

Vier allgemeine Forderungen von Schrödinger (1926) an jedwede Quantisierung:

- 1) Die Quantengleichung sollte die Quantenbedingungen in sich selbst tragen (Quantisierung als Eigenwertproblem. *Zweite Mitteilung*, S. 511), das heißt, unabhängig von den Randbedingungen.
- 2) Es sollte spezielle mathematische Lösungsmethoden für Differentialgleichungen vom Typ der stationären Schrödinger-Gleichung geben, die dem nicht-klassischen Charakter des Quantisierungsproblems Rechnung tragen (ebda., S. 513), mithin verschieden von den klassischen Berechnungsmethoden für stehende Wellen sind.
- 3) Die Ableitung sollte eindeutig ergeben, dass die Energie- und nicht die Frequenzwerte diskretisiert werden (ebda., SS. 511, 519), denn Frequenz-Diskretisierung ist eine klassische Erscheinung.
- 4) Die Verwendung der klassischen Ausdrücke für die potenzielle und für die kinetische Energie sollte gerechtfertigt werden (*Vierte Mitteilung*, S. 113).

Der hier beschriebene neuartige Zugang erfüllt alle diese Forderungen Schrödingers und leistet nicht zuletzt deshalb u. a. folgendes Neue:

- Gegenstand der Quantenmechanik sind Systeme, die auch Konfigurationen einnehmen können, in denen die potenzielle Energie größer ist als die Gesamtenergie.
- Quantenmechanische Zustands-, Zustandsänderungs- und Bewegungsgleichungen können formuliert werden, ohne den Welle-Teilchen-Dualismus u. ä. zu postulieren.
- Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r},t)$ repräsentiert die Ausdehnung eines quantenmechanischen Systems, ihr Absolutbetrag $|\psi(\mathbf{r},t)|$ beschreibt die Art und Weise seiner Raumeinnahme; ihre Fourier-Transformierte $\psi(\mathbf{p},t)$ erledigt das gleiche im Impulsraum. Infolgedessen unterliegt die gleichzeitige Messung von Ort und Impuls im klassisch-mechanischen Sinne (!) der Unschärferelation.
- Die Potenzialbarriere für ein Quantenteilchen ist stets kleiner als die Gesamtenergie, das entmystifiziert den Tunneleffekt.
- Die Symmetrie-Eigenschaften von $|\psi(\mathbf{r},t)|$ folgen aus der Zustandsbeschreibung nach Euler und Helmholtz ohne neue Postulate, man gelangt auf natürliche Weise zu den Anyonen sowie zur geometrischen Phase und Eichinvarianz.

Von der klassischen Physik zur Quantenphysik

Peter Enders

Von der klassischen Physik zur Quantenphysik

Eine historisch-kritische deduktive Ableitung
mit Anwendungsbeispielen aus der Festkörperphysik

Mit 10 Abbildungen

Dr. sc. nat. Peter Enders
Fischerinsel 2
10179 Berlin
E-mail: enders@dekasges.de

ISBN-10 3-540-25042-5 Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York

ISBN-13 978-3-540-25042-5 Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York

Bibliografische Information der Deutschen Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie;
detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <<http://dnb.ddb.de>> abrufbar.

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdrucks, des Vortrags, der Entnahme von Abbildungen und Tabellen, der Funksendung, der Mikroverfilmung oder der Vervielfältigung auf anderen Wegen und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen, bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten. Eine Vervielfältigung dieses Werkes oder von Teilen dieses Werkes ist auch im Einzelfall nur in den Grenzen der gesetzlichen Bestimmungen des Urheberrechtsgesetzes der Bundesrepublik Deutschland vom 9. September 1965 in der jeweils geltenden Fassung zulässig. Sie ist grundsätzlich vergütungspflichtig. Zuwiderhandlungen unterliegen den Strafbestimmungen des Urheberrechtsgesetzes.

Springer ist ein Unternehmen von Springer Science+Business Media.

springer.de

© Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2006
Printed in Germany

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Satz und Herstellung: PTP-Berlin, Protago-TeX-Production GmbH, Berlin
Einbandgestaltung: *design & production* GmbH, Heidelberg

Gedruckt auf säurefreiem Papier SPIN: 11316442 57/3141/YU - 5 4 3 2 1 0

Für Galina Nurtasinowa

Vorwort

Die Naturlehre ist eine Wissenschaft, die Ursachen der Veränderungen, welche sich an den Körpern ereignen, zu ergründen. Wo eine Veränderung vorgeht, da muss auch eine Ursache sein, welches diese hervorbringt, weil gewiss ist, dass nichts ohne einen zureichenden Grund geschehen kann. Wer also den Grund anzeigen kann, warum eine Veränderung vorgegangen, der erkennt die Ursache derselben, und leistet dadurch dem Endzweck der Naturlehre ein Genügen.

(L. Euler, 1750¹)

Das dynamische Gleichgewicht der Systeme in den stationären Zuständen kann mit Hilfe der gewöhnlichen Mechanik beschrieben werden, während der Übergang der Systeme zwischen verschiedenen stationären Zuständen nicht auf dieser Grundlage behandelt werden kann.

(N. Bohr, 1913²)

Die Formulierung der Grundsätze der Quantentheorie ist prinzipiell unmöglich, ohne die klassische Mechanik heranzuziehen. ... Die Quantenmechanik nimmt also eine sehr eigenartige Stellung unter den physikalischen Theorien ein: Sie enthält die klassische Mechanik als Grenzfall und bedarf gleichzeitig dieses Grenzfalls zu ihrer eigenen Begründung.

(L. D. Landau & E. M. Lifschitz, 1966³)

¹ Leonhard Euler (1707-1783), *Anleitung zur Naturlehre*, § 1. – Diese erst posthum erschienene grundlegende Arbeit scheint weitgehend unbekannt zu sein und wird in den Werken von Mach (*Die Mechanik in ihrer Entwicklung*, 1988), Dugas (*A History of Mechanics*, 1955) und Jammer (*Concepts of Force*, 1957; *Concepts of Mass*, 1961; *Concepts of Space*, 1993) nicht erwähnt. Jedoch enthält sie die *axiomatische Vollendung* der Newtonschen Mechanik, aus der sich Hydromechanik, Mechanik des starren Körpers, spezielle Relativitätstheorie und Quantenmechanik entwickeln lassen. Dagegen kann die Newtonsche Mechanik höchstens uminterpretiert, nicht aber systematisch verallgemeinert werden (vgl. Heisenberg, *Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen*, 1925).

² Niels Hendrik Bohr (1885-1962, Nobelpreis 1922), *Über den Aufbau der Atome und Moleküle*, 1913 (zit. nach D. ter Haar, *Quantentheorie*, 1970, S.175). – Diese „erste Voraussetzung“ ist methodisch weitaus wichtiger als seine berühmten Postulate.

³ Lew Dawidowitsch Landau (1908-1968, Nobelpreis 1962) & E. M. Lifschitz (1917-1969), *Quantenmechanik*, 1966, S.2f. Diese „eigenartige Stellung“ zu erklären, ist ein Hauptziel dieses Buches.

Die theoretische Grundlage der modernen Kern-, Elementarteilchen- und Festkörperphysik ist die Quantenfeldtheorie. Das Verständnis der Quantenfeldtheorie setzt das der Quantenmechanik voraus. Die Quantenmechanik ihrerseits kann ohne die Klassische Mechanik nicht verstanden werden. Das Ziel dieses Buches besteht deshalb in einer anschaulichen und in sich konsistenten Darstellung des *Weges* von den Prinzipien der Klassischen Mechanik über die der Quantenmechanik zu denen der Quantenfeldtheorie. Der formale Apparat wird anhand von Anwendungen aus der Festkörperphysik illustriert.

Unter *Quantenmechanik* verstehen wir die Heisenbergsche Matrizenmechanik, die Schrödingersche Wellenmechanik und weitere mathematisch äquivalente Theorien, wie die Feynmansche Wegintegral-Darstellung. Zur *Quantentheorie* als Theorie-Teil der Quantenphysik gehören neben der oben erwähnten Quantenmechanik vor allem die Quantenfeldtheorie und die Quantenstatistik. Wir werden uns auf die nichtrelativistische Theorie beschränken.

Deduktiv meint, dass typische Begriffe der Quantentheorie: namentlich das Plancksche Wirkungsquantum, der Welle-Teilchen-Dualismus, eine Wellengleichung, die Ununterscheidbarkeit oder die Heisenbergsche Unschärfrelation, *nicht* vorausgesetzt beziehungsweise *ad-hoc* eingeführt, sondern aus geeigneten Verallgemeinerungen der *klassischen systematisch entwickelt* werden. Hierbei werden, anknüpfend an Newtons Grundlegung der Klassischen Mechanik in den *Principia*, insbesondere die Beiträge von Euler zur Axiomatik der Klassischen Mechanik und die von Helmholtz zum Energieerhaltungssatz und zu den Konfigurationen mechanischer Systeme herangezogen. Diese Beiträge enthalten Begriffsanalysen und -bildungen zum *Zustand* mechanischer Systeme und zu den *Erhaltungssätzen*, die weit über die Klassische Mechanik hinausweisen. Dank dessen ermöglichen sie es nicht nur, das Verhältnis von Klassischer und Quantenmechanik besser zu verstehen, sondern sogar die Quantenmechanik selbst in einer *völlig neuartigen* Weise aus der Klassischen Mechanik abzuleiten. Das heißt auch, dass Erweiterungen beziehungsweise Verallgemeinerungen der Klassischen Mechanik *allein* dort vorgenommen werden, wo diese *selbst* aufgrund ihrer innewohnenden Beschränkungen Anlass dazu gibt.

Oftmals wird die Verbindung zwischen klassischen und quantenmechanischen Größen durch das Korrespondenzprinzip bestimmt. Dieses gilt allerdings nur für große Quantenzahlen. Es ist daher wünschenswert, eine Verbindung für *beliebige* Quantenzahlen herzustellen. Außerdem liefert es eine eher heuristische Berechtigung für die Verwendung der klassischen Funktionen für die potentielle und kinetische Energie in der Quantenmechanik, weshalb auch der Welle-Teilchen-Dualismus und der Tunneleffekt mysteriös bleiben.

In den meisten Texten zur Quantenmechanik wird primär der *Unterschied* zur klassischen Theorie hervorgehoben. Die vorliegende Darstellung betont dagegen die *Gemeinsamkeiten* beider und geht *allein* von den klassischen Begriffen aus. Die quantentheoretischen Begriffe werden konsequent auf diejenigen Grundbegriffe und Grundgesetze zurückgeführt, die bereits das Fundament der klassischen Theorie bilden. Unter diesen Begriffen spielen der Zustandsbe-

griff und die Erhaltungssätze eine hervorgehobene Rolle, weil ihr grundlegender physikalischer Inhalt in allen nicht-klassischen Theorien erhalten bleibt.

Es erscheint insbesondere vonnöten zu sein, die Beziehungen zwischen den klassischen und den quantenmechanischen *Begriffen* (stationärer) Zustand, Zustandserhaltung und -veränderung, Bewegung u.s.w. zu klären und mathematisch zu formulieren. Zum Beispiel ist es üblich zu sagen, dass „ein quantenmechanisches Teilchen keinen bestimmten (Aufenthalts-)Ort“ besitze. Besitzt es deshalb gar keinen Ort? Was ist überhaupt ein *Teilchen*? In der Klassischen Mechanik spricht man von *Körpern* ... – die Probleme der Interpretation der Quantenmechanik haben offenbar auch damit zu tun, dass selbst dort verschiedene Begriffssysteme benutzt werden, wo dies nicht notwendig ist, weil *gemeinsame* Begriffe wie die oben genannten *bereits vorhanden* sind. Stellt man beispielsweise die Zustands- bzw. Erhaltungsgrößen auf geeignete Weise dar, so lassen sich nicht nur die Prinzipien der Zustandserhaltung (wie der Energiesatz), sondern sogar die Prinzipien der Zustandsveränderung von der Klassischen auf die Quantenmechanik übertragen.

Dank dessen hat der hier dargestellte Zugang zur Quantenmechanik die erfreuliche Konsequenz, dass es *nicht* erforderlich ist, die Quantentheorie bereits verstanden zu haben, um den Übergang von der Klassischen zur Quantenmechanik nachzuvollziehen; es genügt allein die Kenntnis jener. Dadurch können bestimmte Annahmen, die zwar durch experimentelle Befunde nahegelegt, durch die axiomatischen Grundlagen aber durchaus nicht gestützt werden, entfallen. Es geht, schlicht gesagt, darum, die Grundstrukturen zu verstehen und nicht als Voraussetzung einfach hinzunehmen (Bopp, 1976).

Von den drei ursprünglichen Aufgaben der Quantenmechanik als Atommechanik:

1. Erklärung der Stabilität der Atome,
2. Erklärung der Diskretheit der Atomspektren,
3. Berechnung der Intensitäten der Spektrallinien,

betreffen zwei die stationären Zustände und die Erhaltungsgrößen. Auch dies legt es nahe, von den Erhaltungssätzen statt von den Bewegungsgleichungen auszugehen, da letztere keine Erhaltungsgrößen enthalten. Dies wird in diesem Buch auf eine neuartige Weise durchgeführt.

Die stationäre Schrödinger-Gleichung ergibt sich von selbst als eine Zustandsgleichung für Quanten-Systeme. Der entscheidende Unterschied zwischen klassischen und quantenmechanischen Systemen wird durch ein *Auswahlproblem* bezüglich der möglichen Konfigurationen eines Systems definiert, siehe Abb. 0.1.

Dank dessen können vier bereits von Schrödinger 1926 benannte *Forderungen an jedwede Quantisierung* erfüllt werden:

1. Die Quantengleichung sollte die Quantenbedingungen *in sich selbst* tragen (*Zweite Mitteilung*, S.511), das heißt, strenggenommen, unabhängig von den Randbedingungen. Denn Schrödingers Quantenbedingungen „als Anfangs- oder Randbedingungen“ (*Ebda.*) sind – ähnlich den de Broglie-

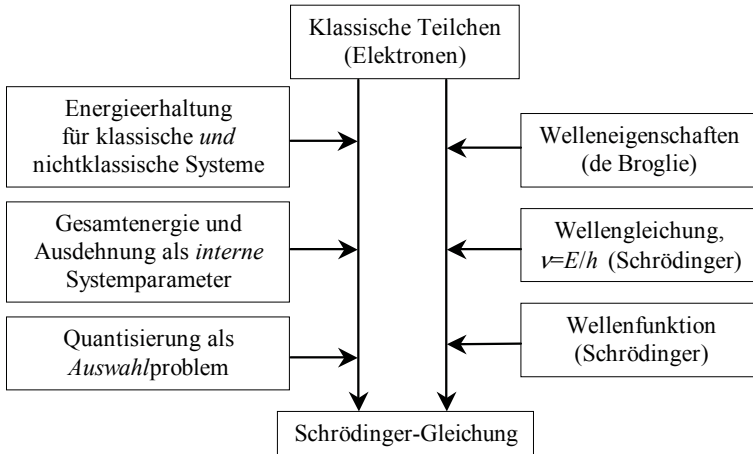


Abb. 0.1. Ableitung der Schrödinger-Gleichung. *Rechte Seite:* nach Schrödinger (Eigenwertproblem); *linke Seite:* vorliegender Zugang

schen Quantenbedingungen, in denen Bohrs „Quantenbahnen“ als stehende Wellen interpretiert werden – zu einem großen Teil *klassisch-mechanische* Randbedingungen.

2. Es sollte spezielle mathematische Lösungsmethoden für Differentialgleichungen vom Typ der stationären Schrödinger-Gleichung geben, die dem *nicht*-klassischen Charakter des Quantisierungsproblems Rechnung tragen (*Ebda.*, S.513), mithin verschieden von den klassischen Berechnungsmethoden für die stehenden Wellen von Saiten, Resonatoren u.s.w. sind.
3. Die Ableitung sollte eindeutig ergeben, dass die Energie- und nicht die Frequenzwerte diskretisiert werden (*Ebda.*, SS.511, 519). Ersetzt man nämlich nicht $h\nu$ durch E , sondern E durch $h\nu$, so erhält man für die zeitunabhängige Gleichung $H\psi = h\nu\psi$, wodurch primär die Frequenz ν diskretisiert wird; Frequenz-Diskretisierung ist jedoch eine *klassisch-mechanische* Erscheinung.
4. Die Verwendung der *klassischen* Ausdrücke für die potenzielle und für die kinetische Energie sollte gerechtfertigt werden (*Vierte Mitteilung*, S.113).

Diese Begründung der Quantenmechanik aus der Klassischen Mechanik leistet außerdem folgendes Neue:

- Als Gegenstand der Quantenmechanik werden diejenigen Systeme bestimmt, die *auch* Konfigurationen einnehmen *können*, in denen die potenzielle Energie *größer* ist als die Gesamtenergie. Diese Gegenstandsbestimmung ist präziser als „Mikroobjekte“, weil bei letzterer die Bestimmung von „klein“ unklar bleibt.
- Die quantenmechanischen Zustands-, Zustandsänderungs- und Bewegungsgleichungen können im Eulerschen Sinne analog zu denen der Klassischen Mechanik angegeben werden, *ohne* irgendwelche spezifischen Eigenschaf-

ten der quantenmechanischen Systeme, wie den Welle-Teilchen-Dualismus, zu postulieren.

- Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ repräsentiert die Ausdehnung eines quantenmechanischen Systems, ihr Absolutbetrag $|\psi(\mathbf{r}, t)|$ beschreibt die Art und Weise seiner Raumeinnahme [in stationären Zuständen ist $|\psi(\mathbf{r}, t)|$ zeitunabhängig]. Ihre Fourier-Transformierte $\phi(\mathbf{p}, t)$ erledigt das gleiche im Impulsraum. Infolgedessen ist eine kleine Ausdehnung im Ortsraum mit einer großen Ausdehnung im Impulsraum verknüpft, und umgekehrt. Damit zeichnet sich hier schon ab, dass die gleichzeitige Messung von Ort und Impuls (im klassisch-mechanischen Sinne!) gewissen Einschränkungen unterliegt.
- Die Rolle der klassischen kinetischen und potenziellen Energie wird modifiziert. Die für ein Quantenteilchen *effektive* Potenzialbarriere ist stets *kleiner* als die Gesamtenergie. Das entmystifiziert den Tunneleffekt
- Die Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktion können aus denen des Hamilton-Operators abgeleitet werden, *ohne* Symmetrie-Postulate aufzustellen. Derartige Postulate neigen dazu, nur die bis dahin bekannten Tatsachen zu umfassen und dadurch Verallgemeinerungen zu behindern. So ging man vor der Entdeckung der Anyonen davon aus, dass es nur permutationssymmetrische (Bosonen) und -antisymmetrische Wellenfunktionen (Fermionen) gibt. Gewisse Invarianz-Eigenschaften von $|\psi(\mathbf{r}, t)|$ führen auf natürliche Weise zu den Konzepten geometrische Phase und Eichinvarianz der Schrödinger-Gleichung.

Weitere Vorteile dieses Zuganges für die Statistische Physik ergeben sich aus der konsequenten Anwendung des Newton-Eulerschen Zustandsbegriffes im Text.

Der für die *Ableitung* der quantenmechanischen Grundgleichungen erforderliche mathematische Apparat umfasst lediglich die Methoden der Differential- und Integralrechnung, wie sie in den ersten Semestern eines naturwissenschaftlichen Studiums vermittelt werden, ja in weiten Teilen sogar im Standardprogramm des gymnasialen Oberstufenunterrichts enthalten sind, während kompliziertere mathematische Hilfsmittel erst bei ihrer Anwendung, d. h. bei der Lösung einer (partiellen) Differentialgleichung herangezogen werden müssen. Dieser Umstand ermöglicht es, die Argumentation nicht nur in physikalischer, sondern auch in mathematischer Hinsicht derart nachvollziehbar zu halten, dass neben den SpezialistInnen ein sehr breiter LeserInnenkreis angesprochen ist. Der quantenfeldtheoretische Formalismus wird so eingeführt, dass an dieses Wissen beim Studium der weiterführenden Literatur nahtlos angeknüpft werden kann.⁴ Wir konzentrieren uns hierbei auf

⁴ Für die Einführung in die Quantenfeldtheorie anhand von Beispielen aus der Festkörperphysik empfehlen sich neben Haken, *Quantenfeldtheorie des Festkörpers*, 1973, auch Stone, *The Physics of Quantum Fields*, 2000, und, als anspruchsvollere Darstellung exakter Methoden, Tselik, *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*, 1996.

die Besetzungszahl-Darstellung, weil diese erfahrungsgemäß am leichtesten nachvollziehbar ist. In ihr wird die Bewegung im $3N$ -dimensionalen Konfigurationsraum auf die Bewegung im gewöhnlichen 3-dimensionalen Ortsraum zurückgeführt (vgl. Jordan, 1947, S.99).

Zur Fachliteratur im weiteren Sinne gehören nicht zuletzt die historischen Quellen, auf die im laufenden Text extensiv verwiesen wird. Damit seien nicht nur die Spezialist(inn)en und die historisch interessierten Leser(innen) angesprochen, sondern vor allem die alte Erfahrung weitergegeben, dass das Studium der Originalliteratur durch nichts zu ersetzen ist (Maxwell, 1891, S. xi). Es werden viele Erkenntnisse der Mechanik des 17. bis 19. Jahrhunderts besprochen, die in heutige Darstellungen nicht mehr eingehen, obwohl sie enorm wichtig für das Verständnis des Verhältnisses von Klassischer Mechanik und Quantenmechanik sind. Besonderer Wert wird auf die Klarheit der Begriffe gelegt, weil im Mangel derselben eine Hauptursache für die konzeptionellen Schwierigkeiten gesehen wird.

Diese Darstellung der Verbindungen zwischen Klassischer und Quantenmechanik richtet sich nicht zuletzt an Lehramtskandidat(inn)en und Lehrer(innen) in der Weiterbildung: muss doch die Scheu vor der Quantenphysik zuvörderst in der Schule genommen werden.

Die Beispiele aus der Festkörperphysik stammen einerseits aus Vorlesungen und Übungen, die an der Brandenburgischen Technischen Universität Cottbus für Physik- und Mathematik-Student(inn)en im 8. Semester gehalten wurden, – andererseits aus der eigenen Forschungstätigkeit. Die überwiegend experimentell orientierten Student(inn)en wurden mit Grundbegriffen und -modellen der Quantenfeldtheorie und ihrer Anwendung in der Festkörperphysik vertraut gemacht, weil diese Theorie für das Verständnis der Eigenschaften einer großen Materialklasse von Bedeutung ist, welche unter anderem die Grundlage für die gegenwärtig hochaktuelle Nanophysik bildet.⁵ Viele Mechanismen können an sehr einfachen Modellen demonstriert werden, namentlich am harmonischen Oszillator und an der linearen Kette von Federschwingern (Gitterschwingungen – Phononen), an den Bloch-Elektronen sowie an den Löchern in Halbleitern. Außerdem wurden die wichtigsten Wechselwirkungen, nämlich die zwischen Elektronen und Phononen (Polaronen), die zwischen den Elektronen (Excitonen, Korrelationen) sowie die zwischen Elek-

⁵ Viele Modellsysteme aus gar nicht so alten Physik-Lehrbüchern kann man in der praktischen Realisierung wieder finden. Makroskopische Festkörper lassen sich in einem bestimmten, ebenfalls makroskopischen Ordnungszustand und mit bestimmten gewünschten Eigenschaften aus ihren atomaren und molekularen Einheiten maß schneiden, indem man in speziellen Anlagen Schicht für Schicht, Atomlage für Atomlage oder sogar Atom für Atom mittels Molekularstrahlepitaxie aufträgt (Alferov 2000; Bimberg, Grundmann & Ledentsov, 2003; Fahrner, 2005; Ilfrich, 2003; Kalt & Hetterich, 2004; Seeger, 2004). Seit dem Triumphzug der Mikroelektronik und Informationstechnologie arbeitet die Mehrzahl der Physiker auf dem Gebiet der Festkörperphysik, und von diesen die Mehrzahl in der Halbleiterphysik.

tronen und Photonen (Polaritonen) besprochen. Wegen der aktuellen Bedeutung der Optoelektronik für die Informations- und Kommunikationstechnik wurde in den vorliegenden Text die Beschreibung *neuer* Effekte aufgenommen, die durch die oft vernachlässigte Hybrid-Wechselwirkung zwischen Elektronen und Löchern in GaAs-ähnlichen Halbleitern entstehen. Nicht zuletzt an diesem Beispiel wird deutlich, dass auch kompliziertere Wechselwirkungsprozesse oft mit relativ einfachen Mitteln durchgerechnet werden können. Die Materialzusammenstellung integriert methodische Erfahrungen auch aus der Quantenchemie, Laser- und Transporttheorie.

