = [a_k^{\dagger}, a_{k'}^{\dagger}] = 0$ . Die **Normalmoden sind unabhängig** voneinander. Die Anregungszustände der Normalmoden mit der Energie  $\epsilon_p = \hbar \omega_k$  fasst man nun als **Quasiteilchen**, sog. **Phononen**, die eine innere Eigenschaft des Gitters sind, auf. Es lässt sich für ein Ensemble von harmonischen Oszillatoren zeigen, dass (relativ zur Nullpunktsenergie) gilt:

$$E = \sum_{k} \hbar \omega_{k} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_{k}}{kT}\right) - 1} = \sum_{\mathbf{p}} \epsilon_{\mathbf{p}} n(\epsilon_{\mathbf{p}}).$$

Diese Methode nennt man auch die **kanonische Quantisierung**. In **drei Dimensionen** ergebe sich komplizierteres Modenverhalten:

# Es gibt 3 akustische und 3(r-1) optische Zweige / Moden für einen Kristall von r Atomen pro primitiver Einheitszelle. Insgesamt gibt es 3N Schwingungsmoden.

#### **Debye Modell**

Das Debye Modell liefert eine Näherung solche Systeme bei kleinen Temperaturen zu betrachten. Dazu nehmen wir eine lineare Dispersion (also nur akustische Zweige) von  $\omega_k = c_s k$  mit der Schallgeschwindigkeit  $c_s$  an. Da die Anzahl an Moden auf 3N limitiert ist, muss es eine Abschneidefrequenz (Debye-Frequenz)  $\omega_D$  geben für die gilt:

$$3\int_0^{\omega_D} g(\omega) \,\mathrm{d}\omega = 3N \quad \Leftrightarrow \quad \omega_D = (6\pi^2 n)^{1/3} c_s$$

Dabei ist die Annahme einer Zustandsdichte von  $g(\omega) = V\omega^2/2\pi^2 c_s^3$ , also für lineare Dispersion ist natürlich eine recht grobe Näherung. Für die Energie erhält man, erneut relativ zur Nullpunktsenergie:

$$E = \frac{3Vk_B^4}{2\pi^2 c_s^3 \hbar^3} T^4 \int_0^{x_D} \frac{x^3}{e^x - 1} \,\mathrm{d}x \,, \quad x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$$

und  $x_D = x(\omega_D)$ .

• Für niedrige Temperaturen lässt man  $x_D \to \infty$  und erhält:

$$E \propto T^4$$
,  $C_V \propto T^3$ .

• Für hohe Temperaturen nähern wir im Integrand  $e^x \approx 1 + x$  und erhalten:

$$E \approx 3NkT$$
,  $C_V = 3Nk_D$ ,

was auch der Gleichverteilungssatz ergeben hätte (3 Schwingungs- und 3 Translationsfreiheitsgrade).

## **Einstein Modell**

Das Einstein Modell nimmt noch einfachen an, dass es nur eine einzige Mode im System gibt, aus der sich die Energie sofort ergibt. Dadurch sinkt die spezifische Wärmekapazität noch stärker ab, da die Anregung bei niedrigerer Temperatur nicht nur algebraisch, sondern **exponentiell unterdrückt** wird. Solche Phänomene der exponentiellen Unterdrückung der **Responsefunktionen** nennt man **aktiviertes Verhalten**. Dies tritt immer auf, wenn in einem System **Anregungslücken** existieren.

## 6.4.9 Phasenübergänge

Wie bereits bei der Bose-Einstein Kondensation und beim klassischen realen Gas angesprochen gibt es in der statistischen Betrachtung der Physik sog. Phasenübergänge. Ein weiteres Beispiel ist der Magnetismus, in dem die ferromagnetische Phase durch die parallele Ausrichtung der Spins erzeugt wird. Solche Phasenübergänge können zudem mit einer sog. **spontanen Symmetriebrechung** einhergehen. Auch die Supraleitung kann man als Phasenübergang, bzw. eigene Phase beschreiben.

## Spontane Symmetriebrechung

Ein einfach zu verstehendes Beispiel hierfür ist das Ising Modell, bei dem der Hamiltonoperator die Spin-Spin Wechselwirkung enthält:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \cdot \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \,.$$

Dieser Operator ist isotrop, d.h. es gibt keine bevorzugte Ausrichtung. In der ferromagnetischen Phase, d.h. unterhalb einer bestimmten Grenztemperatur (vgl. Bose-Einstein Kondensation) gibt es aber große Bereiche (Weis'sche Bereiche) in denen die Spins parallel in eine bevorzugte Richtung ausgerichtet sind. Da diese Richtung beim Phasenübergang zufällig gewählt wird, nennt man dies auch spontan. Die Symmetrie ist dann insofern gebrochen als der Grundzustand, bzw. der ferromagnetische Zustand, eine Vorzugsrichtung hat, obwohl der Hamilton-Operator diese nicht aufweist.

## Ordnungsparameter

Als Ordnungsparameter versteht man eine Größe, die in der geordneten Phase einen endlichen Wert annimmt und der in der ungeordneten Phase verschwindet. Bei der Bose-Einstein Kondensation ist dieser z.B.  $n_C/n$ , beim Magneten die Magnetisierung

$$\mathbf{M} = -\left\langle \frac{\partial H}{\partial \mathbf{B}} \right\rangle.$$

Die zugehörige Antwort-Funktion, die die Änderung der Magnetisierung mit der Energie beschreibt, ist die sog. Magnetische Suszeptibilität

$$\chi_X = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_X,$$

wobei X z.B. die Temperatur oder der Druck sein kann. Solche Antwort-Funktionen sind **2te-Ableitungen der thermodynamischen Potenziale**.

Entwickelt sich der Ordnungsparameter unterhalb von  $T_C$  stetig, so spricht man von einem Phasenübergang zweiter oder höherer Ordnung, entwickelt er sich unstetig von einem Phasenübergang erster Ordnung.

Übergangsordnungen: Man nennt einen Phasenübergang *n*-ter Ordnung, wenn das verwendete thermodynamische Potenzial eine Unstetigkeit in der *n*-ten Ableitung hat.

Daraus folgen die beiden obigen Fälle. Allgemein gilt also für Phasenübergänge:

**Verhalten der thermodynamischen Potenziale beim Phasenübergang:** Das verwendete thermodynamische Potenzial zeigt beim Phasenübergang ein nicht-analytisches<sup>12</sup> Verhalten.