Die anspruchsvolleren Abschnitte, die bei einem ersten Lesen übergangen werden können, ohne das Verständnis der meisten darauffolgenden zu beeinträchtigen, sind mit * gekennzeichnet. Einen * tragen auch die Aufgaben für fortgeschrittenere Leser(innen); ein Teil von ihnen soll zum selbständigen Forschen anregen. In beiden Fällen betrifft es naturgemäß die Fragestellungen, bei denen es anfängt spannend zu werden ...

Mein Dank gebührt allen, die jene Vorlesung unterstützt haben, insbesondere Prof. Th. Elsässer (Max-Born-Institut, Berlin) und Prof. E. Siegmund (Brandenburgische Technische Universität Cottbus). Dr. R. Müller hat das Vorlesungs-Skript (die Urform des vorliegenden Textes) kritisch gelesen. Viele nützliche Hinweise und Anregungen verdanke ich den Diskussionen mit Dr. M. Altaisky, Prof. Y. Dabaghian, Dr. M. Daumer, Dr. K. Ellmer, Dr. D. Fairly, Prof. L. Fritsche, Prof. W. Greiner, H. Hille, Prof. J. Keller, Prof. J. R. Klauder, Prof. H. Kröger, Dr. Th. Krüger, Prof. H. Lübbig, Prof. M. Matone, Prof. S. N. Mayburow, Prof. J. G. Muroz, Prof. G. Nimtz, Prof. Harry Paul, Dr. Th. Pöschel, Prof. W. P. Schleich, Prof. J. Schnakenberg, Prof. J. Schröter, Dr. W. Smilga, Dr. E. Stefanovich, Dr. L. Teufel, Dr. R. Tomulka, Prof. H. Tributsch, Dr. W. Tuschik, Dr. M. Vogt und Prof. R. F. Werner. Der Deutschen Akademie der Naturforscher Leopoldina danke ich für die Vergabe eines Förderpreises. Mein ganz besonderer Dank gilt Dr. Dr. D. Suisky, der mir die Darstellungen der Klassischen Mechanik von Euler und Helmholtz nahe brachte und mit dem die wichtigsten Schritte bei der Ableitung der Ein-Teilchen-Schrödinger-Gleichung gemeinsam erarbeitet wurden⁶.

Die Zusammenarbeit mit dem Verlag war in jeder Hinsicht erfreulich. Dr. C. Ascheron und Dr. A. Lahee haben wesentlich zur Publikation des Textes in dieser Form beigetragen, F. Holzwarth hat alle TeX-Probleme geduldig gelöst.

Meine Frau hat das Vergnügen der Ausarbeitung der Vorlesung und dieses Textes nebst der damit verbundenen „Mühen des Begriffs“ mit mir geteilt.

Berlin, Juni 2006

Peter Enders

⁶ Suisky & Enders, *Leibniz' foundation of mechanics and the development of 18th century mechanics initiated by Euler*, 2001; Dies., *On the derivation and solution of the Schrödinger equation. Quantization as selection problem*, 2003; Enders & Suisky, *Über das Auswahlproblem in der klassischen Mechanik und in der Quantenmechanik*, 2003; Dies., *Quantization as selection problem* (eingereicht).

Inhaltsverzeichnis

1	Warum Quantentheorie? Festkörperphysikalische Aspekte .	1
1.1	Problemstellung	1
1.2	Die Quantentheorie der spezifischen Wärme nach Einstein	3
1.3	Warum Quantenfeldtheorie des Festkörpers?	4
2	Zu den Beziehungen zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik	7
3	Grundbegriffe der klassischen Mechanik	13
3.1	Newtons Darstellung der klassischen Mechanik	13
3.1.1	Die Prinzipien der Newtonschen Mechanik	14
3.1.2	Der lineare ungedämpfte harmonische Oszillator nach Newton, Lagrange und Hamilton	18
3.1.3	Erzwungene Schwingungen durch eine zeitabhängige äußere Kraft	25
3.1.4	Erzwungene Schwingungen durch parametrische Anregung	26
3.1.5	Beispiel: Gekoppelte Oszillatoren – Gitterschwingungen	26
3.2	Eulers Darstellung der Klassischen Mechanik	30
3.2.1	Die Körper und ihre allgemeinen Eigenschaften – Eulers Ausschließungsprinzip	32
3.2.2	Zustandserhaltung. Die Eulerschen Axiome	33
3.2.3	Eulers Weltmodelle *	34
3.2.4	Zustandsänderungen I. Der Zuwachs der Geschwindigkeit. Eulers Hauptprinzip der Zustandsänderung	35
3.2.5	Zustandsänderungen II. Der Zuwachs des Quadrates der Geschwindigkeit: Lebendige Kraft und Wirksamkeit	36
3.2.6	Eulers Methode der Maxima und Minima I. Das Prinzip der kleinsten Wirkung *	38
3.3	Konservative Systeme	39
3.3.1	Die Erhaltung der Energie nach Helmholtz	40
3.3.2	Die Axiome der Zustandserhaltung	43
3.3.3	Arbeit und Arbeitsvorrat – Der Absolutwert der Energie	44

3.3.4	Der Zusammenhang zwischen Energie und Ausdehnung	45
3.3.5	Eulers Methode der Maxima und Minima II. Interne und externe Systemparameter	47
3.3.6	Mögliche und nicht mögliche Konfigurationen	48
3.4	Anwendung der Eulerschen Prinzipien der Zustandsänderung auf konservative Systeme	50
3.4.1	Die Prinzipien der Zustandsänderung für die Körper	50
3.4.2	Die Prinzipien der Zustandsänderung für konservative Systeme	51
3.4.3	Separation der internen und externen Parameter am Beispiel des harmonischen Oszillators *	54
4	Von der Klassischen Mechanik zur Quantenmechanik	57
4.1	Schrödingers Ableitung der Wellengleichung	58
4.2	Quantisierung als Auswahlproblem I. Voraussetzungsfreie Ableitung der stationären Schrödinger-Gleichung	61
4.2.1	Problemstellung	61
4.2.2	Die Beziehung zwischen Klassischer und Quantenmechanik als Auswahlproblem	62
4.2.3	Systeme mit unbeschränkten (Impuls-)Konfigurationen	67
4.2.4	Die nichtklassische Darstellung der Energie	69
4.2.5	Die stationäre Schrödinger-Gleichung	74
4.3	Quantisierung als Auswahlproblem II. Eine <i>nicht</i> klassische Methode zur Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung	77
4.3.1	Rationalisierung der stationären Schrödinger-Gleichung. Nicht-klassischer Charakter der Energie	77
4.3.2	Die klassische Methode: Lösung als Eigenwertproblem	79
4.3.3	Auswahl der mathematisch ausgezeichneten Zustände ($E/\alpha\omega$ halbzahlig)	80
4.3.4	Auswahl der physikalisch ausgezeichneten Zustände ($E/\alpha\omega$ positiv)	82
4.3.5	Einsteinscher Oszillator – Bedeutung des Parameters α	83
4.3.6	Wechselwirkungsfreier Körper – de Broglie-Beziehung $\lambda = h/p$	84
4.3.7	Energie <i>versus</i> Ausdehnung eines quantenmechanischen Systems *	86
4.4	Von der Amplituden- zur eigentlichen Wellengleichung: Voraussetzungsfreie Begründung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung	87
4.4.1	Die Zeitabhängigkeit der stationären Zustände	88
4.4.2	Die Zustandsänderungs- und Bewegungsgleichungen im stationären Fall	89

4.4.3	Die Prinzipien der Zustandsänderung für quantenmechanische Systeme	92
4.4.4	Die Zustandsänderungsgleichungen im nichtstationären Fall	92
4.4.5	Die Bewegungsgleichungen im nichtstationären Fall	94
4.4.6	Der invariante Ausdruck im nichtstationären Fall *	95
4.5	Symmetrie der Begrenzungsfunktionen – Symmetrie der Wellenfunktionen	96
4.5.1	Die Theoreme von Noether, von Neumann und Wigner .	97
4.5.2	Symmetrie des Hamilton-Operators – Symmetrie der Begrenzungsfunktionen – Symmetrie des Betrages der Wellenfunktionen	98
4.5.3	Symmetrie des Betrages der Wellenfunktionen – Symmetrie der Wellenfunktionen selbst – Geometrische Phasen	99
4.5.4	Eichsymmetrie *	100
4.6	Beispiel: Bloch-Elektronen	103
4.6.1	Symmetrie des Kristallgitters – Symmetrie der Wellenfunktion	103
4.6.2	Lokalisierte Wellenfunktionen. Näherung der festen Bindung	106
5	Vom Ein-Teilchen- zum Viel-Teilchen-System	111
5.1	Systeme aus zwei Teilsystemen	111
5.1.1	Der allgemeine Fall	111
5.1.2	Klassische Systeme aus zwei gleichen Körpern	113
5.1.3	Quantensysteme aus zwei gleichen Teilchen	114
5.2	Konsequenzen der Permutationssymmetrie der Wellenfunktion	117
5.2.1	Bosonen und Fermionen	117
5.2.2	Die Besetzung von Zuständen: Austausch-Loch	118
5.2.3	Die Besetzung von Zuständen: Pauli-Verbot und Aufbau-Prinzip	118
5.2.4	Austausch-Wechselwirkung	119
5.2.5	Verschränktheit *	121
5.2.6	Ununterscheidbarkeit – Identität gleicher Teilchen * ...	121
6	Die Besetzungszahl-Darstellung für Bosonen	123
6.1	Begründung der Besetzungszahl-Darstellung für Bosonen	123
6.1.1	Das Besetzungsproblem in der Planckschen Quantenhypothese. Die sukzessive Besetzung eines Oszillators mit Energiequanten	123
6.1.2	Besetzungszahl-Darstellung – Fock-Raum	125
6.1.3	Wichtige Eigenschaften der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren	126

6.1.4	Der abstrakte harmonische Oszillator	127
6.1.5	Die Bra-Ket-Darstellung	128
6.1.6	Gleiche Oszillatoren in Besetzungszahl-Darstellung	129
6.2	Kohärente Zustände I	130
6.2.1	Die kohärente Überlagerung von Besetzungszahl-Zuständen	130
6.2.2	Die Eigenzustände der Operatoren b und b^+	131
6.2.3	Der verschobene harmonische Oszillator als Prototyp für Elementaranregungen	132
6.2.4	Dynamik des verschobenen harmonischen Oszillators * ..	135
6.3	Beispiel: Gekoppelte gleichartige quantenmechanische Pendel – Phononen	136
6.3.1	Quantisierung der Gitterschwingungen	136
6.3.2	Phononen als einfachste Quasiteilchen	138
6.3.3	Strukturelle Phasenübergänge als Bose-Einstein-Kondensation *	140
7	Die Besetzungszahl-Darstellung für Fermionen	145
7.1	Begründung der Besetzungszahl-Darstellung für Fermionen ...	145
7.1.1	Die Besetzungszahl-Operatoren für Fermionen	145
7.1.2	Systeme mit zwei gleichen Fermionen	147
7.1.3	Zwei-Niveau-Systeme. Quasi-Spin-Formalismus *	147
7.2	Kohärente Zustände II	149
7.2.1	Der thermische Phasen-Zustand	149
7.2.2	Dynamik statistischer Gesamtheiten – Die Dichtematrix *	150
7.3	Beispiel: Löcher (Defektelektronen) in Halbleitern	152
8	Vom Viel-Teilchen-System zur Quantenfeldtheorie	155
8.1	Problemstellung und Übersicht	155
8.2	Klassische kanonische Feldtheorie und Normalmoden-Entwicklung	157
8.2.1	Kanonischer Formalismus für klassische verteilte Systeme	157
8.2.2	Elektromagnetische Wellen	160
8.2.3	Normalmoden-Entwicklung	162
8.3	Quantisierung der Normalschwingungen	163
8.3.1	Quantisierung der Entwicklungskoeffizienten q_w und p_w ..	163
8.3.2	Besetzungszahl-Darstellung	164
8.4	Feld-Quantisierung	165
8.4.1	Kanonische Feld-Quantisierung	165
8.4.2	Zweite Quantisierung für Bosonen	166
8.4.3	Zweite Quantisierung für Fermionen	168
8.4.4	Quantisierung der Elektromagnetischen Wellen: Photonen	170

8.5	Beispiel: Elektron-Elektron-Wechselwirkung in Festkörpern ...	172
8.5.1	Coulomb-Wechselwirkung. Hartree-Fock-Ansatz	172
8.5.2	Zweite Quantisierung. Austausch-Wechselwirkung	174
8.5.3	Einfluss der Coulomb-Wechselwirkung auf die Energiebänder in Metallen	176
8.5.4	Einfluss der Korrelationen: Hubbard-Modell *	178
8.5.5	Elektron-Loch-Wechselwirkung in Molekulkristallen: Frenkel-Excitonen	180
8.5.6	Elektron-Elektron(Loch)-Wechselwirkungen in Halbleitern *	181
8.5.7	Wannier-Mott-Excitonen *	183
8.6	Beispiel: Optische Effekte durch Hybrid-Wechselwirkung in hochangeregten Halbleitern *	186
8.6.1	3-Band-Hamiltonian mit Hybrid-Wechselwirkung	186
8.6.2	3-Band-Halbleiter-Bloch-Gleichungen	190
8.6.3	Explizite RWA-Lösung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen	191
8.6.4	Qualitative Effekte der Hybrid-Wechselwirkung	193
8.7	Beispiel: Elektron-Phonon-Wechselwirkung. Diagramm-Technik	195
8.7.1	Bloch-Elektronen und Phononen als Idealisierungen ...	196
8.7.2	Elektron-Kern-Wechselwirkung in Born-Oppenheimer-Näherung	196
8.7.3	Deformationspotenzial-Wechselwirkung *	198
8.7.4	Diagrammtechniken zur Behandlung von Wechselwirkungen: Feynman-Graphen	201
8.8	Beispiel: Elektron-Photon-Wechselwirkung. Polaritonen	203
8.8.1	Maxwell-Lorentz-Theorie	203
8.8.2	Erste Quantisierung	205
8.8.3	Aharonov-Bohm-Effekt *	206
8.8.4	Zweite Quantisierung	207
8.8.5	Gekoppelte verschiedenartige quantenmechanische Pendel: Das excitonische Polariton	208
9	Ausblicke	211
9.1	Zusammenfassung unserer Begründung der Wellenmechanik aus der Klassischen Mechanik und ergänzende Bemerkungen ..	211
9.1.1	Gegenstandsbestimmung – Lösung der Schrödingerschen Probleme	211
9.1.2	Undurchdringlichkeit – Tunneleffekt	212
9.1.3	Zustand <i>versus</i> Bewegung	213
9.1.4	Innere und äußere Parameter	214
9.1.5	Symmetrie.	215
9.1.6	Kausalität und Determinismus	215
9.1.7	Verborgene Parameter	216

9.2	Offene Fragen – Anregungen	217
9.2.1	Kraft und Bahn – Bohmsche Mechanik	217
9.2.2	Zur Definition der Zeit	219
9.2.3	Interner Parameter einer Welle und Feldquantisierung ..	219
9.2.4	Zur Bedeutung der Potenziale	220
9.2.5	Quantisierung im Phasenraum der Potenziale	220
9.2.6	Vielteilchen-Fragen	221
9.2.7	Schlussbemerkungen	222
Bibliographie		223
Personenverzeichnis		251
Sachverzeichnis		257

1. Warum Quantentheorie?

Festkörperphysikalische Aspekte

Aus dem Vorhergehenden geht klar hervor, in welchem Sinne die molekularkinetische Theorie der Wärme modifiziert werden muss, um mit dem Verteilungsgesetz der schwarzen Strahlung in Einklang gebracht zu werden. Während man sich nämlich bisher die molekularen Bewegungen genau denselben Gesetzmäßigkeiten unterworfen dachte, welche für die Bewegungen der Körper unserer Sinneswelt gelten, sind wir nun genötigt ... die Annahme zu machen, dass die Mannigfaltigkeit der Zustände, welche sie anzunehmen vermögen, eine geringere sei als bei den Körpern unserer Erfahrung.

(A. Einstein, 1907¹)

1.1 Problemstellung

Die Quantentheorie beginnt im Jahre 1900 mit der Planckschen² Vorstellung, dass die Energie E von N „linearen monochromatisch schwingenden Resonatoren“ der Frequenz ν auf eine *neue*, in der Physik bis dahin nicht bekannte Weise *diskretisiert* ist: „Wir betrachten aber – und dies ist der wesentlichste Punkt der ganzen Berechnung – E als zusammengesetzt aus einer ganz bestimmten Anzahl endlicher gleicher Teile und bedienen uns dazu der Naturkonstanten $h = 6,55 \cdot 10^{-27}(\text{erg} \cdot \text{s})$ “: $E = P \cdot h \cdot \nu$, wobei $P = 0, 1, 2, \dots$ eine nichtnegative ganze Zahl ist. Statt des Kontinuums der klassischen Schwingungsenergie als Funktion der Anfangsauslenkung und -geschwindigkeit ist die Menge der möglichen Schwingungsenergien *abzählbar unendlich*.

Mit „Resonatoren“ meint Planck nicht Hohlraum-Resonatoren, sondern Hertzische Oszillatoren (Planck, 1919); ihr akustisches Analogon sind Stimmgabeln. Die elektromagnetische Strahlung selbst befindet sich „in einem von spiegelnden Wänden umschlossenen diathermanen Medium“.

Fünf Jahre später führte Einstein (1905) – indem er als erster die Planckschen Vorstellungen physikalisch ernst nahm – diese „Quantenhypothese“

¹ Albert Einstein (1879-1955, Nobelpreis 1921), *Die Plancksche Theorie der Strahlung und die Theorie der spezifischen Wärme*, 1907. – Einstein betrachtet hier, ebenso wie Planck und wie fast 150 Jahre früher Euler, die (stationären) Zustände (und damit den Zustandsbegriff) als grundlegend.

² Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858-1947, Nobelpreis 1918), *Zur Theorie des Gesetzes der Energieverteilung im Normalspektrum*, 1900.

konsequent zur „Lichtquantenhypothese“ weiter, wobei er eine energetische und räumliche Granularität des elektromagnetischen Feldes selbst annahm. Durch die Übertragung der Quantenhypothese auf die Gitterschwingungen von Festkörpern konnte er 1907 das Verschwinden ihrer spezifischen Wärme bei tiefen Temperaturen modellieren. Bohr (1913) übertrug die Planckschen und Einsteinschen Ideen auf die Atomhülle, um die Diskretheit der atomaren Emissionsspektren zu erklären. Auf analoge Weise lassen sich die optischen Eigenschaften von Festkörpern berechnen.

In allen diesen Fällen handelt es sich um eine prinzipiell neuartige Eigenschaft der *gebundenen stationären Zustände* solcher *nichtklassischen* Systeme: Die Anzahl der stationären Zustände ist *geringer* als bei ihrem klassischen Pendant.

Um auch die jeweiligen Intensitäten der Spektrallinien zu berechnen, bedarf es jedoch letztlich einer *nichtklassischen Mechanik*. Eine solche Mechanik wurde 1925 von Heisenberg³ als „Matrizenmechanik“ und 1926 von Schrödinger als „Wellenmechanik“ erfunden. Beide sind mathematisch weitgehend äquivalent, weshalb wir sie unter der Bezeichnung *Quantenmechanik* zusammenfassen.

Wie die Einsteinsche Theorie der spezifischen Wärme zeigt, gibt es mit der Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärme sogar *makroskopische* Eigenschaften von Festkörpern, die *prinzipiell nicht* im Rahmen der klassischen Physik erklärt werden können. Hierzu gesellten sich fast gleichzeitig die Supraleitung (Kamerlingh Onnes, 1911) und weitere makroskopische Quanteneffekte. Die Plancksche Quantenhypothese zeigt, dass man diese Besonderheiten aus *neuen Prinzipien* ableiten muss, weil die hiermit verbundenen Eigenschaften im Widerspruch zu den Prinzipien der Klassischen Mechanik stehen. Die Grundgröße der neuen Theorie bildet das Wirkungsquantum h , das Planck aus thermodynamischen Erwägungen zur Erklärung der Strahlung schwarzer Körper eingeführt hat.

Aufgabe: Zeigen Sie, dass sich die Resonatoren nicht in den Wänden des Hohlraums befinden! Hinweis: Benutzen Sie die oben zitierten Eigenschaften der Wände!

Aufgabe: Diskutieren Sie die Annahme „monochromatischer Resonatoren“ hinsichtlich der Wechselwirkung mit dem äußeren Feld und formulieren Sie Kriterien für die Zulässigkeit dieser Annahme! Hinweis: Die Durchlässigkeit von Resonatorspiegeln führt zu einer Dämpfung und damit endlichen Linienbreite der Strahlung im Resonator.

³ Werner Karl Heisenberg (1901-1976, Nobelpreis 1932), *Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen*, 1925.

1.2 Die Quantentheorie der spezifischen Wärme nach Einstein

Die Grundlagen der Quantentheorie des festen Körpers wurden in Einsteins oben zitierter Arbeit „Die Plancksche Theorie der Strahlung und die Theorie der spezifischen Wärme“ (1907) gelegt. Einstein betrachtete als Modell des festen Körpers eine Anordnung von ortsfesten Oszillatoren, die alle mit der gleichen Frequenz ν um ihre Ruhelage schwingen und mit einem Strahlungsfeld Energie austauschen können. Später mündete diese Vorstellung in das Modell, in dem die Oszillatoren nicht mit einem äußeren Strahlungsfeld, sondern mit dem inneren Elektronengas Energie austauschen, wobei sowohl die Oszillatoren als auch das Elektronengas als Feld betrachtet werden.

Weil die Gitterschwingungen für das Infrarot-Spektrum verantwortlich sind, forderte Einstein, dass ihre spektrale Energieverteilung im thermischen Gleichgewicht gleich der der oben genannten Planckschen Resonatoren sei. Diese Forderung konnte er nur erfüllen, wenn die Verteilung der energetischen Zustände des einzelnen Oszillators nicht gleich der eines klassischen harmonischen Oszillators, sondern gleich der eines Planckschen Resonators ist, wenn also energetische Zustände nur für die Energiewerte $E_n = n \cdot h\nu$ ($n = 1, 2, \dots$) vorhanden sind. Einstein nimmt also an, dass das System durch seine *stationären energetischen Zustände* zu beschreiben sei. Auch in späteren Arbeiten, die einen wesentlichen Einfluss auf die Entwicklung der Quantenmechanik hatten, diskutiert Einstein die Ableitung des Planckschen Gesetzes und die Vereinbarkeit mit den Erhaltungssätzen, dem Energiesatz und dem Impulssatz⁴. Auf diesem Wege wird die Quantenhypothese unabhängig von der statistischen Begründung durch Planck.

Das Energiespektrum eines einzelnen Oszillators ist nämlich keine thermodynamische Größe, sondern eine Eigenschaft des einzelnen mechanischen Systems, die sich allein aus den Systemparametern ergibt; sie hat keinerlei Beziehung zur Temperatur, nicht einmal zur Wechselwirkung dieses Systems mit anderen Körpern oder mit einem Strahlungsfeld. Es ist deshalb auch nicht notwendig, das Energiespektrum mittels der Planckschen Quantenhypothese festzulegen, sondern es ist – wie wir zeigen werden – möglich, seine Besonderheiten für nicht-klassische Systeme auch aus anderen Voraussetzungen abzuleiten.

Die Einsteinsche Theorie der spezifischen Wärme zeichnet sich aber nicht nur durch die Anwendung der Quantenhypothese aus, sondern vor allem durch eine *Umdefinition des Problems der Quantisierung* selbst. Die Dynamik wird allein durch die Eigenschaften des Energiespektrums erklärt; auf die üblichen

⁴ Einstein, *Strahlungs-Emission und -Absorption nach der Quantentheorie*, 1916; *Zur Quantentheorie der Strahlung*, 1916; *Zum Quantensatz von Sommerfeld und Epstein*, 1917. – Später verweisen de Broglie (*The wave nature of the electron*, 1929), Schrödinger (*Zweite Mitteilung*, 1926) und Born (*The statistical interpretation of quantum mechanics*, 1954) auf die enge Verwandtschaft ihrer Überlegungen zu Einsteins Arbeiten. – Vgl. auch Einstein, *Einleitende Bemerkungen über Grundbegriffe*, 1953, S.4.

klassischen Bestimmungsstücke eines Systems, insbesondere auf die Bahnen der oszillierenden Körper, wird weitgehend verzichtet. Das Infrarotspektrum eines Kristalls muss nicht auf statistischem Wege, sondern kann mittels des bereits in der klassischen Physik etablierten *deterministischen* Prinzips der Energieerhaltung erklärt werden. Es ist lediglich anzunehmen, dass die stationären Zustände nicht durch die Wechselwirkung mit der Strahlung modifiziert werden. Die Quantisierung erscheint als *Zustands-*, genauer: als *Auswahlproblem* eines Teils des klassischen energetischen Spektrums, wobei die Zustände selbst wesentlich modifiziert werden.

„In einem Vortrag in Salzburg 1909 verlieh er seinem Unbehagen Ausdruck, dass die neue Quantenhypothese dem Zufall in der Natur eine Bedeutung verschaffe, die über dessen Rolle in der klassischen Physik hinausginge.“
(Zeilinger, 2000)

Die Einwände gegen die statistische Interpretation der Quantenmechanik hat Einstein nie als erledigt betrachtet.

1.3 Warum Quantenfeldtheorie des Festkörpers?

Im Rahmen der Quantenmechanik wird bei der Berechnung der optischen Eigenschaften von Atomen, Molekülen und Festkörpern das elektromagnetische Feld noch klassisch behandelt. Diese sogenannte *halbklassische* Theorie liefert zwar befriedigende Ergebnisse bei nicht zu geringen Intensitäten des optischen Feldes – vernachlässigt aber vollständig die *Rückwirkung* des quantenmechanischen Systems auf das elektromagnetische Feld. Um diese *Wechselwirkung* zu berücksichtigen, muss auch das elektromagnetische Feld quantenphysikalisch beschrieben werden.

Andererseits ist die quantenmechanische Beschreibung punktmechanischer Systeme nicht kompatibel mit der Quantenfeldtheorie. Um die quantentheoretische Beschreibung konservativer Systeme mit der von Feldern zusammenzuführen, schließt sich an die sogenannte 1. Quantisierung ein weiterer Schritt an. Dieser bringt nicht eine zusätzliche Quantisierung mit sich, obwohl das Verfahren 2. Quantisierung genannt wird, sondern besteht in einer weiteren Modifikation des mathematischen Apparats. Die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ wird zunächst als klassische Feldvariable aufgefasst und dann durch die 2. Quantisierung zum Operator $\hat{\psi}(x, t)$ erklärt. Man kann diese Entwicklung mit der des mathematischen Formalismus der klassischen Mechanik vergleichen, die mit Newton und Euler begann und über d'Alembert und Lagrange zu Hamilton und Jacobi führte.

Formuliert man diesen Sachverhalt auf dem Hintergrund des sogenannten Welle-Teilchen-Dualismus, so stellt sich diese Zusammenführung zur Quantenfeldtheorie wie folgt dar.

Das Elektron wird hier als ein wechselwirkungsfreies „Teilchen“ verstanden, das aus einem klassischen Teilchen wie durch eine Metamorphose entsteht, weil es infolge der Zuordnung der de Broglie-Wellenlänge eine zweite

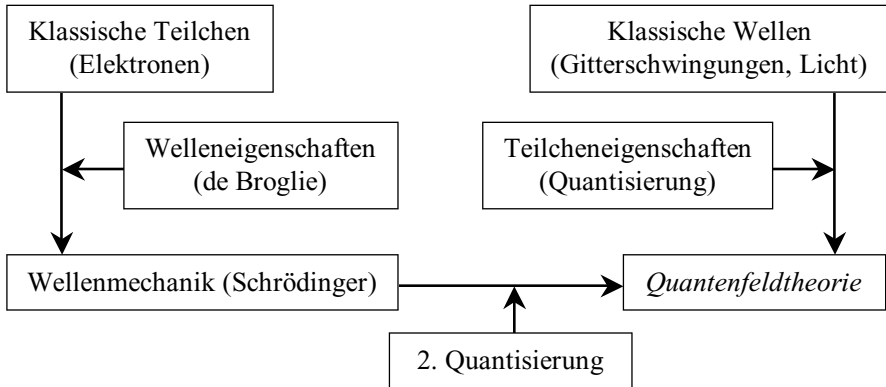


Abb. 1.1. Die Quantenfeldtheorie vereinigt die Theorien für Teilchen und Felder (konventionelles Schema)

Eigenschaft bekommt, d. h. auch „Welleneigenschaften“ zeigt, ohne die ersten zu verlieren. De Broglie⁵ sah sich angesichts der Existenz des Energie-Impuls-Vierervektors der Speziellen Relativitätstheorie und der Planckschen Energie-Frequenz-Beziehung $\varepsilon = h\nu$ veranlasst, beide Bilder zu *synthetisieren*: $p = h/\lambda$ (p – Impuls, λ – Wellenlänge). Umgekehrt zeigen die „Wellen“, nach einer ebensolchen Metamorphose, „Teilcheneigenschaften“. Auf diesem synthetischen Wege ist Schrödinger zu seiner Theorie gelangt; die Grundlage bildete die Hamiltonsche Diskussion der Beziehung zwischen Wellenoptik und Strahlenoptik⁶.

Der in der klassischen Physik bestehende Dualismus zwischen Körpern (Teilchen) und Feldern (Wellen) darf dabei *nicht* einfach auf die nichtklassische Physik übertragen werden. Denn es geht, wie gesagt, letztlich um die *Synthese* der klassischen Beschreibungsweisen von Körpern (Teilchen) und Feldern (Wellen) (Heisenberg, 1929; de Broglie, 1966).

Wir werden allerdings einen anderen Weg beschreiten und nicht von einem freien Teilchen und dem Welle-Teilchen-Dualismus ausgehen, sondern auf Voraussetzungen und Prinzipien zurückgreifen, die *sowohl* in der klassischen, *als auch* in der Quantenmechanik (und in der Quantenfeldtheorie) gültig sind, nämlich auf die Beschreibung eines konservativen mechanischen Systems durch seine stationären Zustände, die dank des Energiesatzes existieren. Dadurch entgehen wir der Gefahr, am Ende gerade das zu erhalten, was wir am Anfang postuliert haben.

Die Quantenfeldtheorie wird in diesem Buch auch am Modell der sogenannten Elektron-Phonon-Wechselwirkung abgehandelt. Die Phononen sind

⁵ Louis Victor Pierre Raymond de Broglie (1892–1987, Nobelpreis 1929), *Recherches sur la théorie des quanta*, 1924.

⁶ Sir William Rowan Hamilton (1805–1865), *On the Application to Dynamics of a General Mathematical Method Previously Applied to Optics*, 1834.

dabei keineswegs, und das ist die Besonderheit der quantenfeldtheoretischen Beschreibung, einzelne Oszillatoren, sondern *Anregungen*, d. h. energetische Zustände des *Gesamtsystems* der Oszillatoren. Ebenso sind hier die Elektronen nicht gewöhnliche „Teilchen“ (Drude, 1900⁷), sondern Anregungen des Gesamtsystems der freien Ladungsträger.

⁷ Paul Drude (1863-1906), *Zur Elektronentheorie der Metalle*, 1900; *Lehrbuch der Optik*, 1900, Ch. IV.

2. Zu den Beziehungen zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik

In der Quantenfeldtheorie ist die Differenz zwischen der Klassischen Mechanik und der Quantenmechanik nicht aufgehoben. Denn auch hier bleibt die Klassische Mechanik die unbestrittene methodologische Grundlage. Daraus folgt unmittelbar die Frage, welchen *axiomatischen Status* die Quanten- im Vergleich zur Klassischen Mechanik und umgekehrt die Klassische im Vergleich zur Quantenmechanik besitzt? Wenn man die Klassische Mechanik als Grenzfall der Quantenmechanik ansieht, ergibt sich am Anfang gestellte Frage, wie ein Grenzfall einer Theorie zur Begründung dieser Theorie dienen kann? Offensichtlich kann man diese Frage kaum mit mathematischen Methoden entscheiden, ohne zuvor die physikalischen Grundlagen gelegt zu haben.

Derartige Komplikationen können vermieden werden, wenn man sich allein auf diejenigen Prinzipien stützt, die in *beiden* Theorien anwendbar sind. Dazu gehören die Unterscheidung in *Zustands-* und *Nicht-Zustands-* bzw. *Erhaltungs-* und *Nicht-Erhaltungsgrößen* sowie die Gültigkeit der Erhaltungssätze. Insbesondere ist die Formulierung des Energiesatzes mittels quantentheoretischer Begriffe oder Größen *prinzipiell* unmöglich, ohne den Energiesatz der klassischen Mechanik heranzuziehen (de Broglie, 1929).

Tatsächlich ist die Menge der möglichen stationären Zustände eines Systems die *primäre* Größe, denn sie bestimmt auch die Menge der möglichen Zustandsänderungen; die Bewegungsabläufe bestehen aus einem *Durchschreiten* der stationären Zustände:

„Dabei liegt jedoch der Wellenmechanik überhaupt nicht die Vorstellung eines plötzlichen Überganges aus dem einen in den anderen Schwingungszustand zugrunde, sondern das betreffende Partialmoment – wie ich es kurz nennen will – entspringt nach ihr aus dem *Zusammenbestehen* der beiden Eigenschwingungen und dauert solange an, als beide gleichzeitig angeregt sind.“¹

Der Sprung im „Quantensprung“ betrifft daher die Differenz zwischen Ausgangs- und Endwert z. B. der Energie, während der Übergang selbst kontinuierlich verläuft. Bildlich gesprochen handelt es sich um ein Treppensteigen, bei dem der zweite Fuß erst von der unteren Stufe abhebt, *nachdem* der erste Fuß die obere Stufe betreten hat.

¹ Schrödinger, *Dritte Mitteilung*, S.465; Hervorhebung im Original.

Die Hamiltonsche Theorie² – deren Faszination und Leistungskraft nach wie vor ungebrochen sind – spielte eine wesentliche Rolle beim Auffinden der Schrödinger-Gleichung. Schrödinger spricht von einem

„inneren Zusammenhang der Hamiltonschen Theorie mit dem Vorgang der Wellenausbreitung“,

der

„Hamilton selbst nicht nur wohlbekannt, sondern für ihn den Ausgangspunkt seiner Theorie der Mechanik (bildete).“

(Zweite Mitteilung, S.489)

Dieser innere Zusammenhang ist allerdings nicht hinreichend, um die Existenz des Planckschen Wirkungsquantums verständlich zu machen.

„Mit Hilfe der Hamilton-Jacobischen Theorie lässt sich in der Tat für die klassische Mechanik eine Wellengleichung ableiten . . . Das *verführt* zu der folgenden Spekulation: Es könnte nun aber doch sein, dass auch die klassische Mechanik nur als der Grenzfall einer übergeordneten Wellenmechanik aufzufassen ist, so wie es die geometrische Optik für die Lichtwellentheorie ist.“³

Demnach müsste sich auch der Teilchen-Charakter des Lichts aus einer Wellengleichung ableiten lassen. Einen solchen Versuch hat Einstein unternommen, um seine Hypothese über den korpuskularen Charakter der Strahlung zu begründen⁴.

Geht man nun auf diesem Wege von der Klassischen zur Quantenphysik, so werden die Widersprüche, die innerhalb *jener* zwischen Teilchen„bild“ und Wellen„bild“ bestehen, in diese zunächst linear übertragen, obwohl diese Bilder hier eine *völlig andere* Bedeutung besitzen. Die neuen „Quantenbilder“ werden im Sinne der klassischen Theorie interpretiert, so dass „Wellenbild“ und „Teilchenbild“ weiterhin als unvereinbar, einander widersprechend empfunden werden. Dabei liegt ein solcher Gegensatz gar nicht mehr vor, da eine *Synthese* beider vollzogen worden ist.

In der Tat wird bei der Feld-Quantisierung der Wellencharakter des Feldes *nicht* aufgehoben. Und auch der Tunneleffekt erscheint mysteriös, wenn man die klassischen Größen (hier die potentielle Energie) unkritisch auf quantenmechanische Systeme überträgt; wir werden das weiter unten genauer betrachten.

Im Unterschied zur Verallgemeinerung der Klassischen Mechanik in Richtung Spezielle Relativitätstheorie (Suisky & Enders, 2003) ist es allerdings

² Hamilton, *On the Application to Dynamics of a General Mathematical Method Previously Applied to Optics*, 1834; *On a General Method in Dynamics*, 1834; *Second Essay on a General Method in Dynamics*, 1835.

³ Nolting, *Quantenmechanik*, S.74; Hervorhebung im Original.

⁴ Einstein, *Zum gegenwärtigen Stand des Strahlungsproblems*, 1909. – Einstein kommt hier zu dem Schluss, dass anstelle der d'Alembertschen Wellengleichung (siehe unten) eine nicht-lineare und inhomogene Gleichung erforderlich ist.

nicht möglich, die Klassische Mechanik auf eine ähnliche Weise zur Quantenmechanik zu verallgemeinern, wie die nichteuklidischen Geometrien aus der euklidischen abgeleitet wurden, weil hier die axiomatischen Grundlagen auf ganz andere Weise und viel tiefergehend betroffen sind.

In den folgenden Punkten sind unsere einzelnen Schritte von der Klassischen Mechanik zur Quantenfeldtheorie zusammenfassend dargestellt.

1. Bei der Analyse der wechselseitigen Beziehungen zwischen Klassischer Mechanik und Quantenmechanik zeigt es sich, dass man beide Theorien auf eine gemeinsame Basis stellen kann, wenn man bei der Beschreibung klassischer und nichtklassischer Systeme von stationären Zustandsgrößen ausgeht und die Zustandserhaltung als übergreifendes Prinzip annimmt, aus dem sich sowohl die klassischen als auch die nicht-klassischen Bewegungsgleichungen ableiten lassen. Die Voraussetzungen und Ergebnisse werden anhand des Modellsystems harmonischer Oszillator diskutiert und abgeleitet sowie an Beispielen aus der Festkörperphysik illustriert.
2. Der Rahmen für die Konstruktion der Modelle wird durch den Energiesatz und die Konfigurationen eines Systems nach Helmholtz⁵ gegeben.
3. Das Verhältnis von Klassischer Mechanik und Quantenmechanik ist das Verhältnis zweier Theorien, die ungeachtet ihrer Verschiedenheit aufeinander bezogen sind und sich wechselseitig begründen. Ein Modell für ein solches Verhältnis zweier alternativer Theorien kann in den einander ausschließenden und zugleich aufeinander bezogenen Axiomen der Eulerschen Mechanik (siehe unten) gesehen werden.
4. Der Energiesatz bildet die Grundlage für die Ableitung der stationären Schrödinger-Gleichung, wobei – in Verallgemeinerung einer Idee von de Maupertuis, Pierre Louis Moreau⁶ – eine Darstellung der Energie als *innerer* Systemparameter gesucht wird; als Parameter also, der – wie im Bohrschen Atommodell – keine Funktion äußerer Parameter (wie sie die Anfangsbedingungen darstellen) ist. Die Existenz des Wirkungsquantums braucht nicht postuliert zu werden, sondern ergibt sich im Rahmen dieser Ableitung.⁷
5. Zeitabhängigkeiten sind im Energiesatz nicht explizit enthalten und können deshalb im Rahmen des vorliegenden Zuganges nur über die Wellenfunktionen eingeführt werden (hierin besteht ein wesentlicher Unterschied zu der von Schrödinger vorausgesetzten d'Alembertschen Wellengleichung, welche die Zeit explizit enthält). Die nichtstationäre Schrödin-

⁵ Hermann Ludwig Ferdinand von Helmholtz (1821-1894), *Über die Erhaltung der Kraft*, 1847; *Vorlesungen über die Dynamik discreter Massenpunkte*, 1911.

⁶ Pierre Louis Moreau de Maupertuis (1698-1759), *Accord de différentes Loix de la Nature qui avoient jusqu'ici paru incompatibles*, 1744.

⁷ Nach Wigner (*Events, laws of nature, and invariance principles*, 1963) beschreiben die Naturgesetze die Regelmäßigkeiten in den Ereignissen, während die Anfangsbedingungen die übrigen Einflüsse beinhalten. Wir werden zeigen, dass die Trennung in interne und externe Parameter zu neuen Ergebnissen führt.

ger-Gleichung wird deshalb – analog zur Ableitung der Newtonschen und der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen – aus der Forderung hergeleitet, dass die Änderung der (stationären) Zustandsgrößen von dieser selbst und von den Änderungen der Nicht-Zustandsgrößen unabhängig ist. – Alternativ hierzu kann sie aus einer universellen, systemunabhängigen Beziehung zwischen den räumlichen und zeitlichen Veränderungen der orts-, impuls- und zeitabhängigen Systemgrößen potentielle Energie, kinetische Energie und Wellenfunktionen abgeleitet werden, die im nichtstationären Fall an die Stelle der nichtklassischen Darstellung der Energie tritt (und sich im stationären Fall auf diese reduziert).

6. Die Verallgemeinerung dieses Zuganges auf Quantensysteme gleicher Teilchen führt – wiederum *ohne zusätzliche Postulate* – zur Permutationssymmetrie der Viel-Teilchen-Wellenfunktionen und den daraus resultierenden Quanteneffekten. Die Besetzungszahl-Darstellungen für Bosonen und Fermionen werden auf der Grundlage der Planckschen Quantenhypothese einerseits und des Pauli-Verbots⁸ andererseits entwickelt.
7. Dem Newton-Eulerschen Zustandsbegriff entspricht jedoch nicht die Wellenfunktion selbst, sondern ihr Betrag. Dessen Permutationssymmetrie weist auf die – üblicherweise auf viel schwierigerem Wege erhaltene – mögliche Existenz von *Anyonen*.
8. Die Feld-Quantisierung kommt ebenfalls ohne zusätzliche Postulate aus, indem die Feldgrößen derart nach Normalmoden entwickelt werden, dass die Entwicklungskoeffizienten wie die Auslenkungen harmonischer Oszillatoren behandelt werden können. Andererseits besitzt die Normalmoden-Quantisierung gewisse prinzipielle Nachteile (Schleich, 2000, Kap.10). Deshalb wird vorgeschlagen, die Quantisierung im Phasenraum der kanonisch-konjugierten Feldvariablen vorzunehmen. Der Formalismus der Zweiten Quantisierung wird mit Hilfe der kanonischen Quantisierung abgeleitet.

Es ist allerdings nicht ganz unerwartet, dass man bei diesem Vorgehen derart weit gehende Einsichten gewinnt. Denn Euler, d'Alembert⁹ und Maupertuis haben die mathematischen und *begrifflichen* Grundlagen der Mechanik so tiefgründig entwickelt, dass ihr als Theorie eine universelle Gültigkeit zugesprochen werden konnte. Euler hat in seltener Klarheit, Widerspruchsfreiheit und vor allem Vollständigkeit die wesentlichen Voraussetzungen für diesen später von Laplace¹⁰ ausgesprochenen Universalitätsanspruch formuliert.

Vor allem Euler ist durch

„die Universalität und die spekulative Tiefe seines Denkens ausgezeichnet, welches unablässig darauf ausging, die forschende und kon-

⁸ Wolfgang Pauli (1900-1958, Nobelpreis 1945), *Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur der Spektren*, 1925.

⁹ Jean Le Rond d'Alembert (1717-1783), *Traité de Dynamique*, 1743.

¹⁰ Pierre Simon Marquis de Laplace (1749-1827), *Mécanique céleste*, 1799ff.

struierende Wissenschaft nach ihren philosophischen Gehalt sich zu Bewusstsein zu bringen. ... Seine physikalischen und mathematischen Arbeiten ... sind durchweg von dem Bestreben gekennzeichnet, die Grundbegriffe zur höchsten Klarheit zu bringen.“¹¹

Euler hat alle wesentlichen Probleme der Mechanik, über die zu seiner Zeit diskutiert wurde, in einer unübertroffenen Weise in einem logisch konsistenten System von Begriffen zusammengefasst, fast alle Probleme der technischen Mechanik mit seinen neuen Methoden durchgerechnet und dabei die Mechanik der starren Körper (Kreisel-Theorie) und die Kontinuums-Mechanik begründet.¹²

Wegen dieser logischen Klarheit und Vollständigkeit hinsichtlich ihrer Voraussetzungen einerseits und der axiomatischen Festlegung *nur* der Zustandserhaltung, *nicht* aber der Zustandsveränderung andererseits ist die Eulersche Darstellung der Mechanik geradezu prädestiniert, als Ausgangspunkt für Fragen nach *nicht*-klassischen Modellen für mechanische Systeme zu dienen. Trotz dieser Vorzüge ist der Rückgriff auf die Eulersche Axiomatik nach meiner Kenntnis bisher in der Literatur nicht vorgenommen worden.

¹¹ Friedrich Ueberwegs *Grundriss der Geschichte der Philosophie*, 3. Teil, S.462.

¹² Siehe z. B. Speiser, *Vorwort* zum Bd. II, 5 der *Leonardi Euleri Opera Omnia*; Fellmann, *Leonhard Euler*, 1995, SS. 63, 111, 122; van der Waerden, *Eulers Herleitung des Drehimpulssatzes*, 1983, S.271.

3. Grundbegriffe der klassischen Mechanik

Man wird darin Beweise von der Art finden, welche nicht eine ebenso große Gewissheit als diejenigen der Geometrie gewähren und welche sich sogar sehr davon unterscheiden, weil hier die Principien sich durch die Schlüsse bewahrheiten, welche man daraus zieht, während die Geometer ihre Sätze aus sicheren und unanfechtbaren Grundsätzen beweisen; die Natur der behandelten Gegenstände bedingt dies.

(Chr. Huygens, 1678¹)

3.1 Newtons Darstellung der klassischen Mechanik

... ist die *rationale Mechanik* die ... Wissenschaft, welche von den aus gewissen Kräften hervorgehenden Bewegungen und umgekehrt den zu gewissen Bewegungen erforderlichen Kräften handelt. ... Alle Schwierigkeit der Physik besteht nämlich dem Anschein nach darin, aus den Erscheinungen der Bewegung die Kräfte der Natur zu erforschen und hierauf durch diese Kräfte die übrigen Erscheinungen zu erklären.

(I. Newton, 1687²)

Newton hat mit seinem Hauptwerk *Philosophiae naturalis principia mathematica* (1687) die Grundlagen der modernen Physik gelegt, die für fast alle weiteren Entwicklungen wegweisend waren und es bis heute geblieben sind. Das Newtonsche Werk entfaltete nicht nur wegen der Neuartigkeit des Gegenstandes erst im 18. Jahrhundert seine volle Wirkung, sondern war auch wegen der komplizierten und komprimierten Darstellung nicht leicht zu erschließen; seine Rezeptionsgeschichte ist auch eine Geschichte von neuartigen Entwicklungen, die über Newton hinausgehen und bis in die heutige Zeit hinein reichen³. Die bedeutendsten Vorgänger und Zeitgenossen Newtons im

¹ Christian Huygens (1629-1695), *Traité de la Lumière*, 1678/1690, S. III f.

² Sir Isaac Newton (1643-1727), *The Principia*, 1999, Vorwort zur 1. Aufl., S.382.

³ Chandrasekhar, *Newton's Principia for the Common Reader*, 1995. Newton, *The Principia*, 1999, ist eine Neu-Übersetzung mit einer 370(!)-seitigen Einführung von I. B. Cohen.

17. Jahrhundert waren Galilei⁴, Descartes⁵, Huygens und Leibniz⁶ – seine bedeutendsten Nachfolger im 18. Jahrhundert Euler, d'Alembert, Maupertuis und Lagrange⁷.

3.1.1 Die Prinzipien der Newtonschen Mechanik

Die Principia ist ein wissenschaftliches Werk und keine Bibel. Man sollte es studieren und abwägen, bewundern – ja! – aber nicht darauf schwören. Man findet in ihm Neuigkeiten und Wiederholungen, eine elegante Vollendung, aber auch Irrtümer, erleuchtende Kürze und überflüssige Umwege, außerordentliche Ansprüche an Strenge, aber auch Lückenhaftigkeit der Logik, das Aufräumen mit früher aufgestellten Hypothesen und die Einführung unerklärter neuer Annahmen.

(C. Truesdell, 1968⁸)

Die Grundlage der in den *Principia* entwickelten Newtonschen Physik sind die Definitionen der allgemeinsten Begriffe und die berühmten *Axiome*, die dem Haupttext vorangestellt sind⁹:

Axiom N1: Jeder Körper beharrt in seinem Zustand der Ruhe oder der gleichförmigen geradlinigen Bewegung, wenn er nicht durch einwirkende Kräfte gezwungen wird, seinen Zustand zu ändern.

Axiom N2: Die Änderung der Bewegung ist der Einwirkung der bewegenden Kraft proportional und geschieht nach der Richtung derjenigen geraden Linie, nach welcher jene Kraft wirkt.

Axiom N3: Die Wirkung ist stets der Gegenwirkung gleich, oder die Wirkungen zweier Körper aufeinander sind stets gleich und von entgegengesetzter Richtung.

⁴ Galileo Galilei (1564-1642), *Unterredungen und Mathematische Demonstrationen über zwei neue Wissenszweige, die Mechanik und die Fallgesetze betreffend. 1.-6. Tag (1638)*.

⁵ René Descartes (Cartesius, 1596-1650), *Principia philosophiae*, 1644; *Le Monde*, 1664.

⁶ Gottfried Wilhelm Freiherr von Leibniz (1646-1716), *Brevis demonstratio erroris memorabilis Cartesii et aliorum circa legem naturae, secundum quam volunt a Deo eandem semper quantitatem motus conservari, qua et in re mechanica abutuntur*, 1686; *Specimen dynamicum*, 1695.

⁷ Joseph-Louis de Lagrange (Giuseppe Ludovico Lagrangia, 1736-1813), *Mécanique Analytique*, 1788.

⁸ Clifford Ambrose Truesdell (1919–2000), *Essays in the History of Mechanics*, 1968, S.88 (zit. nach Simonyi, *Kulturgeschichte der Physik*, 1990, S.296).

⁹ Übersetzung von Mach, *Die Mechanik in ihrer Entwicklung*, 1988, §2.7. – Bei der Formulierung der Newtonschen Axiome in moderner Form gehen einige Besonderheiten verloren, die auf ihren historischen Ursprung hindeuten. Newton selbst spricht nicht von einer „bewegenden“ oder „einwirkenden“ Kraft, sondern von einer „eingedrückten“ Kraft (*vis impressa*). Diese Vorstellung folgt aus dem ursprünglichen Modell, in dem die Wechselwirkung weitgehende Ähnlichkeit mit einem Stoß hatte (vgl. *Principia*, Definition 4).

Diese Axiome stellen eine weit reichende Präzisierung der Descartesschen Gesetze (*Le Monde*, Kap. VII) und der Huygensschen Grundannahmen für den elastischen Stoß (Simonyi, 1990, § 3.6.5) zum Zwecke der quantitativen Durchführung der Himmelsmechanik dar.

Gesetz D1: Dass jeder einzelne Teil der Materie solange immer im selben Zustand verharret, wie das Zusammentreffen mit anderen ihn nicht zwingt, ihn zu verändern.

Gesetz D2: Wenn ein Körper einen anderen anstößt, kann er ihm keine Bewegung übertragen, wenn er nicht gleichzeitig ebensoviel von seiner eigenen verliert; und ihm auch keine davon entziehen, ohne dass die seinige sich ebenso sehr vermehrt.

Gesetz D3: Wenn sich ein Körper bewegt, obgleich seine Bewegung sich meistens in gekrümmter Linie vollzieht, und er niemals eine andere als in irgendeiner Form kreisförmige vollziehen könnte, so wie oben gesagt worden ist, strebt dennoch jeder seiner Teile für sich immer danach, die seine geradlinig fortzusetzen.

Grundannahme H1: Jeder beliebige sich bewegende Körper ist bestrebt, seine Bewegung geradlinig und mit konstanter Geschwindigkeit so lange beizubehalten, bis er auf irgendein Hindernis stößt.

Grundannahme H2: Stoßen zwei gleiche Kugeln mit gleichen, aber entgegengesetzt gerichteten Geschwindigkeiten zusammen, so kehrt sich nach dem Stoß ihre Bewegungsrichtung um, ohne dass sich der Betrag ihrer Geschwindigkeiten ändert.

Grundannahme H3: Die Stoßgesetze sind die gleichen für einen Beobachter auf einem Schiff, das sich mit einer beliebigen konstanten Geschwindigkeit bewegt, wie die für einen Beobachter am Ufer.

Newton beginnt also seine Axiomatik mit dem kräftefreien Körper. Im ersten Axiom wird außerdem, wenngleich nur indirekt, festgestellt, dass das Verbleiben eines Körpers in einem stationären Bewegungszustand eine grundlegende Eigenschaft der Körper ist und es *überhaupt keiner Kraft, auch keiner inneren*, bedarf, um dieses Verhalten zu erklären.

Newton beschreibt den Zustand nicht nur durch die Descartessche Bewegungsgröße (den *Betrag* des Impulses), sondern zusätzlich durch die *Richtung* der Bewegung, mithin durch den *Impulsvektor* \mathbf{p} . Dadurch kann er die bei Descartes auftretenden Fehler bei einigen Fällen des elastischen Stoßes zweier Körper beheben. Leibniz (1686) dienten übrigens diese Fehler dazu, die „lebendige Kraft“ (kinetische Energie) als Erhaltungsgröße zu favorisieren.

Der Newtonsche Zustandsbegriff entspricht dem heutigen *stationären* Zustand. Der heute übliche Laplacesche Zustandsbegriff, in dem Ort und Geschwindigkeit bzw. Impuls Zustandsvariablen sind, steht dem Bewegungsbegriff näher, in dem Bewegung nicht (nur) Orts-, sondern Zustandsveränderung ist. Er ist allerdings dahingehend problematisch, dass auch während der *kräftefreien* Bewegung, mithin *ohne* äußere Ursachen, der Zustand permanent geändert wird (vgl. v. Weizsäcker, 2002, S.235). Der Newtonsche Zustandsbe-

griff eignet sich besser für den Übergang zur Quantenmechanik, wo es f (und nicht $2f$) unabhängige „gute Quantenzahlen“ gibt (f – Anzahl der Freiheitsgrade; vgl. Enders, 2004).

Die Änderung der Bewegung wird durch die Änderung des Impulses: $\Delta \mathbf{p} = \Delta (M \cdot \mathbf{v})$, beschrieben. Sie ist proportional zur einwirkenden Kraft \mathbf{K} :

$$\Delta \mathbf{p} = \Delta (M \cdot \mathbf{v}) \sim \mathbf{K} \quad (3.1)$$

Da die Impulsänderung ein Vektor ist, müssen auch die Kräfte als gerichtete Größen (Vektoren) aufgefasst und als solche addiert (Kräfteparallelogramm) werden.

Man kommt von hier zu einer Gleichung, mit der man Größen berechnen kann, wenn man sich vorstellt, dass die Kraft während einer gewissen Zeit dt wirkt, und

$$d(M \cdot \mathbf{v}) = \mathbf{K} \cdot dt \quad (3.2)$$

setzt. Die berühmte Formulierung „Kraft = Masse \times Beschleunigung“ ergibt sich aber erst, wenn man *zusätzlich* annimmt, dass die Masse konstant bleibt und die Geschwindigkeit durch den Differenzialquotienten des Weges nach der Zeit dargestellt wird.

Die Orte der Teilchen erscheinen an dieser Stelle als „verborgene Parameter“, die man zusätzlich zu der Zustandsgröße Impuls einführen muss, um die Bewegung der Körper vollständig zu bestimmen (Born, 1926b).

Die Beziehung (3.2) ist ebenso einfach wie grundlegend: es handelt sich um den Satz von der „Änderung des Impulses oder den *Impulssatz* schlechtweg“ (Sommerfeld, *Mechanik*, § 1), sie findet sich aber noch nicht in den *Principia*, sondern wurde erst später, als d’Alembert und Euler die Mechanik konsequent in der Sprache der Differenzialrechnung formulierten, zur allgemeinen Grundgleichung nicht nur in der Punktmechanik, sondern auch in den Theorien der starren Körper und der Flüssigkeiten.

Es dauerte nach dem Erscheinen der *Principia* noch über hundert Jahre, bis die Newtonsche Theorie sich so vollständig durchgesetzt hatte, dass sie in den Rang einer universellen Theorie erhoben werden und Laplace 1814 schreiben konnte:

„Eine Intelligenz, welche für einen gegebenen Augenblick alle in der Natur wirkenden Kräfte sowie die gegenseitige Lage der sie zusammensetzenden Elemente kannte, und überdies umfassend genug wäre, um diese gegebenen Größen der Analysis zu unterwerfen, würde in derselben Formel die Bewegungen der größten Weltkörper wie des leichtesten Atoms umschließen; nichts würde ihr ungewiß sein und Zukunft wie Vergangenheit würden ihr offen vor Augen liegen.“ (1932, S.1f)

Dieser Erfolg ist nicht zuletzt Euler zu verdanken, der nicht nur die Methoden entwickelt hatte, die es ermöglichten die „gegebenen Größen der Analysis zu unterwerfen“, sondern der ebenso dafür gesorgt hatte, dass die einander

widersprechenden und zum Teil sogar unvereinbaren Teile der Theoretischen Physik, etwa die Wellen- (Huygens, 1690) und die Korpuskulartheorie des Lichtes (Newton, 1704), in einer *gemeinsamen* mathematischen Sprache, der Analysis, formuliert werden konnten.

Bei konstanter Masse kann eine Zustandsänderung gemäß Gleichung (3.2) auch durch eine Geschwindigkeitsänderung dargestellt werden. In der ursprünglichen, sehr instruktiven Eulerschen Notation schreiben sich die Gleichungen für die Veränderung der Komponenten der Zustandsgröße Geschwindigkeit, $\mathbf{v} = (u, v, w)$, hinsichtlich der Komponenten der Kraft, $\mathbf{K} = (P, Q, R)$, in einem kartesischen Koordinatensystem als

$$Mdu = Pdt; \quad Mdv = Qdt; \quad Mdw = Rdt \quad (3.3)$$

Multipliziert man mit dt , so erhält man unter Berücksichtigung von $d\mathbf{v}dt = d\mathbf{x} \equiv (ddx, ddy, ddz)$ die Beziehungen¹⁰

$$Mddx = Pdt^2; \quad Mddy = Qdt^2; \quad Mddz = Rdt^2 \quad (3.4)$$

Hieraus folgt unmittelbar die oben genannte Kurzfassung der Bewegungsgleichung für die Bahnkurve $\mathbf{x}(t)$ als „Kraft = Masse \times Beschleunigung“:

$$M \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = \mathbf{K}(\mathbf{x}, t) \quad (3.5)$$

Ihre Lösung enthält als Integrationskonstanten bestimmte Anfangswerte des Ortes und der Geschwindigkeit: $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}(0)$, $\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}(0)$; die eindeutige Abhängigkeit der Bahn von diesen Anfangswerten veranlasste Laplace zu seiner oben zitierten Aussage. Die Anfangswerte sind zur vollständigen Lösung der Bewegungsgleichung unerlässlich – im Unterschied zu dieser Gleichung selbst jedoch frei wählbar. Sie besitzen dadurch eine eigenständige Bedeutung.

Die Newtonsche Bewegungsgleichung stellt einen wesentlichen Zusammenhang zwischen den Kräften und den Bahnen der Körper her, so dass sich für die Mechanik zwei grundlegende Aufgaben ergeben: (1) aus gegebenen Bahnen die Kräfte und (2) aus gegebenen Kräften die Bahnen zu berechnen.

Vor Newton hatten bereits Descartes und Leibniz axiomatische Formulierungen der Mechanik angegeben, diese jedoch nicht – wie Newton – mit einer überwältigenden Fülle von Problemen und deren Lösungen verbinden können. Der Siegeszug der Newtonschen Theorie wurde vor allem durch Voltaire¹¹, d’Alembert und Euler möglich. Auf Euler folgten Lagrange, Jacobi¹²,

¹⁰ Euler, *Découverte d’un nouveaux principe de mécanique*, 1750; s. auch Simonyi, 1990, S.298f.

¹¹ Voltaire (François Marie Arouet de Voltaire, 1694-1778), *Éléments de philosophie de Newton*, 1738; *Sammlung verschiedener Briefe des Herrn von Voltaire, die Engländer und andere Sachen betreffend*, 1747. Vgl. von Borczeskowski & Wahsner, *Newton und Voltaire*, 1980.

¹² Carl Gustav Jacob Jacobi (1804-1851), *Vorlesungen über Dynamik*, 1866.

Poisson¹³ und Hamilton, die der Klassischen Mechanik ihre heute gebräuchliche Form gaben. Die Bewegungsgleichungen werden nicht mehr anhand der Zustandsveränderung eingeführt, sondern aus Variations- oder Extremalprinzipien abgeleitet. Eine kurze Zusammenfassung dieser Entwicklung wird im nächsten Paragraphen gegeben.

In der Newtonschen Bewegungsgleichung, d. h. in ihrer heute benutzten Form (3.5) kommen *keine* derjenigen (stationären) Zustands- bzw. Erhaltungsgrößen mehr vor, die mit dem Axiom N1 eingeführt werden. Eine Alternative zur klassischen Mechanik kann deshalb nicht von der Newtonschen Bewegungsgleichung ausgehen. Es ist allerdings wegen ihres axiomatischen Status schwer, diese Bewegungsgleichung außer Acht zu lassen. Das zeigt sich nur zu deutlich in den Diskussionen über die Interpretation der Quantenmechanik, in denen von Anfang an die *Nichtvereinbarkeit* mit dem 2. Newtonschen Axiom im Vordergrund stand. Die Tatsache, dass auch in der „Atommechanik“ die *stationären Zustände* (eines nunmehr *nicht-klassischen* Systems) die Grundlage bilden, ist zwar von Bohr 1913 vorausgesetzt worden, sie spielte aber in den Diskussionen nach 1926 keine Rolle mehr.

Eine „Vorbereitung“ auf den Übergang von klassischen zu nichtklassischen Systemen stellt deshalb die Modifikation der Newtonschen Axiomatik durch Euler dar, der einen axiomatischen Status allein den „inneren Prinzipien der Bewegung“ zuspricht, d. h. dem Axiom N1 und den hiermit eingeführten Zustands- bzw. Erhaltungsgrößen. Die „äußeren Prinzipien der Bewegung“ wie N2 und N3 werden nicht axiomatisch einführt, sondern als Probleme betrachtet, die der jeweiligen Situation entsprechend zu lösen sind. Stellt man die Prinzipien der Zustandsveränderung eines Körpers als Verhältnis von Erhaltungs- und Nicht- Erhaltungsgrößen und ihrer Veränderung dar, so kann man sie – wie wir zeigen werden – fast wortwörtlich auf konservative und sogar auf Quantensysteme übertragen, wobei natürlich die Systemgrößen bzw. ihre Darstellung wechseln.

Doch zuvor wenden wir uns unserem Modellsystem zu.

3.1.2 Der lineare ungedämpfte harmonische Oszillator nach Newton, Lagrange und Hamilton

Die Bedeutung der periodischen Bewegung erwächst einerseits aus ihrer ordnenden Rolle in den Tages- und Jahreszeiten - andererseits aus ihrer prägenden Funktion für die Definition und Messung der Zeit. Als physikalisch wichtigstes Modellsystem zur Beschreibung periodischer Bewegungen hat sich der lineare ungedämpfte harmonische Oszillator herausgebildet (Bloch, 1997). Hier sind die Bewegungen im Orts- und im Impulsraum vollkommen symmetrisch und die Lösungen der verschiedensten Gleichungen explizit in geschlossener Form bekannt.

Dieser Oszillator ist ein System mit einem Freiheitsgrad der Bewegung, in dem sich – im klassisch-mechanischen Fall – ein starrer Körper unter dem

¹³ Siméon Denis Poisson (1781-1840), *Traité de Mécanique*, 1833.

Einfluss einer rücktreibenden Kraft bewegt, die proportional zur Abweichung seines Ortes von der Gleichgewichtslage ist. Beim Federschwinger wird die Rückstellkraft durch das Ausdehnen bzw. Zusammenpressen einer Feder erzeugt (Hookesches Gesetz¹⁴):

$$K(x) = -\kappa x \quad (3.6)$$

Die Proportionalitätskonstante κ heißt Kraft- oder, speziell beim Federschwinger, Federkonstante. Die Auslenkung wird auf diejenige Position bezogen, für die die Kraft und mithin die Auslenkung minimal sind; im Falle der Kraft ist dies der Koordinatenursprung.¹⁵

Die Kraft (3.6) ist für den schwingenden Körper eine äußere – für das System Oszillator eine innere Kraft. Wir werden weiter unten sehen, dass im allgemeinen die explizit zeitabhängigen (zeitunabhängigen) Kräfte bezüglich des Systems zu den äußeren (inneren) Kräften zu zählen sind.

Mit dieser Kraft erhalten wir aus der Newtonschen Bewegungsgleichung (3.5) die Differenzialgleichung

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = K(x(t)) = -\kappa x(t) \quad (3.7)$$

Ihre Lösungen beschreiben die Bewegung des Massenpunktes längs der x -Achse, die Bahnkurve $x(t)$. Wenn wir für die Integrationskonstanten die Anfangswerte von Ort: $x(0)$, und Geschwindigkeit: $v(0)$, nehmen, erhalten wir durch elementare Integration das Ergebnis

$$x(t) = x(0) \cdot \cos(\omega t) + \frac{v(0)}{\omega} \sin(\omega t); \quad \omega = \sqrt{\frac{\kappa}{m}} \quad (3.8)$$

in dem ω die Kreisfrequenz des Oszillators ist. Die beiden linear unabhängigen Terme entsprechen den beiden unabhängigen dynamischen Variablen $x(t)$ und $v(t)$. Die maximale Auslenkung x_{\max} und die maximale Geschwindigkeit $v_{\max} = \omega x_{\max}$ hängen über die Relationen

$$x_{\max} = \sqrt{x(0)^2 + \frac{v(0)^2}{\omega^2}}; \quad v_{\max} = \sqrt{\omega^2 x(0)^2 + v(0)^2} \quad (3.9)$$

mit den Anfangswerten zusammen.

Lagrange betrachtete im Anschluss an d'Alembert ein mechanisches System, dessen Freiheitsgrade durch Bewegungsbeschränkungen reduziert sind. Die Bewegungen entlang der verbleibenden f Freiheitsgrade werden durch

¹⁴ Robert Hooke (1635-1703), *Lectures de Potentia Restitutiva*, 1687 (nach Simonyi, 1990, S.280).

¹⁵ Drehbewegungen des Körpers relativ zur Bewegungsrichtung werden ausgeschlossen, weshalb man ihn als *Massenpunkt* auffassen kann (Helmholtz, 1911, §2). Für den Übergang zur Quantenmechanik und den Vergleich mit Molekülspektren eignet sich allerdings die Bewegung zweier Körper *gegeneinander* besser.

die verallgemeinerten Koordinaten $\{q_i | i = 1 \dots f\}$ und verallgemeinerten Geschwindigkeiten $\{\dot{q}_i \equiv \frac{d}{dt} q_i | i = 1 \dots f\}$ beschrieben. Es ist $0 \leq f \leq 3N$, wenn N die Anzahl der Körper ist und Drehbewegungen ausgeschlossen sind. Wir beschränken uns auf holonome, zeitunabhängige Nebenbedingungen und vereinfachen die Whittakersche Darstellung¹⁶ auf den Fall des ebenen Pendels.

Für ein ebenes Pendel der Länge l sind die verallgemeinerten Koordinaten die Zylinderkoordinaten: $q_1 = r (= l = \text{const})$, $q_2 = \varphi$. Die kartesischen Koordinaten können als Funktionen jener dargestellt werden. Wenn das Pendel im Punkt $(x = 0, y = l)$ aufgehängt ist, haben wir

$$x = f(r, \varphi) = r \sin \varphi; \quad y = g(r, \varphi) = r - r \cos \varphi \quad (3.10)$$

Die Newtonschen Bewegungsgleichungen gelten nur im kartesischen Koordinatensystem; der Kraftvektor ist $\mathbf{K} = (X, Y) = (0, -Mg)$:

$$M\ddot{x} = X = 0; \quad M\ddot{y} = Y = -Mg$$

Wir multiplizieren sie mit den Ableitungen $\partial f / \partial q_i = \partial x / \partial q_i$ und addieren sie. Das ergibt

$$M\ddot{x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + M\ddot{y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} = X \frac{\partial x}{\partial \varphi} + Y \frac{\partial y}{\partial \varphi}$$

(die zweite Gleichung benötigen wir wegen $\dot{r} \equiv 0$ nicht). Die linke Seite dieser Gleichung lässt sich durch die kinetische Energie

$$T = \frac{M}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) = \frac{M}{2} r^2 \dot{\varphi}^2$$

ausdrücken:

$$M\ddot{x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + M\ddot{y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} = \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{\varphi}} - \frac{\partial T}{\partial \varphi}$$

Ihre rechte Seite schreiben wir mit Hilfe der Potenzialfunktion $V = mgy = r(1 - \cos \varphi)$ in der Form

$$X \frac{\partial x}{\partial \varphi} + Y \frac{\partial y}{\partial \varphi} = - \frac{\partial V}{\partial \varphi}$$

Damit sind die Bewegungsgleichungen äquivalent zu der Gleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{\varphi}} - \frac{\partial (T - V)}{\partial \varphi} = \frac{d}{dt} \frac{\partial (T - V)}{\partial \dot{\varphi}} - \frac{\partial (T - V)}{\partial \varphi} = 0$$

Sie ist *de facto* eine Gleichung für die Lagrange-Funktion $L \stackrel{\text{def}}{=} T - V$. Im allgemeinen gibt es f (gekoppelte) Lagrangesche Bewegungsgleichungen:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0; \quad i = 1 \dots f \quad (3.11)$$

¹⁶ Sir Edmund Taylor Whittaker (1873-1956), *Analytical Dynamics*, 1947, §26.

Wenn das Potenzial von den Geschwindigkeiten abhängt, ist die Kraft

$$K_i = -\frac{\partial V(q_i, \dot{q}_i)}{\partial q_i} + \frac{d}{dt} \frac{\partial V(q_i, \dot{q}_i)}{\partial \dot{q}_i} = K_i(\{q, \dot{q}, \ddot{q}\}); \quad i = 1 \cdots f$$

Die Verallgemeinerungsfähigkeit dieses Formalismus beruht auf der vollendeten Vereinigung der Prinzipien der Statik (Prinzip der virtuellen Geschwindigkeiten) und der Dynamik (d'Alembertsches Prinzip) und besteht darin, dass die Lagrangeschen Bewegungsgleichungen auch für ganz allgemeine Lagrange-Funktionen gültig bleiben; eine Zuordnung zu kinetischer oder potentieller Energie ist gar nicht erforderlich. *Die einzelnen Körper treten nicht mehr explizit auf und die Bewegungsbeschränkungen sind eliminiert.* Dadurch kann von den Eigenschaften der Körper (siehe unten) abgesehen und der Formalismus sogar auf nicht-mechanische Systeme ausgedehnt werden.

Außerdem besitzt die Lagrange-Funktion eine intime Beziehung zu den Erhaltungsgrößen. Wenn nämlich die Lagrange-Funktion von der verallgemeinerten Koordinate q_s *nicht* abhängt, dann ist der verallgemeinerte, zur dieser Koordinate kanonisch-konjugierte Impuls

$$P_s \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_s}; \quad s = 1 \cdots f \quad (3.12)$$

gemäß Gleichung (3.11) offensichtlich zeitunabhängig, mithin eine Integrationskonstante. Bekannte Beispiele hierfür sind die Impulserhaltung im homogenen Raum: $\nabla L \equiv \mathbf{0}$, die Erhaltung des Gesamtimpulses eines abgeschlossenen Systems und die Drehimpulserhaltung im isotropen Raum. Die Erhaltungsgrößen sind also mit *Symmetrien* verknüpft (vgl. § 4.5.1 unten). Dieser Zusammenhang erlaubt die auch für praktische Anwendungen wichtige *systematische* Konstruktion von Erweiterungen der Lagrange-Funktion, wenn zusätzliche Wechselwirkungen einbezogen werden (Nelson, 1979).

Allerdings fügt sich hier die Erhaltung der Gesamtenergie im Falle $\partial L / \partial t = 0$ nicht nahtlos ein, es ist vielmehr

$$\begin{aligned} \frac{dL}{dt} &= \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} \\ &= \sum_{i=1}^f \dot{q}_i \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} + \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} = \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} \end{aligned}$$

Wenn also die Lagrange-Funktion nicht explizit von der Zeit abhängt, dann ist die Funktion

$$h(\{q, \dot{q}\}) = \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L \quad (3.13)$$

eine *Erhaltungsgröße*. Wenn zudem die Lagrange-Funktion die Form

$$L(\{q, \dot{q}\}) = T(\{q, \dot{q}\}) - V(\{q\}); \quad T(\{q, \dot{q}\}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^f a_{ij} \{q\} \dot{q}_i \dot{q}_j \quad (3.14)$$

besitzt, dann ist die Funktion $h(\{q, \dot{q}\})$ gleich der Gesamtenergie E :

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

Die Lagrangeschen Bewegungsgleichungen (3.11) sind die Euler-Lagrangeschen Gleichungen¹⁷ des *Variationsproblems*

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L(\{q(t), \dot{q}(t), t\}) dt \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.15)$$

wobei die Anfangszeit t_1 und die Endzeit t_2 der Bewegung *nicht* variiert werden und die Variation der Bahn an den Endpunkten verschwindet:

$$\delta \{q(t_1), \dot{q}(t_1)\} = \delta \{q(t_2), \dot{q}(t_2)\} = \{0, 0\}$$

Das heißt, dass die durch die Bewegungsgleichungen berechneten Bahnen $\{q(t)\}$ die Wirkung

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

extremal machen.

Diese Aussage ist gleichbedeutend mit dem

Hamiltonschen Prinzip (1834): *Das Integral S ist stationär für jeden Teil der tatsächlichen Bahnkurve im Vergleich mit allen benachbarten Bahnkurven, die dieselben Anfangs- und Endpunkte zu denselben Anfangs- und Endzeiten besitzen.*

Vor allem dieses Integral diente Hamilton als Ausgangspunkt für seine einheitliche Darstellung von Mechanik und Optik, die Schrödinger dann zur Begründung der Wellenmechanik benutzt hat.

Ersetzt man in Gleichung (3.13) die verallgemeinerten Geschwindigkeiten durch die kanonischen Impulse, so stellt sie eine Legendre¹⁸-Transformation von den dynamischen Variablen $\{q, \dot{q}\}$ auf die dynamischen Variablen $\{q, p\}$ dar, und man gelangt zur Hamilton-Funktion (1835)

$$H(p, q, t) \stackrel{def}{=} p \cdot \dot{q} - L(q, \dot{q}, t); \quad \dot{q} = \dot{q}(p, q) \quad (3.16)$$

¹⁷ Euler, *Methodus inveniendi lineas curvas maximi minimive proprietate gaudentes*, 1744; Lagrange, *Abhandlungen zur Variationsrechnung*, 1894; Yourgrau & Mandelstam, *Variational Principles in Dynamics and Quantum Theory*, 1979, App.1.

¹⁸ Adrien Marie Legendre (1752-1833), *Exercices de calcul integral*, 1825ff.

(wir bezeichnen ab jetzt auch den kanonischen Impuls mit dem Kleinbuchstaben p , falls dies nicht zu Verwechslungen führt). An die Stelle der Lagrangeschen Bewegungsgleichung (3.11) tritt das System der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}; \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (3.17)$$

Für die *Zustandsbeschreibung* hat die Hamilton-Funktion gegenüber der Lagrange-Funktion den entscheidenden Vorteil, dass ihre totale Zeitableitung gleich ihrer partiellen Zeitableitung ist:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}H(p, q, t) &= \frac{\partial}{\partial p}H(p, q, t)\frac{dp}{dt} + \frac{\partial}{\partial q}H(p, q, t)\frac{dq}{dt} + \frac{\partial}{\partial t}H(p, q, t) \\ &= \frac{\partial}{\partial t}H(t, q, p) \end{aligned} \quad (3.18)$$

Das heißt nämlich, dass sie bereits dann eine *Erhaltungsgröße* ist, wenn sie nicht explizit von der Zeit abhängt. Wenn zudem die Bedingungen (3.14) gelten, ist sie gleich der Gesamtenergie E :

$$H(p, q) = h(q, \dot{q}(p)) = T(q, p) + V(q) = E = \text{const} \quad (3.19)$$

Systeme, für die diese Beziehung gilt, heißen *konservative Systeme*. Bekannte Beispiele hierfür sind das oben behandelte Pendel und das Kepler-System¹⁹.

Analog zu den explizit zeit(un)abhängigen Kräften sind demnach die explizit zeit(un)abhängigen Potenziale zu den äußeren (inneren) Systemparametern zu zählen. Aus den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (3.17) ergeben sich jene zu

$$\mathbf{K}_i(q) = -\nabla_q V_i(q); \quad \mathbf{K}_e(q, t) = -\nabla_q V_e(q, t) \quad (3.20)$$

Besteht ein konservatives System aus mehreren Körpern, die bis auf ihre Lage und Geschwindigkeiten gleich sind, so kann man je zwei dieser Körper miteinander vertauschen, ohne dass sich an der Bewegung aller übrigen etwas ändert; insbesondere sind sämtliche Erhaltungsgrößen eines Systems invariant gegenüber einer solchen Permutation. In dieser Invarianz steckt der Keim der Ununterscheidbarkeit gleicher Teilchen in der Quantenmechanik, da man von quantenmechanischen Systemen bestenfalls die Werte der Erhaltungsgrößen exakt kennt – wir werden auf diese selten beachtete Tatsache in den §§ 3.3.1 und 5.1.2 zurückkommen.

Für ein konservatives System gibt es gemäß Gleichung (3.19) eine invariante Hyperfläche im Phasenraum $\{q, p\}$, auf der die Bahnkurve liegt. Die Zeitabhängigkeit der dynamischen Variablen: $q = q(t)$ und $p = p(t)$, wird auf dieser Hyperfläche nicht mehr – wie in der Newtonschen Bewegungsgleichung – explizit ausgewiesen, sondern implizit. Mit anderen Worten, eine Kurve im

¹⁹ Johannes Kepler (1571-1630), *Astronomia Nova*, 1609.

Phasenraum kann auch durch andere Variablen als die Zeit – z. B. durch die Kurvenlänge s – parametrisiert werden.

Unabhängig von dieser Parametrisierung sind Ort und Impuls entlang der Phasenraumkurve durch *algebraische* Beziehungen miteinander verknüpft. Für den harmonischen Oszillator lauten sie

$$x = \pm \sqrt{\frac{2}{\kappa} \left(E - \frac{1}{2m} p^2 \right)}; \quad p = \pm \sqrt{2m \left(E - \frac{\kappa}{2} x^2 \right)} \quad (3.21)$$

Hier *separiert* sogar die Abhängigkeit der Energie von den Maximalwerten von Ort und Impuls:

$$E = \frac{\kappa}{2} x_{\max}^2 = \frac{1}{2M} p_{\max}^2 = \frac{\omega}{2} x_{\max} p_{\max} \quad (3.22)$$

Der zuletzt aufgeschriebene Ausdruck, das geometrische Mittel der beiden davor stehenden, stellt eine Verbindung zu der von der Bahnkurve im Phasenraum umschlossenen Fläche her:

$$\oint p dx = \pi x_{\max} p_{\max} = \frac{2\pi}{\omega} E \quad (3.23)$$

Diese hat die Dimension einer Wirkung und spielte eine zentrale Rolle in der sogenannten alten Quantentheorie von 1900 bis 1924 (ter Haar, 1970).

Aufgabe:* Begründen Sie das Hookesche Gesetz (3.6) mit Hilfe des Energiesatzes! Hinweis: Verwenden Sie die Unmöglichkeit eines *perpetuum mobile* und vergleichen Sie die potenzielle Energie beim Zusammendrücken einer Feder mit der potenziellen Energie beim Auseinanderziehen derselben!

Aufgabe: Begründen Sie die Beziehung $\partial f / \partial q_i = \partial \dot{x} / \partial \dot{q}_i$! Hinweis: Drücken Sie \dot{x} durch die Funktion f (3.10) aus!

Aufgabe: Diskutieren Sie den Unterschied zwischen ebenem Pendel und linearem Oszillator! Hinweis: Betrachten Sie auch die maximal mögliche Gesamtenergie!

Aufgabe: Leiten Sie nach dem obigen Vorgehen die Bewegungsgleichung (3.7) für zwei Punktmassen ab, die durch eine Feder mit dem Hookeschen Kraftgesetz (3.6) miteinander verbunden sind! Hinweis: Betrachten Sie von vornherein nur eindimensionale Bewegungen!

Aufgabe: Zeigen Sie, dass die Formeln (3.21) keinen Widerspruch zur Rolle von $x(t)$ und $p(t)$ als unabhängige dynamische Variablen bedeuten! Hinweis: Beachten Sie die Rolle der Energie als Funktion der Anfangswerte $x(0)$ und $p(0)$!

3.1.3 Erzwungene Schwingungen durch eine zeitabhängige äußere Kraft

Zum Zwecke des späteren Vergleichs von klassischen und Quantensystemen behandeln wir kurz die externe und die parametrische Anregung eines klassischen linearen harmonischen Oszillators. Bei ersterer tritt bei der Eigenfrequenz des Oszillators Resonanz auf. Deshalb dachte man zuerst, dass die Spektrallinien der Atome mit den Umlauffrequenzen ihrer Elektronen übereinstimmen. Das Ritzsche Kombinationsprinzip²⁰ zeigt aber, dass es bei den Spektrallinien auf die *Differenzen* bestimmter Größen (Terme) ankommt. Wir werden mit dem verschobenen Quantenoszillator andererseits auch ein Quantensystem kennen lernen, dessen Verhalten in vielem überraschend nahe dem eines klassischen Oszillators ist. Die periodische parametrische Anregung werden wir mathematisch bei der Beschreibung der Elektronen im periodischen Kristallgitter wieder finden.

Durch die Übertragung von Energie auf einen Oszillator durch eine zeitabhängige äußere Kraft K_{ext} wird dieser zu Schwingungen angeregt. Die Newtonsche Bewegungsgleichung lautet

$$m\ddot{x}(t) + \kappa x(t) = K_{ext}(x(t), t) \quad (3.24)$$

Wenn diese Kraft zeitperiodisch mit der Kreisfrequenz ω_e ist, erzwingt sie Schwingungen derselben Kreisfrequenz. Das heißt, die Bahnkurve $x(t)$ setzt sich aus der inneren oder Eigenschwingung mit der Kreisfrequenz $\omega_i = \sqrt{\kappa/m}$ und der erzwungenen Schwingung mit der Kreisfrequenz ω_e zusammen (die Bezeichnung „äußere Schwingung“ ist ungebräuchlich). Für den einfachen Fall $K_{ext}(x, t) = K_e \sin(\omega_e t)$ heißt das

$$x(t) = x(0) \cos(\omega_i t) + \left[\frac{\dot{x}(0)}{\omega_i} - \frac{\omega_e}{\omega_i} \frac{K_e/m}{\omega_i^2 - \omega_e^2} \right] \sin(\omega_i t) + \frac{K_e/m}{\omega_i^2 - \omega_e^2} \sin(\omega_e t) \quad (3.25)$$

Da in der Quantenmechanik die Hamilton-Funktion die grundlegende Systemgröße ist, schreiben wir sie zu Vergleichszwecken auf, und zwar gleich für externe Kräfte, die nur von der Zeit abhängen:

$$H_{tot}(t, x, p) = T(p) + V_{(i)}(x) + V_{ext}(x, t) = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{\kappa}{2} x^2 - K_{ext}(t) \cdot x \quad (3.26)$$

Während das in x lineare Potenzial allein zu Singularitäten führt (der Körper wird unbegrenzt beschleunigt²¹), bewirkt das innere Potenzial die (physikalisch vernünftige) Begrenzung der Bewegung auf ein endliches Gebiet.

²⁰ Walter Ritz (1878-1909), *Über ein neues Gesetz der Serienspektren*, 1908.

²¹ Ein solches Potenzial ist deshalb für $x \rightarrow \pm\infty$ genauso unzulässig wie das Potenzial $-1/r$ für $r \rightarrow 0$.

3.1.4 Erzwungene Schwingungen durch parametrische Anregung

Ändern sich ursprünglich *innere* Parameter des Oszillators aufgrund *äußerer* Ursachen:

$$m(x, t)\ddot{x}(t) + \kappa(x, t)x(t) = 0 \quad (3.27)$$

so spricht man von parametrischer Anregung. Ist diese Anregung harmonisch: z. B.

$$m(x, t) = m = \text{const} \quad (3.28)$$

$$\kappa(x, t) = \kappa_i + \kappa_e \cos(\omega_e t); \quad K_{ext} = -\kappa_e x(t) \cos(\omega_e t) \quad (3.29)$$

so wird aus der Gleichung (3.27) eine Mathieusche Gleichung (Abramowitz & Stegun, 1964, § 20.1). Deren Lösungen sind grundverschieden von der einfachen Überlagerung (3.25) der erzwungenen Schwingung mit der Eigenschwingung. Periodische Lösungen gibt es nur für spezielle Werte der Parameter κ_i/κ_e und $\omega_i/\omega_e \equiv \sqrt{\kappa_i/m}/\omega_e$, sie sind von der Form

$$x(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \left[A_n \cos\left(\frac{1}{2}n\omega_e t\right) + B_n \sin\left(\frac{1}{2}n\omega_e t\right) \right]$$

Von grundlegendem Interesse ist deshalb das Floquetsche Theorem (Floquet, 1883). Es besagt, dass es immer eine spezielle Lösung der Form

$$x(t) = x_\nu(t) = e^{i\nu t} \tilde{x}(t); \quad \tilde{x}(t + 2\pi/\omega_e) = \tilde{x}(t)$$

gibt. Wir werden sie bei der Beschreibung der Elektronen im periodischen Gitterpotenzial wiedertreffen.

Die Hamilton-Funktion lautet $[\kappa(x, t) = \kappa_i + \kappa_e(t)]$

$$H_{tot}(t, x, p) = T(p) + V_{(i)}(x) + V_{ext}(x, t) = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{\kappa_i}{2}x^2 + \frac{\kappa_e(t)}{2}x^2$$

Im Unterschied zur Hamilton-Funktion (3.26) ist hier das äußere Potenzial von derselben Ortsabhängigkeit wie das innere und kann sogar die Umkehrpunkte aufheben $[\kappa_i + \kappa_{ext}(t) \leq 0]$.

3.1.5 Beispiel: Gekoppelte Oszillatoren – Gitterschwingungen

Wir wenden jetzt die vorstehenden Ergebnisse auf ein System aus vielen gekoppelten Oszillatoren an, wie es für die klassische Beschreibung der Gitterschwingungen von Kristallen benutzt wird. Und die ist die Grundlage der quantenmechanischen Beschreibung, auf die wir im Abschnitt 6.3 eingehen werden.

Das Kristallgitter repräsentiert die Gleichgewichtslagen der Atomrümpfe. Diese befinden sich aber nicht in Ruhe, sondern schwingen um ihre jeweilige Gleichgewichtslage. Die Kopplung zwischen den Schwingungen der einzelnen Gitterbausteine führt zu stehenden Wellen im Kristall. Die möglichen

Schwingungszustände des Gesamtsystems kann man als sogenannte Normalmoden darstellen, die, jede für sich, ungekoppelten harmonischen Oszillatoren entsprechen; die Kopplungskonstanten finden sich in den Dispersionsgesetzen wieder²². Dank dessen können wir später die Quantisierungsmethode für den einzelnen Oszillator *ohne* zusätzliche Annahmen auf gekoppelte Oszillatoren übertragen.

Der Einfachheit halber betrachten wir eine lineare homogene Kette von N Atomen, die mittels Federn der Kraftkonstanten κ verbunden sind; d. h. alle Massen und Federkonstanten seien jeweils gleich groß. Die beiden Atome an den Enden der Kette ($l = 1$ und $l = N$) mögen fixiert sein. Die Kraft auf das Atom l ($l = 2, \dots, N - 1$) infolge seiner eigenen Auslenkung $q_l \equiv x_l - x_l^{(0)}$ und der seiner Nachbarn aus den jeweiligen Gleichgewichtslagen $x_l^{(0)}$ bzw. $x_{l\pm 1}^{(0)}$ beträgt²³

$$\begin{aligned} K_l &= \kappa \cdot [q_{l+1}(t) - q_l(t)] - \kappa \cdot [q_l(t) - q_{l-1}(t)] \\ &= \kappa \cdot [q_{l+1}(t) - 2q_l(t) + q_{l-1}(t)]; \quad l = 2, \dots, N - 1 \end{aligned} \quad (3.30)$$

Im Unterschied zu gekoppelten Pendeln schwingen die Atome nicht gegen ein festes Zentrum, sondern gegen die momentane Lage ihrer Nachbarn.

Die Kopplung der Auslenkungen im Kraftterm führt zur Kopplung der N Bewegungsgleichungen. Es ist nun einfacher, die Newtonsche Bewegungsgleichung:

$$M \cdot \ddot{q}_l(t) = K_l(t) \quad (3.31)$$

als die entsprechende Hamilton-Funktion zu diagonalisieren. Da wir harmonische Schwingungen der Gitterbausteine betrachten: $\ddot{q}_l(t) = -\omega^2 q_l(t)$, reduziert sie sich auf die lineare Differenzengleichung

$$q_{l+1} - \left(2 - \frac{\omega^2}{\omega_{kl}^2}\right) q_l + q_{l-1} = 0; \quad \omega_{kl} = \sqrt{\frac{\kappa}{M}} \quad (3.32)$$

mit den Randbedingungen

$$q_1 = q_N = 0 \quad (3.33)$$

²² Vgl. Wigner, *Über die elastischen Eigenschwingungen symmetrischer Systeme*, 1930. – Für die allgemeine Theorie siehe die klassischen Bücher von Thompson & Tait, *Treatise on natural philosophy*, 1879, sowie Born & Huang, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, 1954.

²³ Die Masse M der Gitterbausteine ist übrigens nur bis auf die Masse m der an der Kristallbindung teilnehmenden Elektronen präzise definiert, was jedoch wegen $M \gg m$ für unsere Belange keine Rolle spielt. Wie beim einzelnen Oszillator beschränken wir uns auf harmonische Schwingungen.

Dieses diskrete Eigenwertproblem (die Eigenwerte sind gleich $2 - \omega^2/\omega_{kl}^2$) ist isomorph zu dem Eigenwertproblem für die Toeplitz-Matrix²⁴ $(c_{ij})_{N \times N} = \delta_{j,i \pm 1}$. Dessen Lösung führt auf

$$\omega_j = \sqrt{\frac{\kappa_j}{M}} = \sqrt{\frac{4\kappa}{M}} \left| \sin \left(\frac{1}{2} w_j a \right) \right|; \quad w_j = \frac{2\pi}{Na} j; \quad j = 0 \cdots N-1 \quad (3.34)$$

für die Schwingungsfrequenzen (w_j sind die Wellenzahlen, $a = x_{l+1}^{(0)} - x_l^{(0)}$ die Gitterkonstante) und

$$q_l(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} Q_j(t) \cdot \sin(w_j a l); \quad l = 1 \cdots N; \quad \ddot{Q}_j(t) = -\omega_j^2 Q_j(t) \quad (3.35)$$

für die Auslenkungen. Hierin sind die $Q_j(t)$ die Normalkoordinaten für die N Normalschwingungen. Die Normalkoordinaten sind Analoga der Hauptachsen bei den Kegelschnitten. Da die Anzahl der Freiheitsgrade dieser Kette *endlich* ist, treten auch nur *endlich* viele Wellenzahlen j auf.

Bei Verwendung der periodischen Randbedingungen $q_l = q_{l+N}$ und im Hamilton- Formalismus müssen Koordinaten und Impulse *gemeinsam* transformiert werden, um die Anzahl der Freiheitsgrade zu erhalten.²⁵ Der hier beschrittene Weg ist einfacher, ohne an mathematischer Strenge einzubüßen.

Die Impulse $P_j(t)$ der Normalmoden erhalten wir aus

$$p_l(t) = M \dot{q}_l(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} P_j(t) \cdot \sin(w_j a l); \quad P_j(t) = M \dot{Q}_j(t)$$

Damit wird die Gesamt-Hamilton-Funktion,

$$\begin{aligned} H(\{q_l(t)\}, \{p_l(t)\}) &= T(\{p_l(t)\}) + V(\{q_l(t)\}) \\ &= \frac{1}{2M} \sum_{l=1}^N p_l^2(t) + \frac{\kappa}{2} \sum_{l=1}^{N-1} (q_{l+1}(t) - q_l(t))^2 \end{aligned} \quad (3.36)$$

– wie angestrebt – eine Summe von N voneinander *unabhängigen* Hamilton-Funktionen:

$$\begin{aligned} H(\{q_l(t)\}, \{p_l(t)\}) &= \sum_{j=0}^{N-1} H_j(Q_j(t), P_j(t)); \\ H_j(Q_j(t), P_j(t)) &= \frac{1}{2M} P_j^2(t) + \frac{1}{2} \kappa_j Q_j^2(t); \quad j = 0 \cdots N-1 \end{aligned}$$

²⁴ Otto Toeplitz (1881-1940), *Zur Theorie der quadratischen und bilinearen Formen von unendlich vielen Veränderlichen. I*, 1911; Yip & Agrawal, *Theory and Applications of Toeplitz matrices*, 1979; Berg, *Lineare Gleichungssysteme mit Bandstruktur*, 1986, S.44f.

²⁵ Hierfür bietet sich die Theorie der Formenbüschel an (Gantmacher, 1986, §10.6; Gould, 1957, § I.1; Mehra & Rechenberg, 2001, Bd.3, S.38ff.; Perlis, 1952, § 9-16).

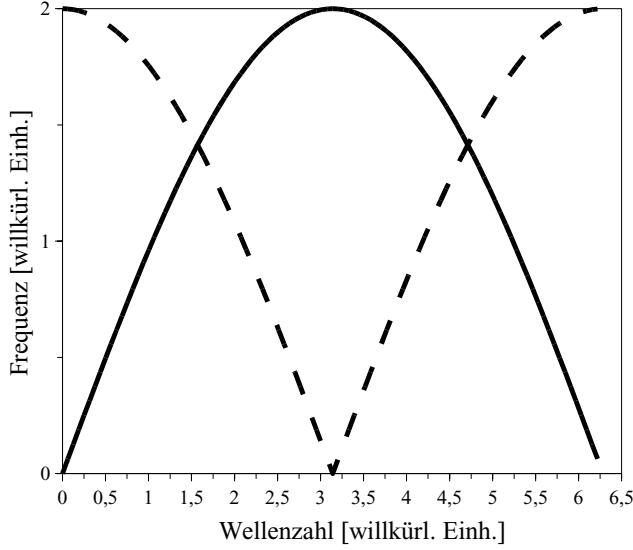


Abb. 3.1. Nichtlineare Abhängigkeit der Frequenzen ω_j (in Einheiten von $\sqrt{\kappa/M}$) von der Wellenzahl w_j (in Einheiten von $1/a$)

Diese beschreiben einzelne, voneinander unabhängige Federschwinger mit den „effektiven“, die Systemeigenschaften enthaltenden Federkonstanten

$$\kappa_j = 4\kappa \sin^2\left(\frac{1}{2}w_j a\right); \quad j = 0 \cdots N-1 \quad (3.37)$$

Das heißt, die Kette als Ganzes besitzt ein *diskretes Frequenzspektrum* mit einem *nichtlinearen* Dispersionsgesetz, siehe Abb. 3.1.

Für jede der N Normalmoden haben wir die Zustandsgleichung eines *einzelnen* Oszillators erhalten:

$$H_j(Q_j(t), P_j(t)) = \frac{1}{2M}P_j^2(t) + \frac{\kappa_j}{2}Q_j^2(t) = E_j = \text{const}; \quad \sum_{j=0}^{N-1} E_j = E$$

Damit ist die klassisch-mechanische Beschreibung linear gekoppelter harmonischer Oszillatoren auf die ungekoppelter harmonischer Oszillatoren mit modifizierten Parametern zurückgeführt. Wir werden diese Darstellung bei der quantenmechanischen Beschreibung der Gitterschwingungen benutzen.

Aufgabe:* Interpretieren Sie die Dispersionsformel (3.37)! Hinweis: Erklären Sie die Zahlenfaktoren 4 und $\frac{1}{2}$!

3.2 Eulers Darstellung der Klassischen Mechanik

Die ganze Naturlehre besteht also darin, dass man bei einer jeglichen vorkommenden Veränderungen zeige, in was für einem Zustand sich die Körper befinden, und dass wegen ihrer Undurchdringlichkeit eben diejenigen Veränderung eintreten müssen, welche wirklich vorgegangen.

(L. Euler, 1750²⁶)

Euler hat die Grundprinzipien seiner Mechanik zwischen 1730 und 1760 entwickelt. Dabei hat er die von Newton und Leibniz zwar geschaffenen, aber zur Darstellung der Mechanik noch nicht durchgehend systematisch verwendeten neuen Methoden der Differenzial- und Integralrechnung konsequent angewandt und vervollkommen (Euler, 1736). Die von ihm begründete Variationsrechnung (Euler, 1744) erlaubt einen grundsätzlich neuen und zu Newton alternativen, nämlich auf der Anwendung von Extremalprinzipien (Prinzip der kleinsten Wirkung) beruhenden Zugang zur Lösung statischer, kinematischer und dynamischer mechanischer Probleme. Er nennt die Mechanik nicht mehr wie Newton „Naturphilosophie“, sondern „Wissenschaft von der Bewegung“.

Euler hat die Theoretische Mechanik wesentlich erweitert, seine methodologischen Prinzipien auf die Flüssigkeiten und die Bewegung starrer Körper ausgedehnt (*Découverte d'un nouveaux principe de mécanique*, 1750), erstmals die Zusammenhänge zwischen Optik und Mechanik systematisch untersucht und dabei, was viel weniger bekannt ist, die Newtonsche Axiomatik vervollkommen, indem er sie auf das Wesentliche reduziert hat. Es ist vornehmlich der letztgenannte Punkt, der die Eulersche Mechanik für unsere Zwecke, nach *verallgemeinerbaren* Alternativen zur Newtonschen Theorie zu fragen, interessant macht. Von Newton bis Hamilton und Jacobi hat nur Euler dem *Zustandsbegriff* bereits in der klassischen Theorie eine ebenso zentrale und umfassende Bedeutung verliehen, wie er sie in der Quantenmechanik besitzt.

Von Euler werden *nur* die *internen* Prinzipien der Bewegung, welche – wie das 1. Newtonsche Axiom – die *Zustandserhaltung* betreffen, als *axiomatische* Grundlage der Mechanik angesehen. Die *externen* Prinzipien dagegen, die Gesetze für die *Zustandsänderung* (wie das 2. und das 3. Newtonsche Axiom), betrachtete er als Probleme, die zu lösen sind, wenn eine Wechselwirkung zwischen Körpern eintritt. Diese Wechselwirkung wird auf eine besondere, ebenfalls axiomatisch vorausgesetzte Eigenschaft aller Körper, die Undurchdringlichkeit, zurückgeführt. Insgesamt erlaubt das Eulersche Modell des Körpers eine *universelle* Darstellung *sowohl* der Zustandserhaltung *als auch* der Zustandsveränderung. Die Unterscheidung zwischen internen und externen Prinzipien der Bewegung lässt sich auf konservative Systeme verallgemeinern und besitzt insofern *universelle Gültigkeit*.

Zur Newtonschen Bewegungsgleichung gelangt Euler, indem er untersucht, von welchen Einflüssen die Änderung der Geschwindigkeit abhängt. Das Prinzip *actio = reactio* leitet er aus der Universalität der allgemeinen Eigenschaf-

²⁶ Euler, *Anleitung*, 1750, § 50. Vgl. auch Ders., *Theoria*, 1765, §§ 75f.

ten der Körper ab, d. h. daraus, dass diese allen Körpern *gleichermaßen* zukommen. Infolgedessen üben zwei Körper während ihrer Wechselwirkung die gleichen Kräfte aufeinander aus, da sie dasselbe Bestreben haben, die Durchdringung zu vermeiden (*Lettres*, 1768, *Lettres* LXXVII f.).

Man muss zwischen der methodologischen Bedeutung eines Axioms und der tatsächlichen Beschreibung eines realen Systems unterscheiden. Die Axiome über die wechselwirkungsfreien Körper haben bei Newton und bei Euler die gleiche Bedeutung: sie legen grundlegende Eigenschaften der Körper fest, unabhängig von jedweder *Art* von Wechselwirkung.²⁷ Da die Zustandsänderungsgleichung von Euler *nicht* axiomatisch festgelegt wird, besteht die Möglichkeit, unter anderen Voraussetzungen andere Bewegungsgleichungen als die Newtonsche abzuleiten (vgl. D. Bernoulli, 1726; d'Alembert, 1743).

Euler hat seine Theorie auch als Gegen-Position zur Gravitationstheorie Newtons und zur Schule der „Attraktionisten“ (der alleinigen Anziehung aller Körper untereinander) entwickelt. Er konnte sich wohl nicht der pragmatischen Haltung Newtons anschließen, ein Fernwirkungsgesetz einfach deshalb zu akzeptieren, weil es zu richtigen Ergebnissen führt, auch wenn man keine physikalische Begründung geben kann und die Fernwirkung selbst aus prinzipiellen Erwägungen ablehnt:

„Es ist unfassbar, dass nichtbelebte rohe Materie ohne Vermittlung durch irgendetwas, das nicht materiell ist, etwas bewirken, auf andere Materie einwirken sollte ohne Kontakt, wie es sein müsste, wenn die Gravitation im Sinne Epikurs ihr wesentlich und inhärent ist. . . . Dass ein Körper per Distanz auf einen anderen wirken kann . . . ohne Vermittlung von irgendetwas, durch das die Aktion und Kraft von einem zum anderen transportiert wird, ist eine große Absurdität.“²⁸

Eulers Verdienst, die Analysis als gemeinsame Sprache für *alle* Teile der physikalischen Theorie etabliert zu haben, überschattet seine Beiträge zur axiomatischen Grundlegung der Mechanik, die größtenteils unbeachtet blieben und die deshalb in diesem Abschnitt skizziert werden.

Euler entwickelt die Mechanik als Dynamik, die er ihrerseits konsequent aus den Eigenschaften der Körper ableitet. Wir folgen deshalb der *Anleitung* (1750) und beginnen mit diesen Eigenschaften.

²⁷ Siehe Westfall, *Isaac Newton*, 1996, für eine Rekonstruktion und Analyse des langen Weges, den Newton zur Formulierung des 1. Axioms gegangen ist.

²⁸ Newton, *3. Brief an W. Bentley*, in: Cohen (Hrsg.), *Isaac Newton's Papers and Letters on Natural Philosophy*, 1958 (zit. nach v. Borzeszkowski & Wahsner, *Newton und Voltaire*, 1980, S.75, Anm.12). Siehe auch Cohen, *A Guide to Newton's PRINCIPIA*, in: Newton, *The Principia*, 1999, S.61f.

3.2.1 Die Körper und ihre allgemeinen Eigenschaften – Eulers Ausschließungsprinzip

Der Gegenstand der Eulerschen Mechanik sind die Körper sowie deren Zustände und Zustandsveränderungen. Die Ursachen für die Erhaltung wie für die Veränderung der Zustände sind in den Eigenschaften der Körper begründet. Die „allgemeinen“, d. h. *jedem* Körper zukommenden und mithin das „Geschlecht der Körper“ definierenden Eigenschaften (*Anleitung*, Cap. 2 bis 5) sind

- (K1) die Ausdehnung,
- (K2) die Beweglichkeit,
- (K3) die Trägheit (von Euler „Standhaftigkeit“ genannt),
- (K4) die Undurchdringlichkeit.

Es sind dies die qualitativen Eigenschaften. Die quantitativen Eigenschaften Volumen und Masse brauchen als Maßbestimmungen der qualitativen Eigenschaften Ausdehnung und Trägheit erst eingeführt zu werden, wenn es um die quantitative Beschreibung der Zustände und ihrer Veränderung geht. Die Beweglichkeit und die Undurchdringlichkeit besitzen kein Maß.

Während Descartes in der Ausdehnung (K1) das Wesen der Körper sah, stellt Euler die Mechanik auf eine *neue Grundlage*, indem er mit Hilfe der Eigenschaften K2, K3 und insbesondere K4 konsequent zwischen dem Raum und dem Körper unterscheidet. Die Beweglichkeit (K2) kommt dem Körper zu, weil eine Differenz zwischen der „Ausdehnung des Raumes“ und der „Ausdehnung des Körpers“ (K1) besteht. Die Beweglichkeit ist einerseits die Voraussetzung für Ortsveränderung und erlaubt andererseits die Unabhängigkeit des Zustandes vom Ort. Die „Bewegung“ des Körpers ist in diesem Fall als eine „Ortsveränderung“ zu verstehen. So werden die Ortskoordinate und die Geschwindigkeit zu unabhängigen dynamischen Variablen.

Dieses Konzept hat Euler bei der Anwendung der Infinitesimalrechnung auf die Klassische Mechanik stimuliert, es lässt aber auch – wie schon von Maupertuis gefordert – *diskrete* Änderungen der Bewegung bzw. des Zustandes zu.

Die grundlegende Rolle kommt der Undurchdringlichkeit (K4) zu. Aus ihr lassen sich die anderen drei Eigenschaften ableiten, weshalb Euler sie als „das Wesen der Körper“ betrachtet. Das hat weitreichende Konsequenzen für die Grundlegung der Mechanik. Die Trägheit sichert die *Zustandserhaltung*, während erst die Undurchdringlichkeit es ermöglicht, die *Zustandsveränderung* eines Körpers in allgemeiner und einheitlicher Form zu diskutieren, einschließlich der *Ursache* dieser Veränderungen.²⁹

²⁹ Newton (*Über die Gravitation . . . ; Principia*, Buch 3, Regel 3) nennt die Undurchdringlichkeit eine „universelle Eigenschaft“ der Körper. Für die Himmelsmechanik spielt sie aber eine viel geringere Rolle als für den Stoß zwischen zwei Körpern. – Siehe auch Euler, *Lettres*, 1768, Lettre LXX.

Euler führt mittels der Undurchdringlichkeit ein Ausschließungsprinzip ein, das auch von anderen Autoren diskutiert wird, bei diesen aber keineswegs die grundlegende Bedeutung erlangt, um für den Ursprung der Kräfte herangezogen zu werden³⁰.

Eulers Ausschließungsprinzip: „*Ein jeglicher Körper muß in dem Raume einen besonderen Ort einnehmen, und es ist unmöglich, daß zwei Körper zugleich an eben demselben Ort sein können.*“ (Anleitung, § 35)

Eine Zustandsveränderung tritt genau dann ein, wenn die Erhaltung des Zustandes zur Durchdringung des Körpers führen würde (Lettre LXXVII). Euler gelingt damit die *Vereinheitlichung aller* mechanischen Kräfte: Es gibt nur einen Typ von Kräften, denn „[alle Kräfte] nehmen ihren Ursprung aus der Undurchdringlichkeit“ (Anleitung, § 49).

Tatsächlich stellt der elastische Stoß die einzige genuine klassisch-mechanische Wechselwirkung dar. Sie besitzt keine eigene Wechselwirkungskonstante. Dies dürfte ein Grund dafür sein, dass die Klassische Mechanik die Proto-Physik wurde, auf der methodologisch alle anderen physikalischen Disziplinen aufbauen.

3.2.2 Zustandserhaltung. Die Eulerschen Axiome

Die Prinzipien der Zustandserhaltung sind die *internen* Prinzipien. Sie werden für den wechselwirkungsfreien Körper formuliert und in den *Axiomen* zusammengefasst³¹:

Axiom E0: Ein wechselwirkungsfreier Körper befindet sich ENTWEDER im Zustand der Ruhe, ODER im Zustand der geradlinig-gleichförmigen Bewegung.

Axiom E1: Ein Körper, der einmal in Ruhe ist, wird immer in Ruhe verbleiben, sofern er nicht von einer äußeren Ursache in diesem Zustande gestört und in Bewegung gesetzt wird.

Axiom E2: Ein Körper verharrt im Zustand der gleichförmigen Bewegung mit gleichbleibender Geschwindigkeit und Richtung, solange keine äußere Ursache diesen Zustand ändert.

Die Reduktion und Uminterpretation des Newtonschen Axiomensystems ist offensichtlich.

Der verbreiteten Darstellung des Zustandes der Ruhe als Grenzfall des Zustandes der geradlinig-gleichförmigen Bewegung (beide Zustände beziehen sich natürlich auf ein vorgegebenes Inertialsystem als Bezugssystem) widerspricht

³⁰ d’Alembert spricht von „undurchdringlichen Raumtheilen“ (*Abhandlung zur Dynamik*, 1997, S.20).

³¹ Siehe Euler, *Theoria*; Lettres LXXI-LXXIV; *Réflexions sur l’espace et le temps*, § 1; *Recherches sur l’origine des forces*, § 1.

folgende *logische* Überlegung von Malebranche³²: „Nichts“ (keine Bewegung, keine Geschwindigkeit) kann nicht der Grenzfall von „etwas Existierendem“ (Bewegung, Geschwindigkeit) sein.

Die Unterscheidung zwischen Ruhe und Bewegung spielt auch in gewissen Transformationseigenschaften der Hamilton-Jacobi-Gleichung eine wichtige Rolle³³. Offenbar muss man die qualitativen (Bewegung, Ruhe) und die quantitativen Eigenschaften (Geschwindigkeit) fein säuberlich auseinander halten.

Die Axiome E1 und E2 schließen einander aus; d. h. sie widersprechen sich nicht, sondern sie treffen nicht gleichzeitig zu. Dadurch sind sie aufeinander bezogen (wie Komplementwinkel), und die Konsequenzen, die sich aus ihnen ableiten lassen, sind *in Harmonie* zu einander.³⁴ Wir werden auf dieses Verhältnis der Harmonie mehrfach zurückkommen.

Der beiden Zuständen übergeordnete und sie verbindende Begriff ist die Trägheit, „welche sich ebenso wohl auf die Bewegung als auf die Ruhe erstreckt“ (*Anleitung*, § 31), nebst der infolge der Trägheit eintretenden Zustandserhaltung. Kein Körper ist in der Lage, von sich aus seinen Zustand zu ändern. Die Undurchdringlichkeit schließt die Existenz innerer Zustände aus: Andernfalls müsste man die Zustandsveränderung auf die Veränderung innerer und äußerer Zustandsvariablen aufteilen.

Die Zustandserhaltung ist nicht an eine spezielle Zustandsgröße gebunden, und die Änderung des Zustandes geschieht nicht notwendigerweise durch eine Kraft. Deshalb kann man die Axiome E1 und E2 geeignet verallgemeinern. Bereits innerhalb der Klassischen Mechanik kann man neben der Geschwindigkeit und dem Impuls weitere Größen als Zustandsgrößen bzw. -funktionen einführen, insbesondere die kinetische Energie und die Gesamtenergie. Die Energie als Erhaltungsgröße existiert auch für *nicht*-klassisch-mechanische Systeme, so dass man auch in der Quantenmechanik von der Eulerschen Axiomatik Gebrauch machen kann.

3.2.3 Eulers Weltmodelle *

Euler hat die Besonderheiten der Zustände eines Körper an speziellen Beispielen erörtert, man könnte auch sagen, an *Modellsystemen* demonstriert³⁵.

Modell 1: Das einfachste Modellsystem ist eine „Welt“, in der es nur einen einzigen Körper gibt. „Diese obgleich unmögliche Voraussetzung kann uns die Wirkungen der eigenen Natur des Körpers selbst von den Wirkungen anderer

³² Nicole Malebranche (1638-1715), *Die Wahrheit suchen*, Bd.2, S.426 (zit. nach Grigorjan, 1985, S.193).

³³ Faraggi & Matone, *The Equivalence Postulate of Quantum Mechanics*, 1998.

³⁴ Euler, *Harmonie entre les principes généraux de repos et de mouvement de M. de Maupertuis*. – In ihrem Buch *Longing for the Harmonies* (1988) zeigen Wilczek & Devine, dass das gesamte Universum im Großen und im Kleinen in physikalischer Harmonie ist.

³⁵ Euler, *Recherches sur l'origine des forces*, § 2; *Lettres*, Lettres LXXI, LXXVII; *Gedanken*, II, §§ 12f.

Körper auf ihn unterscheiden lehren. Es gebe also nur einen Körper, und dieser sei in Ruhe ... Da kein Grund vorhanden ist, warum er sich auf die eine Seite eher als auf die andere bewegen sollte, so schließt man, dass er beständig in Ruhe bleiben wird.“ Der Körper ist entweder in Ruhe oder bewegt sich geradlinig-gleichförmig, da er nicht von sich aus seinen Zustand ändern kann: Die Ursache einer Zustandsänderung liegt außerhalb des Körpers, in der Einwirkung anderer Körper.

Modell 2 ist eine „Welt“, in der es nur zwei Körper gibt, die in Wechselwirkung treten können. In beiden Fällen werden die Körper nicht daran gehindert, sich frei zu bewegen, es sei denn, sie treffen aufeinander. In diesem Fall wird die Wechselwirkung als Einschränkung der Bewegung eines Körpers dahingehend verstanden, den *Ort* des anderen Körpers einzunehmen. Aus dieser Einschränkung resultiert jedoch noch keine Abhängigkeit des Zustandes (oder der Zustandsfunktion) vom Ort, sondern allein eine Zustandsänderung, und zwar eine Änderung der Zustände *beider* Körper.

Modell 3: Alle Körper in der Welt befinden sich im Zustand der Ruhe.

Modell 4: Alle Körper in der Welt bewegen sich mit gleicher Geschwindigkeit und in dieselbe Richtung.

3.2.4 Zustandsänderungen I. Der Zuwachs der Geschwindigkeit. Eulers Hauptprinzip der Zustandsänderung

Die möglichen Zustandsänderungen umfassen die Übergänge von einem (stationären) Zustand in einen anderen. Die Prinzipien der Zustandsänderung gelten gleichermaßen für jedes der Axiome E1 und E2, sie sind unabhängig vom jeweiligen Zustand und verbinden deshalb die beiden Axiome. Die Theorie wird vereinheitlicht: Die Quellen der Kräfte sind ebenso universell wie die Wirkungen, die durch die Kräfte hervorgebracht werden.

Die grundlegende *Zustandsgröße* ist die Geschwindigkeit nach Betrag und Richtung: $Z := \mathbf{v}$ (die Masse ist stets konstant). Mit ihrer Hilfe werden die in den Axiomen (Zustandsgesetzen) beschriebenen qualitativen Verhältnisse quantifiziert:

Zu E0) Der Zustand eines Körpers wird quantitativ durch den Geschwindigkeitsvektor \mathbf{v} beschrieben.

Zu E1) Im Zustand der Ruhe ist $\mathbf{v} = \mathbf{0}$.

Zu E2) Im Zustand der geradlinig-gleichförmigen Bewegung ist $\mathbf{v} = \text{const} \neq \mathbf{0}$.

Die *Änderung* der Zustandsgröße Geschwindigkeit: $dZ = d\mathbf{v}$, ist proportional zum Vektor \mathbf{K} der äußeren Kraft, zur Länge des Zeitintervalls dt , in dem diese Kraft auf den Körper einwirkt, und indirekt proportional zum Widerstand des Körpers gegen Zustandsveränderungen, d. h. zur trägen Masse M (*Anleitung*, §56):

$$dZ = d\mathbf{v} = \frac{\mathbf{K}}{M} dt \quad (3.38)$$

Der Schritt hin zur Bewegungsgleichung (3.5) ist offensichtlich.

Gleichungen für dZ werden wir als *Zustandsänderungsgleichungen* bezeichnen. Sie stellen den notwendigen Zwischenschritt von den Zustandsgleichungen zu den Bewegungsgleichungen dar.

Gleichung (3.38) gilt sowohl für den Fall, dass ein ruhender Körper in Bewegung gesetzt wird, als auch für den Fall, dass die momentane Geschwindigkeit $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ geändert wird. Dies verallgemeinert

Eulers Hauptprinzip der Zustandsänderung: *Die Änderung der Zustandsgröße ist von der Zustandsgröße selbst unabhängig.*

Die Masse des Körpers und die äußere Kraft werden hierbei als unabhängig von der Geschwindigkeit angenommen; sie können jedoch Funktionen der Zeit sein. Die Kraft ist eine „Bewegungskraft“ (Helmholtz, 1911, §8). Bestimmte Kräfte werden ausgeschlossen, weil man andernfalls über den Rahmen der Mechanik der Massenpunkte hinausgehen müsste, sie können aber später durch geeignete Verallgemeinerungen einbezogen werden.

Schon an dieser Stelle kann man von der überragenden Stringenz der Eulerschen Darstellung Gebrauch machen und ein *Auswahlproblem* für relativistische bzw. nicht-relativistische Theorien formulieren:

- (B1) ENTWEDER die Zustandsänderung ist *unabhängig* vom Zustand selbst; man erhält eine nicht-relativistische Mechanik,
- (B2) ODER die Zustandsänderung ist *nicht* unabhängig vom aktuellen Zustand; man erhält eine speziell-relativistische Mechanik.

Aus B1 folgt eine Galilei-invariante Mechanik (*Anleitung*, Kap. 10). Aus B2 lässt sich die Lorentz-Transformation³⁶ ableiten³⁷.

Aufgabe : Zeigen Sie, dass diese Verallgemeinerung *nicht* die Axiome E0 ... E2 verletzt!

3.2.5 Zustandsänderungen II. Der Zuwachs des Quadrates der Geschwindigkeit: Lebendige Kraft und Wirksamkeit

Euler³⁸ multiplizierte die Gleichung (3.38) mit $2\mathbf{v} = 2\frac{d}{dt}\mathbf{s}$, wobei $\mathbf{s}(t)$ die vom Körper zurückgelegte Wegstrecke ist (eindimensionaler Fall), und erhielt die

³⁶ Hendrik Antoon Lorentz (1853-1928, Nobelpreis 1902), *Versuch einer Theorie der elektrischen und optischen Erscheinungen in bewegten Körpern*, 1895; *The Theory of Electrons*, 1909.

³⁷ Suisky & Enders, *Leibniz' foundation of mechanics and the development of 18th century mechanics initiated by Euler*, 2001; *On the derivation and solution of the Schrödinger equation. Quantization as selection problem*, 2003. – Eine andere Ableitung der Lorentz-Transformation, die ohne Bezugnahme auf die Elektrodynamik auskommt, findet sich in Mittelstaedt, *Klassische Mechanik*, 1995.

³⁸ Euler, *Anleitung*, § 59; vgl. D. Bernoulli, *Examen principorum mechanicae*, 1726; *Hydrodynamica*, 1738.

neue Zustandsänderungsgleichung

$$d\tilde{Z} = 2\mathbf{v} \cdot d\mathbf{v} = d(v^2) = \frac{2}{M}\mathbf{K} \cdot d\mathbf{s} \quad (3.39)$$

Die entsprechende Zustandsgröße ist das Quadrat der Geschwindigkeit: $\tilde{Z} := v^2$. Ihre Änderung wird wie zuvor auf die Einwirkung einer äußeren Kraft zurückgeführt, die Dauer der Einwirkung wird jetzt aber durch die zurückgelegte Wegstrecke s gemessen, während die dafür benötigte Zeit keine Rolle mehr spielt.

In der Zustandsgröße $\tilde{Z} = v^2$ ist die Richtung der Bewegung nicht mehr enthalten. Sie ist damit – im Unterschied zur (vektoriellen) Zustandsgröße $Z = \mathbf{v}$ – nicht an eine Bewegung als Ortsveränderung in einer bestimmten Richtung im Raum gebunden. Damit ist ein Grundstein für die Verallgemeinerungsfähigkeit der Zustandsgröße Gesamtenergie gelegt.

In den Mechaniken von Descartes und Newton wird der Impuls als fundamentale Erhaltungsgröße angesehen. Alternativ dazu führte Leibniz (1686, 1695) die „lebendige Kraft“ $M \cdot v^2 = 2T(v) = M\tilde{Z}$ als Erhaltungsgröße ein. Die Einführung der Zustandsgröße $\tilde{Z} = v^2$ ermöglicht es, die Verbindung zwischen der Newtonschen und der Leibnizschen Theorie herzustellen. Zugleich wird der Weg zum Energieerhaltungssatz geebnet.³⁹

Die Gleichung (3.39) lässt sich nämlich auf den dreidimensionalen Fall verallgemeinern und wie folgt integrieren:

$$M\mathbf{v}d\mathbf{v} = \mathbf{K}d\mathbf{x}; \quad \frac{M}{2}v^2 = \int \mathbf{K} \cdot d\mathbf{x} \quad (3.40)$$

Das Integral $W \equiv \int \mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}$ nennt Euler die *Wirksamkeit* (*Anleitung*, § 75). Die Zuordnung einer neuen Bezeichnung begründet er damit, dass dieses Integral invariant gegenüber einer Drehung des Koordinatensystems und dadurch gegenüber dem Integral $\int \mathbf{K}dt$ ausgezeichnet ist. Mit der Wirksamkeit wird zugleich eine Brücke von den Differenzialgleichungen der Bewegung zu den Integralprinzipien der klassischen Mechanik hergestellt, hier namentlich zum Maupertuisschen (1744, 1984) Prinzip der kleinsten Wirkung.

Die Wirksamkeit ist, wenn die Kräfte wirbelfrei sind, gleich dem Potenzial (Kraftfunktion), wie es von Lagrange bis Jacobi benutzt wurde, und gleich der negativen potenziellen Energie: $W(\mathbf{x}) = -V(\mathbf{x})$. Euler hat sie – wie nach ihm Lagrange, Legendre und Laplace – zum Lösen mechanischer Probleme eingesetzt.⁴⁰

³⁹ Die Äquivalenz der Physik der Erhaltungsgrößen (Parmenides – Descartes – Leibniz) mit der Physik der Veränderungsgesetze (Heraklit – Galilei – Newton) hat zuerst Daniel Bernoulli (1700-1782) gezeigt (*Examen principorum mechanicae*, 1726; nach Grigor'jan & Kowaljow, 1981, Kap.5).

⁴⁰ Siehe Brenneke, *Die Verdienste Leonard Eulers um den Potenzialbegriff*, 1924; Kirsanow, *Die Entwicklung des Potenzialbegriffs bei L. Euler*, 1978.

*Aufgabe**: Zeigen Sie, dass es außer dem Impuls weitere Zustandsgrößen geben muss! Hinweis: Berechnen Sie die Geschwindigkeiten nach dem elastischen Stoß zweier Körper aus denen vor dem Stoß unter Benutzung der im § 3.1.1 zitierten Huygensschen Prinzipien H1 ... H3!

3.2.6 Eulers Methode der Maxima und Minima I. Das Prinzip der kleinsten Wirkung *

Da nämlich der Plan des Universums der vollkommenste ist ... Deshalb kann kein Zweifel bestehen, dass alle Wirkungen in der Welt aus den Endursachen mit Hilfe der Methode der Maxima und Minima gleich gut bestimmt werden können wie aus den bewirkenden Ursachen.

(L. Euler⁴¹)

Die beim Stoß zweier Körper auftretenden „Kraftwirkungen“ sind gerade so groß, dass sie das Eindringen der Körper ineinander verhindern, mithin minimal (Lettres LXX, LXXVIII). Setzt man die Kraftwirkung gleich der Aktion $\int mv ds$ (Leibniz, 1695), so lassen sich weit reichende Schlussfolgerungen ziehen.

Integriert man nämlich die rechte Gleichung (3.40) über die Zeit, erhält man

$$\int mv^2 dt = \int mv ds = \int 2W dt \quad (3.41)$$

Die Aktion $\int mv ds$ und folglich auch der Ausdruck $\int 2W dt$ nehmen für die tatsächliche Bewegung ein Extremum an⁴²: $\delta \int_{s_1}^{s_2} mv ds = 0$, wobei sich die Variation über die infinitesimal benachbarten Kurven mit denselben Endpunkten $s_{1,2}$ erstreckt und angenommen wird, dass die Geschwindigkeit des betrachteten Körpers allein von dessen Lage abhängt (damit wird implizit vorausgesetzt, dass nur Potenzialkräfte wirken und folglich die Gesamtenergie des Körpers konstant ist, siehe Yourgrau & Mandelstam, 1979, §4).

Andererseits nimmt im Gleichgewicht die Summe aller Wirksamkeiten ein Minimum oder ein Maximum an (*Anleitung*, §75). Folglich sind die Prinzipien der Ruhe und der Bewegung in *Harmonie* zueinander⁴³ – wie die Axiome E1 und E2.

Hier zeigt sich Eulers Souveränität darin, dass er neben den (oft aus theologischen oder ökonomischen Erwägungen angenommenen) Minima ausdrücklich auch Maxima zulässt, da beide mathematisch zum gleichen Ergebnis

⁴¹ Zit. nach Szabó, *Geschichte der mechanischen Prinzipien und ihrer wichtigsten Anwendungen*, 1987, S.108.

⁴² Euler, *De motu projectorum in medio non resistente*, 1743.

⁴³ Euler, *Harmonie entre les principes généraux de repos et de mouvement de M. de Maupertuis*, 1744. – Bereits 1743 hatte Euler mit Hilfe desselben isoperimetrischen Kalküls sowohl die Bernoullische Lösung der Balkenbiegung als auch die Bewegung von Projektilen und Planeten reproduziert.

führen. Auch Leibniz sprach von Minima oder Maxima der Aktion, kam aber nicht dazu, seine Dynamik umfassend auszuführen (Szabó, 1987, S.102).

Das Prinzip der kleinsten Wirkung – von Euler auch als *indirekte Methode* bezeichnet – wurde von Lagrange weiterentwickelt und von Hamilton in die heute gebräuchliche Form gebracht.⁴⁴ de Broglie (1924) hat die Zusammenhänge des Maupertuisschen mit dem Hamiltonschen und mit dem Fermatschen Prinzip⁴⁵ benutzt, um seine berühmte Beziehung $p = h/\lambda$ zwischen Impuls p und Wellenlänge λ abzuleiten. Die Variation umfasst die tatsächliche, der Newtonschen Bewegungsgleichung entsprechende Bahn sowie alle infinitesimal benachbarten, *virtuellen*: weil der Newtonschen Bewegungsgleichung unter den gegebenen Randbedingungen *nicht* entsprechenden, Bahnen.

Aufgabe:*

- A) Begründen Sie die Aussage, dass die Kraftwirkungen beim Stoß minimal sind! Hinweis: Kann man aus der Undurchdringlichkeit andere Schlussfolgerungen über die Kraftwirkung ziehen?
- B) Leiten Sie hieraus Gl.(3.6) als erste Näherung für den Fall her, dass ein elastischer Körper zusammengedrückt wird! Hinweis: Vergleichen Sie das hierbei auftretende Minuszeichen mit der Lenzschen Regel⁴⁶!

3.3 Konservative Systeme

... dass jede Veränderung in der Natur eine zureichende Ursache haben müsse ...

Die Naturerscheinungen sollen [letztlich] zurückgeführt werden auf Bewegungen von Materien mit unveränderlichen Bewegungskräften, welche nur von den räumlichen Verhältnissen abhängig sind.

(H. Helmholtz, 1847, Einleitung)

Obwohl Huygens, Leibniz, D. Bernoulli, Euler [Gleichung (3.40)] und Hamilton [Gleichung (3.18)] den mechanischen Energieerhaltungssatz bereits in expliziter Form in ihren Händen zu halten scheinen, blieb seine allgemeine Formulierung Helmholtz vorbehalten.⁴⁷

⁴⁴ Für weitere Einzelheiten siehe z.B. Mach, *Die Mechanik in ihrer Entwicklung*, 1988, §3.8; Dugas, *A History of Mechanics*, 1955, KAP. III.V; Whittaker, *Analytical Dynamics*, 1947, Kap. IX; Sommerfeld, *Mechanik*, §37; Szabó, *Geschichte der mechanischen Prinzipien*, 1987, Kap. II.

⁴⁵ Pierre de Fermat (1601-1665), *Abhandlungen über Maxima und Minima*, 1629.

⁴⁶ Emil Lenz, 1833 (nach Sommerfeld, *Elektrodynamik*, 2001, S.13f.).

⁴⁷ Inzwischen hatten allerdings die Untersuchungen von Sadi Carnot (1796-1832) und James Joule (1818-1889) die geistigen Sinne für die Suche nach einer solchen Erhaltungsgröße geschärft. Die Ausdrücke *Energie* (für die lebendige Kraft) und *Arbeit* wurden 1807 von Thomas Young (1773-1829) bzw. 1826 von Jean Victor Poncelet (1788-1867) geprägt (nach v. Laue, *Geschichte der Physik*, 1959, S.95). 1775 hatte die Académie française beschlossen, Arbeiten zum *perpetuum mobile* nicht mehr anzunehmen.

Helmholtz hat damit grundlegende Prinzipien der Newtonschen und der Leibnizschen Mechanik endgültig zusammengeführt. Für unsere Zwecke sind außerdem die Helmholtzschen Konzepte der Konfigurationen (Lagebeziehungen der Körper) eines mechanischen Systems sowie des Zusammenhanges zwischen Arbeitsvorrat und Ausdehnung von Bedeutung; erstere und letztere finden sich – geeignet verallgemeinert – in Schrödingers Wellenmechanik bzw. in Bohrs Atommodell wieder. Nicht zuletzt wegen der überragenden Rolle der Energie in der Quantenmechanik (Weyl, 1950, S.80) bietet es sich an, die klassischen Grundlagen der Quantenmechanik vor allem in der Mechanik der konservativen Systeme zu suchen.

Der Energiesatz umfasst nämlich nicht nur die Energieerhaltung konservativer mechanischer Systeme, sondern auch

- die *Universalität* der Größe Energie und ihrer Erhaltung;
- die Existenz eines *Grundzustandes* für jedes System.

Die Annahme der Existenz eines „permanenten“ oder „Grundzustandes“ bei Bohr (1913) bzw. „Normalzustandes“ bei Heisenberg (1925) ist mit der Helmholtzschen Annahme der Nicht-Existenz eines *perpetuum mobile* bereits erledigt.

Nicht zuletzt erlaubt die Verbindung von Energie und Arbeit die Fixierung der Energieskala auf das globale Minimum der potenziellen Energie $V(x)$.

3.3.1 Die Erhaltung der Energie nach Helmholtz

Wir gehen von der Annahme aus, daß es unmöglich sei, durch irgendeine Combination von Naturkörpern bewegende Kraft fortdauernd aus nichts zu erschaffen.

(H. Helmholtz, 1847, S.7)

Die Entwicklung der Mechanik, die nach Newton einsetzte und über Lagrange bis zu Hamilton reichte (siehe § 3.1.2), zeitigte nicht nur neuartige mathematische Methoden, sondern auch wesentliche Erweiterungen und Verallgemeinerungen der physikalischen Begriffe. Die klassische Mechanik wurde als eine universell gültige Theorie etabliert.

Helmholtz knüpft bei Newton *und* bei Leibniz an. Die „Arbeitsgröße“, die bei der Bewegung der Körper eines Systems von einer Lage in eine andere verbraucht bzw. frei wird, muss immer die gleiche sein, unabhängig von der tatsächlich durchlaufenen Wegstrecke (die Anfangs- und Endgeschwindigkeiten sollen dabei fixiert sein). Andernfalls könnte das System infolge des Durchlaufens verschiedener Wegstrecken unbegrenzt Arbeit leisten. Den „mathematischen Ausdruck dieses Princip“ von der Unmöglichkeit eines solchen *perpetuum mobile* findet Helmholtz in Leibniz' *Prinzip von der Erhaltung der lebendigen Kraft* (Leibnitz, 1686, 1695).

Um im als homogen angenommenen Schwerfeld senkrecht frei in die Höhe h emporzusteigen, braucht ein Körper der Masse M die Geschwindigkeit $v = \sqrt{2gh}$ (g – Erdbeschleunigung); und er erlangt dieselbe beim Herabfallen. Es

ist also die Hälfte der lebendigen Kraft gleich dem Maß der Arbeitsgröße: $\frac{1}{2}L \equiv \frac{1}{2}Mv^2 = Mgh$. Allgemeiner besagt das

Leibnizsche Prinzip: „Wenn sich eine beliebige Zahl beweglicher Massenpunkte nur unter dem Einfluß solcher Kräfte bewegt, welche sie selbst gegeneinander ausüben, oder welche gegen feste Centren gerichtet sind: so ist die Summe der lebendigen Kräfte aller zusammen genommen zu allen [denjenigen] Zeitpunkten dieselbe, in welchen alle Punkte dieselben relativen Lagen gegeneinander und gegen die etwa vorhandenen festen Centren einnehmen, wie auch [immer] ihre Bahnen und Geschwindigkeiten in der Zwischenzeit gewesen sein mögen.“⁴⁸

Die Kräfte, die zu Bewegungen führen, für die dieser Erhaltungssatz gilt, heißen *konservativ*.

In seiner Vorlesung „Dynamik discreter Massenpunkte“ verschmelzt Helmholtz die Leibnizsche Mechanik der Erhaltungsgrößen mit der Newtonschen Mechanik der Bewegungsgleichungen, indem er neben der Kraft und der Bahn zwei neue allgemeine Begriffe einführt: die Gesamtenergie und die Konfiguration eines Systems von im Raume verteilten Massen. Eine Konfiguration ist durch die Gesamtheit der relativen Lagen der Körper zueinander gegeben, wobei der Bezugspunkt durch den Schwerpunkt gebildet wird. Mit den Konfigurationen ist zugleich auch eine „Anordnung von Kräften im Raum“ gegeben, die unabhängig von der tatsächlichen Bewegung der Körper und damit von der kinetischen Energie betrachtet werden kann. Die Gesamtenergie wird bezüglich einer *Gesamtheit* von Konfigurationen definiert, welche das System einnehmen kann. Bezüglich der Gesamtenergie sind die Konfigurationen dieser Gesamtheit *ununterscheidbar*.

Die Menge der Konfigurationen, die bei einer periodischen Bewegung durchlaufen wird, ist eine Invariante des jeweiligen stationären Zustandes. Man kann für bestimmte Zwecke vom zeitlichen Verlauf der Bewegung völlig absehen und allein die Konfigurationen betrachten.

Helmholtz (1911, § 48) leitet die Bedingungen, denen Kräfte genügen müssen, um konservativ zu sein, wie folgt ab:

„Wenn nämlich die Summe der lebendigen Kräfte für jede während der Bewegung wiederkehrende Constellation der Massen auch wieder den gleichen Werth erlangt, so muß dieselbe, obwohl sie nur aus den Massen und den Geschwindigkeitsquadraten zusammengesetzt ist, doch eine reine Function der Coordinaten der Massenpunkte sein.“⁴⁹

⁴⁸ Helmholtz, 1847, S.9. – De facto betrachtete Leibniz *periodische* Bewegungen. Dies ist insofern bemerkenswert, als auch die Quantentheorie zunächst für *periodische* Systeme formuliert wurde.

⁴⁹ Hamel (*Mechanik I*, 1921, § II.1) geht umgekehrt vor. Er verallgemeinert die Galileischen und Leibnizschen Ergebnisse zum Energiesatz und leitet daraus die Newtonsche Bewegungsgleichung ab. Schütz hat auch das 1. und das 3. Newton-

Er befindet sich damit in voller Übereinstimmung mit Leibniz' Forderung, dass die Dynamik der Geometrie nicht widersprechen darf, doch die Dynamik nicht aus den Prinzipien der Geometrie abgeleitet werden kann. Wenn durch die Geometrie eine Gleichheit der Konfiguration angezeigt ist, kann nicht eine Verschiedenheit der dynamischen Charakteristika des Systems eintreten. Die Geometrie spielt eine ähnliche regulative Rolle wie die Logik. Jedes dynamische Prinzip, das der Geometrie und der Logik nicht widerspricht, kann als Grundlage für eine physikalisch konsistente Theorie gelten, sofern außerdem die Erhaltungssätze erfüllt werden.

Helmholtz konstruiert diese Funktion mittels Rückgriff auf die Newtonsche Bewegungsgleichung (3.5). Nach Multiplikation letzterer mit $d\mathbf{x}_a/dt$ und Summation über alle Körper a des betrachteten Systems erhält er die Gleichung

$$\sum_a M_a \frac{d^2 \mathbf{x}_a}{dt^2} \cdot \frac{d\mathbf{x}_a}{dt} = \sum_a \mathbf{K}_a \cdot \frac{d\mathbf{x}_a}{dt} \quad (3.42)$$

Wenn die Massen M_a zeitunabhängig sind, lässt sich die linke Seite als totale Ableitung nach der Zeit schreiben:

$$\frac{d}{dt} \sum_a \frac{1}{2} M_a \left(\frac{d\mathbf{x}_a}{dt} \right)^2 \equiv \frac{dT}{dt}; \quad T = \frac{1}{2} L = \sum_a \frac{1}{2} M_a \left(\frac{d\mathbf{x}_a}{dt} \right)^2$$

Die rechte Seite von Gleichung (3.42) ist nun der vollständige zeitliche Differenzialquotient einer reinen Koordinatenfunktion, wenn die Kräfte wirbelfrei sind:

$$\nabla_a \times \mathbf{K}_a \equiv \mathbf{0}; \quad \mathbf{K}_a = -\nabla_a V \quad (3.43)$$

Dies ist eine wesentliche Aussage über die „räumliche Anordnung der konservativen Kräfte“ (§ 50).

Damit ergibt sich aus Gleichung (3.42)

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{dV}{dt}; \quad \frac{d}{dt} (T + V) = 0 \quad (3.44)$$

„Diese beiden Theile L [T] und Φ [V] nennt man ... die kinetische und die potentielle Energie; erstere ist durch den Bewegungszustand des Systems, letztere durch die Configuration des Systems bedingt.“ (§ 48). Die Configuration eines Systems und sein Bewegungszustand müssen gewissermaßen zusammenpassen. Wenn dies der Fall ist, wird (a) die Gesamtenergie E zu einer *Erhaltungsgröße* für eine bestimmte *Gesamtheit* von Konfigurationen und (b) die kinetische Energie T ebenfalls zu einer Erhaltungsgröße, bezogen auf eine

sche Axiom aus dem Energiesatz abgeleitet (*Prinzip der absoluten Erhaltung der Energie*, 1897; nach Mach, 1988, S.266; vgl. Minkowski, *Raum und Zeit*, 1908, IV).

bestimmte Konfiguration, wenn diese sich reproduziert. Die wechselseitige Anpassung der beiden Erhaltungsgrößen E und T erfolgt mittels der potentiellen Energie V :

$$E - T = V \quad (3.45)$$

Mit anderen Worten, integriert man Gleichung (3.44), so erhält man der Energiesatz in der jetzt gebräuchlichen Form

$$T + V = E = \text{const} \quad (3.46)$$

Die zeitliche Konstanz der linken Seite wird durch den Zusammenhang $v(t) = \frac{d}{dt}x(t)$ zwischen den Summanden hergestellt. Jeder der beiden Summanden hat aber nach wie vor eine eigenständige Bedeutung und kann bezüglich dieser unabhängig von dem anderen betrachtet und interpretiert werden.

Die Beziehung zwischen Kraft- und Potenzialfunktion ist völlig unabhängig von der Bewegungsgleichung. Daher kann einem mechanischen System eine potentielle Energie zugeordnet werden, ohne dass sich die Teile des Systems mit einer bestimmten Geschwindigkeit relativ zueinander bewegen.

Die obige Ableitung zeigt, dass die „Constellationen“ oder „Konfigurationen“ von den „Bahnen“ zu unterscheiden sind. Die Bestimmungsstücke der Bahnen, die „Orte“ und die „Geschwindigkeiten“, sind keine stationären Zustandsgrößen, während die Gesamtheit der Konfigurationen, die von der Bahnkurve $\mathbf{x}(t)$ in einem stationären Zustand durchlaufen werden kann, eine solche ist. Die Newtonsche Bewegungsgleichung gilt hingegen für die Gesamtheit aller derjenigen Konfigurationen, für die sich der Kraftterm angeben lässt.

Die „Auswahl“ der Konfigurationen eines Systems kann als „selbstkonsistent“ zu lösendes Problem formuliert werden, wenn die Energie und die Summe der lebendigen Kräfte bekannt ist. Man wählt eine Konfiguration, konstruiert die Summe der lebendigen Kräfte und prüft die Übereinstimmung mit dem vorgegebenen Wert der Energie u.s.w.

Aufgabe: Vergleichen Sie den Helmholtzschen und den Hamelschen Zugang mit dem Eulerschen! Hinweis: Diskutieren Sie den Zustandsbegriff und den Kraftterm!

3.3.2 Die Axiome der Zustandserhaltung

In enger Anlehnung an die Eulerschen Axiome E0 ... E2 für die Zustandserhaltung eines klassischen Körpers im § 3.2.2 können wir die folgenden Axiome für die Zustandserhaltung eines klassischen konservativen Systems aufstellen:

Axiom C0: Ein isoliertes, d. h. nach außen wechselwirkungsfreies System ist entweder im Zustand der Ruhe ($E = 0$, vgl. § 3.2.3) oder in einem Zustand mit konstanter Gesamtenergie ($E > 0$).

Axiom C1: Ein System, das einmal in Ruhe ist, wird immer in Ruhe verbleiben, sofern es nicht von einer äußeren Ursache in diesem Zustande gestört und in Bewegung gesetzt wird.

Axiom C2: Ein System verharrt im Zustand konstanter Gesamtenergie, solange keine äußere Ursache diesen Zustand ändert.

Wir werden den stationären Zustand mit gegebener Gesamtenergie E kurz „den Zustand E “ nennen.

3.3.3 Arbeit und Arbeitsvorrat – Der Absolutwert der Energie

Wir betrachten nun mit Helmholtz (1911, § 51) ein System im Zustand E , in dem alle bis auf einen Körper räumlich fixiert sein mögen. Die Arbeit, die eine *äußere* Kraft \mathbf{K}_{ext} an diesem System durch die Bewegung dieses nicht fixierten Körpers entlang des Weges \mathbf{s} leistet, ist

$$A = \int_{\mathbf{s}_1}^{\mathbf{s}_2} \mathbf{K}_{ext} \cdot d\mathbf{s} \quad (3.47)$$

Geschieht diese Bewegung so langsam, dass die kinetische Energie dieses Körpers vernachlässigbar bleibt, so ist diese Arbeit, da die externe Kraft der internen entgegengesetzt gleich ist: $\mathbf{K}_{int} = -\mathbf{K}_{ext}$, gleich der Differenz der potentiellen Energien am Anfangs- und am Endpunkt:

$$A = \int_{\mathbf{s}_1}^{\mathbf{s}_2} (-\mathbf{K}_{int}) \cdot d\mathbf{s} = \int_{\mathbf{s}_1}^{\mathbf{s}_2} \nabla V(\mathbf{s}) \cdot d\mathbf{s} = V(\mathbf{s}_2) - V(\mathbf{s}_1)$$

Ist dagegen die kinetische Energie am Endpunkt nicht vernachlässigbar, so geht ein Teil der zugeführten Arbeit in diese über.

Lassen wir nun die Annahme fallen, dass die anderen Körper festgehalten werden, so werden diese auf die obige Bewegung reagieren. Die zugeführte Arbeit ist dann gleich der Summe der Änderungen der potentiellen und der kinetischen Energien aller Körper:

$$A = \Delta V + \Delta T = \Delta E$$

$A < 0$ bedeutet, dass das System Energie an die Umgebung abgibt. Vollzieht sich die Bewegung hinreichend langsam, so wird $A = \Delta V$.

„Aus diesen Betrachtungen geht hervor, dass die potentielle Energie als ein disponibler Arbeitsvorrat anzusehen ist, welchen man für äußere Zwecke nutzbar machen kann, wenn man eine derartige Deformation des Massensystems zulässt, dass $\Phi [V]$ dadurch vermindert wird.“

(Helmholtz, 1911, S.215)

Analog zur potentiellen Energie als in Lageenergie gespeichertem disponiblen Arbeitsvorrat betrachten wir die kinetische Energie als in Bewegungsenergie

gespeicherten disponiblen Arbeitsvorrat, dessen Menge ebenfalls die Gesamtenergie nicht überschreiten kann.

Vom Standpunkt der Newtonschen Bewegungsgleichung aus ist die Energie eine Integrationskonstante. Auch die Hamiltonschen Gleichungen ändern sich nicht, wenn man zur potenziellen Energie einen konstanten Wert hinzu addiert. Deshalb liest man oft, dass die potenzielle und die Gesamtenergie nur bis auf eine Konstante definiert seien. Diese Argumentation widerspricht nun gerade ihrer obigen Beziehung zur Arbeit.⁵⁰ *Die Gesamtenergie eines Systems ist in genau dem Maße physikalisch relevant, wie sie mit anderen Systemen ausgetauscht werden kann.* Ein System im Zustand $E = V_{\min} = \min_{-\infty < x < +\infty} V(x)$ befindet sich im Zustand der Ruhe und kann keine Arbeit leisten. Deshalb ist V_{\min} der physikalische Nullpunkt der Energieskala: $V_{\min} = 0$.

Das Kepler-Potenzial: $V_{\text{Kepler}} \sim -1/r$, gilt nur *außerhalb* eines schweren Körpers. Wie bei ihm ist es auch bei anderen Bindungs-Problemen oft aus anschaulichen Gründen vorteilhaft, den Energienullpunkt in die Grenze zwischen gebundener (negative Energiewerte) und ungebundener Bewegung (positive Energiewerte) zu legen. Die prinzipielle Argumentation bleibt davon unberührt. In den nachfolgenden Paragraphen werden wir sehen, dass auch andere physikalische Konsequenzen des Energiesatzes die Differenz $E - V_{\min}$ als Bezugswert hervorheben.

3.3.4 Der Zusammenhang zwischen Energie und Ausdehnung

Führt man durch die Bedingung (a indiziert wieder die Körper des Systems)

$$V(\{\mathbf{x}_a\}) = \text{const} \quad (3.48)$$

Äquipotenzialflächen ein, so lässt sich die Deformation des Systems mit seinem Übergang von einer Äquipotenzialfläche auf eine andere verbinden. In vielen Fällen wächst die charakteristische Ausdehnung der Äquipotenzialfläche mit dem Wert der potentiellen Energie. Dem entspricht der

Helmholtzsche Zusammenhang zwischen Arbeitsvorrat und Ausdehnung: *Ein System von Massenpunkten vergrößert (verkleinert) seine charakteristischen Dimensionen, wenn ihm mechanische Arbeit zugeführt wird (es mechanische Arbeit an der Umgebung leistet).*

Für Systeme, in denen die potentielle Energie eine homogene Funktion der Koordinaten ist, lässt sich diese Hypothese sofort verallgemeinern:

Zusammenhang zwischen Gesamtenergie und Ausdehnung: *Ein konservatives System vergrößert (verkleinert) seine charakteristischen Dimensionen, wenn seine Gesamtenergie zu(ab)nimmt.*

⁵⁰ Die Behauptung, in der speziell-relativistischen Mechanik werde der Energienullpunkt durch die Ruheenergie $m_0 c^2$ festgelegt, übersieht, dass hier die potenzielle Energie die gleiche Rolle spielt wie in der nichtrelativistischen Mechanik.

Diese Aussage gilt offensichtlich nicht nur für den harmonischen Oszillator und die Kepler-Bahnen, sondern auch im Bohrschen Atommodell. In der Tat bezieht sich diese Formulierung nicht auf eine bestimmte *Darstellung* des Energieerhaltungssatzes. Sie kann deshalb als eine Leitlinie bei der Ableitung nichtklassischer Mechaniken dienen.

Zum Zwecke einer symmetrischeren Behandlung der Orts- und Impuls-Variablen führen wir die folgenden komplementären Feststellungen an.

Komplementäres Leibnizsches, oder Nemorariussches Prinzip: *Die Lageenergie $V(x)$ eines Systems nimmt den gleichen Wert an, wenn das System in die gleiche Impuls-Konfiguration P zurückkehrt.*⁵¹

Komplementäre Helmholtzsche Schlussfolgerung: *Obwohl als Funktion der Konfiguration definiert, kann die potentielle Energie als eine reine Funktion der Impulse dargestellt werden; die Existenz einer solchen Funktion muss gefordert werden.*

Wenn wir für diese Funktion den Ausdruck $E - T(p)$ wählen, erhalten wir erneut den Erhaltungssatz (3.46), wobei die Geschwindigkeiten durch die Impulse ersetzt sind. Wir wählen wieder das Minuszeichen vor der Funktion der Impulse. Diese kinetische Energie $T(p)$ hat gegenüber der Funktion $-T(p)$ den Vorteil des direkteren Ausdrucks der lebendigen Kraft und des

Zusammenhang zwischen Gesamtenergie und Ausdehnung im Impulsraum: *Ein System vergrößert (verkleinert) seine Ausdehnung im Impulsraum, wenn es Energie aus seiner Umgebung aufnimmt (an seine Umgebung abgibt).*

Allgemein gesprochen, stellen also die Funktionen $V(x)$ und $T(p)$ den Zusammenhang zwischen Arbeitsvorrat (Gesamtenergie) und Ausdehnung im Orts- bzw. Impulsraum her; zudem bestimmen sie die Menge der im Zustand E möglichen (Impuls-)Konfigurationen, wie wir in Kürze sehen werden.

Für unseren Modell-Oszillator sind die Ausdehnungen im Orts- und Impulsraum durch die Umkehrpunkte $x_{\max(\min)}$ bzw. $p_{\max(\min)}$ gegeben:

$$E = V(x_{\max(\min)}) = \frac{\kappa}{2} x_{\max(\min)}^2; \quad E = T(p_{\max(\min)}) = \frac{1}{2M} p_{\max(\min)}^2 \quad (3.49)$$

Diese Beziehungen zwischen Energie und Ausdehnung induzieren *Ordnungsrelationen*: Für jede geordnete Menge $E_1 < E_2 < \dots$ bilden die jeweiligen charakteristischen Ausdehnungen ebenfalls geordnete Mengen, und zwar:

⁵¹ Jordanus Nemorarius (Jordanus de Nemora, 13. Jh.), *Elementa Jordani super demonstrationem ponderis secundum sitis; Liber Jordani de rationi ponderis*. – Nach Simonyi (1990, S.146ff.) und Hamel (1921, S.6ff.) hat Nemorarius als Erster vermutet, dass das Heben eines Gewichtes G auf die Höhe h und das Heben des Gewichtes G' auf die Höhe h' die gleiche „Spannung“ erzeugt, wenn $G \cdot h = G' \cdot h'$ gilt.

$x_{\max,1} < x_{\max,2} < \dots$ und $p_{\max,1} < p_{\max,2} < \dots$. Wenn man $x_{\max(\min)}$ und $p_{\max(\min)}$ nicht als Bahnparameter, sondern als charakteristische (Impuls-) Konfigurationen ansieht, dann sollten diese Ordnungsrelationen für alle Systeme gelten, auf die die Begriffe Energie und (Impuls-)Konfiguration anwendbar sind (wobei die jeweiligen Parameter natürlich auf unterschiedliche Weise dargestellt werden). Dank dessen bieten sie einen nützlichen Anhaltspunkt beim Übergang zu nicht-klassischen Systemen.

Aufgabe: Überprüfen Sie den Helmholtzschen Zusammenhang zwischen Arbeitsvorrat und Ausdehnung anhand der elliptischen Kepler-Bahnen! Hinweis: Untersuchen Sie die Abhängigkeit der potentiellen Energie von den räumlichen Bahnparametern!

Aufgabe: Beweisen Sie den Zusammenhang zwischen Gesamtenergie und Ausdehnung anhand des Konzeptes der *mechanischen Ähnlichkeit*⁵²!

3.3.5 Eulers Methode der Maxima und Minima II.

Interne und externe Systemparameter

Die internen Parameter eines Systems sind diejenigen Parameter, die nicht durch äußere Einflüsse verändert werden können. Zu ihnen gehören die Massen der Körper und andere Materialparameter sowie die Extremwerte der Funktionen $V(x)$ und $T(p)$, z. B. $V_{\min} = 0$ und $T_{\min} = 0$ für unser Modellsystem. Nach Euler können diese Extremwerte mit Hilfe der Analysis berechnet werden, unabhängig von der aktuellen Bewegung des betrachteten Systems. Die Minima definieren die stabilen Gleichgewichtszustände des Systems (Mauerpertuis, 1744).

Die externen Parameter können dagegen durch äußere Einflüsse verändert werden. Zu ihnen gehören vornehmlich die Anfangsbedingungen $x_0 \equiv x(t=0)$ und $p_0 \equiv p(t=0)$ (wir betrachten wieder den linearen Oszillator). Alle Funktionen von ihnen sind ebenfalls externe Parameter, insbesondere die Gesamtenergie: $E = V(x_0) + T(p_0)$, und mit dieser die im Zustand E *maximal möglichen* Werte der potentiellen und der kinetischen Energie,

$$V_{\max}^{\text{möglich}}(E) = V(x_{\max}) = E; \quad T_{\max}^{\text{möglich}}(E) = T(p_{\max}) = E \quad (3.50)$$

$V_{\max}^{\text{möglich}}(E)$ und $T_{\max}^{\text{möglich}}(E)$ sind jedoch nicht Extremwerte der Funktionen $V(x)$ bzw. $T(p)$.

Der aktuelle Zustand eines Systems wird demnach sowohl durch interne als auch durch externe Parameter bestimmt.

Von dieser allgemeinen Tatsache gibt es allerdings eine wichtige Ausnahme. Im Zustand der Ruhe sind die Gesamtenergie und die Ausdehnung im (Impuls-)Raum durch die *gleichzeitige* Erfüllung der Bedingungen $V = V_{\min}$ UND $T = T_{\min}$ festgelegt. Hierbei nehmen sowohl die potentielle als auch

⁵² Newton, *Principia*, Buch II, Abschn.7, Prop.32; Whittaker, *Analytical Dynamics*, § 33; Landau & Lifschitz, *Mechanik*, § 10.

die kinetische Energie Extremwerte an. Das heißt, der Zustand der Ruhe ist vollständig durch die „internen Prinzipien“ bestimmt.

Wir vermuten, dass dies ganz allgemein gilt:

Hypothese 1: *Parameter, deren Werte durch die Bedingung $V = V_{\min}$ und $T = T_{\min}$ bestimmt werden, sind in diesem Fall interne Parameter.*

Hypothese 2: *Zustände, in denen die Ausdehnung im (Impuls-) Raum zu Extremwerten geeigneter Funktionen gehören, sind interne Zustände.*

Diese Hypothesen legen die folgende, für den Übergang zur Quantenmechanik wichtige Frage nahe: Gibt es Systeme, für die *alle* Zustände *innere* Zustände sind?

Das Einsteinsche Kriterium (siehe Abschnitt 1.2) und die strukturelle Stabilität der Atomhülle⁵³ lassen nämlich vermuten, dass die Energie bzw. das Energiespektrum von Quantensystemen keine kontinuierliche Funktion kontinuierlicher externer Variablen (wie sie die Anfangsbedingungen darstellen), sondern ein *interner* Systemparameter ist.

3.3.6 Mögliche und nicht mögliche Konfigurationen

The mathematics gives formal coherence to the physical theory and enables predictions to be made about the behaviour of real systems in unexplored regions of parameter space. It also brings out the remarkable symmetries and elegance of the theory ...

(M. Longair, 2003⁵⁴)

Wir kommen nun zu einer *intrinsischen* Beschränkung der Bewegung konservativer Systeme. Sie ist nicht in den Axiomen festgelegt, sondern eine Folge des Energiesatzes. Sie wird uns als Ausgangspunkt für die Modifizierung der Klassischen Mechanik hin zur Quantenmechanik dienen.

Das Axiom N2 und die Eulersche Zustandsänderungsgleichung und folglich auch die Newtonsche Bewegungsgleichung gelten im *gesamten* Konfigurationsraum, genauer, für die Menge aller Konfigurationen unter Beachtung des Euler-Verbots:

⁵³ Atome reagieren nicht auf äußere Stöße geringer Energie (Franck & Hertz, *Über Zusammenstöße zwischen langsamen Elektronen und den Molekülen des Quecksilberdampfes und die Ionisierungsspannung derselben*, 1914; *Über die Erregung der 2536-Å-Quecksilberresonanzlinie durch Elektronenstöße und die Ionisierungsspannung derselben*, 1914; Franck & Jordan, *Anregung von Quantensprüngen durch Stöße*, 1926). Dagegen sind die Kepler-Bahnen strukturell instabil, weil ein Planet bei einem Meteoriteneinschlag seine Bahn verlässt und sich dieser Bahn danach nicht wieder von selbst nähert.

⁵⁴ Malcolm Longair (*1941), *Theoretical Concepts in Physics*, 2003, S.114.

$$C_{\text{möglich}}^{\text{Newton}} \stackrel{\text{def}}{=} C_{\text{all}} \setminus \{\text{Orte der anderen Körper}\} \quad (3.51)$$

Im Unterschied zur Voraussetzung (3.43) für konservative Kräfte machen sie keinerlei Aussagen über die räumliche Anordnung der Kräfte. Wenn das betrachtete System Bewegungsbeschränkungen unterliegt, wird die Menge aller möglichen Konfigurationen – wir werden sie die *Lagrange-Menge*, $C_{\text{möglich}}^{\text{Lagrange}}$, nennen – eine Teilmenge von $C_{\text{möglich}}^{\text{Newton}}$ sein: $C_{\text{möglich}}^{\text{Lagrange}} \subseteq C_{\text{möglich}}^{\text{Newton}}$. Beide Mengen sind vom Zustand des Körpers bzw. Systems unabhängig.

Die Undurchdringlichkeit stellt keine Bedingungen an die Impulse der Körper, deshalb gelten die eben genannten Gleichungen für alle Impuls-Konfigurationen: $P_{\text{möglich}}^{\text{Newton}} = P_{\text{all}}$. Die Menge der beim Vorliegen von Bewegungsbeschränkungen möglichen Impuls-Konfigurationen nennen wir $P_{\text{möglich}}^{\text{Lagrange}}$. Wie im Konfigurationsraum ist auch im Impuls-Konfigurationsraum die Lagrange-Menge eine Untermenge der Newton-Menge: $P_{\text{möglich}}^{\text{Lagrange}} \subseteq P_{\text{möglich}}^{\text{Newton}}$.

Wir zeigen nun, dass und wie der Energiesatz die Menge der möglichen (Impuls-)Konfigurationen weiter einschränkt.

Nach dem in den vorangegangenen Paragraphen Gesagten ist in jedem Zustand E , den ein System einnehmen kann, der als Lageenergie gespeicherte Arbeitsvorrat A begrenzt:

$$A \leq V(x) \leq E; \quad V_{\min} = 0$$

Ein System kann deshalb jeweils nur diejenigen Konfigurationen x einnehmen, für die $V(x) \leq E$ gilt; wir nennen diese Menge, weil Leibniz als erster eine energetische Zustandsgröße untersucht hat, die Leibniz-Menge:

$$C_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}(E) \stackrel{\text{def}}{=} \{x | V(x) \leq E\} \subset C_{\text{möglich}}^{\text{Lagrange}} \quad (3.52)$$

Zum Beispiel ist für den linearen Oszillator

$$\begin{aligned} C_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}} &= \{x | x_{\min} \leq x \leq x_{\max}\} \\ &\subset C_{\text{möglich}}^{\text{Lagrange}} = C_{\text{möglich}}^{\text{Newton}} = C_{\text{all}} = \{x | -\infty < x < +\infty\} \end{aligned}$$

Auf analoge Weise ist der als Bewegungsenergie gespeicherte Arbeitsvorrat B eines Systems im Zustand E begrenzt:

$$B \leq T(p) \leq E$$

Ein System kann deshalb jeweils nur diejenigen Impuls-Konfigurationen p einnehmen, für die diese Ungleichung erfüllt ist; wir nennen diese Menge ebenfalls Leibniz-Menge:

$$P_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}(E) = \{p | T(p) \leq E\} \subset P_{\text{möglich}}^{\text{Lagrange}} \quad (3.53)$$

Für den linearen Oszillator ist

$$P_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}} = \{p | p_{\min} \leq p \leq p_{\max}\} \\ \subset P_{\text{möglich}}^{\text{Lagrange}} = P_{\text{möglich}}^{\text{Newton}} = P_{\text{all}} = \{p | -\infty < p < +\infty\}$$

Da diese Einschränkungen keine Konsequenzen der Zustandserhaltung sind, führen diese Beobachtungen unmittelbar zu der Frage, *unter welchen Bedingungen und für welche mechanischen Systeme diese Einteilung in mögliche und unmögliche (Impuls-)Konfigurationen nicht stattfindet und wie die Mechanik jener Systeme aussieht, denen in jedem Zustand E der gesamte (Impuls-)Konfigurationsraum zugänglich ist?*

Umgekehrt kann man fragen: Ist es möglich, die Menge der möglichen Konfigurationen vorzugeben und daraus die entsprechenden Bewegungsgesetze zu gewinnen?

3.4 Anwendung der Eulerschen Prinzipien der Zustandsänderung auf konservative Systeme

Auch mir scheint es, daß eine physikalische Theorie nur dann befriedigen kann, wenn sie aus elementaren Grundlagen ihre Gebilde zusammensetzt.

(A. Einstein, 1908⁵⁵)

Bevor wir zur Modifikation der Klassischen Mechanik schreiten, fassen wir, um weiteres Rüstzeug zu sammeln, die Prinzipien der Zustandsänderung zusammen.

3.4.1 Die Prinzipien der Zustandsänderung für die Körper

Die Änderungen des Ortes und des Impulses während des Zeitintervalls dt betragen

$$\begin{pmatrix} dx \\ dp \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{M} dt \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & dt \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ K \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{M} p dt \\ K dt \end{pmatrix} \quad (3.54)$$

Die Matrizen der inneren und der äußeren Transformation,

$$\hat{U}_{int} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{M} dt \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \hat{U}_{ext} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & dt \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

gehören zu den inneren beziehungsweise äußeren Prinzipien der Zustandsänderung. Ihre Nicht-Vertauschbarkeit: $\hat{U}_{int}\hat{U}_{ext} \neq \hat{U}_{ext}\hat{U}_{int}$, bedeutet, dass die inneren und äußeren Transformationen nicht aufeinander reduziert werden

⁵⁵ Einstein an Sommerfeld, 14.01.1908, in: Einstein, *Collected Papers*, Bd.5, Dok.73, S.87 (zit. nach Stachel, 2001, S.42).

können, mithin die inneren und äußeren Prinzipien der Zustandsänderung voneinander unabhängig sind.

Man sieht auch an dieser Darstellung, dass die fundamentalen Differenzialgleichungen bezüglich der Zeit von *erster* Ordnung sind (Enders, 1996).

An der Gleichung (3.54) sind die folgenden, zum Teil bereits oben beschriebenen Prinzipien der Zustandsänderung für klassische Körper ersichtlich: Bis einschließlich der Ordnung dt gilt:

Prinzip PK1: Die Änderungen der Erhaltungsgrößen ($dZ = dp$) hängen nur von den äußeren Ursachen (K) ab (vermittelt durch die äußere Transformation \hat{U}_{ext}), nicht aber von den Nicht-Erhaltungsgrößen (x); insbesondere gilt $dp = 0$, wenn $K = 0$;

Prinzip PK2: Die Änderungen der Erhaltungsgrößen (dZ) sind unabhängig von den Erhaltungsgrößen (Z) selbst;

Prinzip PK3: Die Änderungen der Nicht-Erhaltungsgrößen (dx) hängen nur von den Erhaltungsgrößen (Z) ab (vermittelt durch die innere Transformation \hat{U}_{int}); die äußeren Ursachen (K) beeinflussen die Nicht-Erhaltungsgrößen (x) nur indirekt über die Erhaltungsgrößen (Z);

Prinzip PK4: Die Änderungen der Erhaltungs- (dZ) und der Nicht-Erhaltungsgrößen (dx) sind unabhängig voneinander;

Prinzip PK5: Sobald die äußeren Ursachen verschwinden, verbleibt der Körper in dem zu diesem Zeitpunkt eingenommenen Zustand: $Z(t) = const = Z(t_1) = p(t_1)$ für $t \geq t_1$, falls $F(t) = 0$ für $t \geq t_1$. (Dies ist eine Präzisierung des Axioms D3 im § 3.1.1.)

Mit $ddt = dK = 0$ erhält man durch weitere Differenzialbildung die Gleichung

$$\begin{pmatrix} ddx \\ ddp \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{M} dt \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx \\ dp \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{M} dt \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{M} p dt \\ K dt \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{M} K dt^2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Die obere Zeile enthält die Newtonsche Bewegungsgleichung ($M = const$); die untere zeigt, dass – bis zur zweiten Ordnung in dt – eine äußere Kraft die Beschleunigung nicht ändert.

3.4.2 Die Prinzipien der Zustandsänderung für konservative Systeme

Der Kernbereich der Klassischen Mechanik kennt als Wechselwirkung nur die Stöße. Wir zeigen jetzt, dass die für diesen Bereich aufgestellten Prinzipien für eine viel größere Menge von Wechselwirkungen anwendbar sind, auch wenn die Ursachen der Zustandsänderung nicht mehr auf die Undurchdringlichkeit zurückgeführt werden können.

Wir betrachten den harmonischen Oszillator als Modell für einen Körper unter der Einwirkung einer ständigen Kraft, die nur vom Ort, nicht aber von der Zeit explizit abhängt. Der Körper und diese Kraft bilden ein (punkt)mechanisches System. Die Periodizität der Bewegung des Körpers suggeriert,

dass es einen invarianten (zeitlich konstanten) Ausdruck gibt, der – wie die Zustandsfunktionen $Z = \mathbf{v}$ und $\tilde{Z} = v^2$ im kräftefreien Fall – diese Persistenz beinhaltet. Wir stellen uns hier also auf den axiomatischen Standpunkt, nach dem sich ein System ohne äußere Kräfte (die eben genannte Kraft definiert das System und gehört somit zu den inneren Kräften) in einem stationären, das heißt zeitunabhängigen Zustand befindet und wollen jetzt die entsprechende (stationäre, zeitlich konstante) Zustandsfunktion konstruieren.

Infolge der inneren Kraft ist die Geschwindigkeit des Körpers zu keinem Zeitpunkt konstant. Eine solche Zustandsfunktion – die, wenn diese Kraft verschwindet, natürlich in eine reine Funktion der Geschwindigkeit übergehen muss – sollte deshalb neben der Geschwindigkeit weitere zeitabhängige Größen enthalten, die die Zeitabhängigkeit der Geschwindigkeit kompensieren. Eine explizite Zeitabhängigkeit scheidet aus, weil sie nicht Folge der Bewegung des Körpers ist, mithin äußere Einflüsse repräsentieren würde. Als bereits bekannte Nicht-Erhaltungsgröße bietet sich die Auslenkung $x(t)$ an (zumal sie in der Newtonschen Bewegungsgleichung auftaucht).⁵⁶

Aus Symmetriegründen ist der gesuchte Ausdruck eine Funktion der Beträge von Auslenkung und Geschwindigkeit. Angesichts der funktionalen Form der kinetischen Energie (in die die Zustandsfunktion übergehen soll, wenn die Kraft verschwindet) und der Beziehung $\cos^2(\omega t) + \sin^2(\omega t) = 1$ ist der folgende Ansatz naheliegend:

$$Z(t) = Z(p(t), x(t)) = \frac{1}{2M}p(t)^2 + \frac{k}{2}x(t)^2 \stackrel{!}{=} \text{const} \quad (3.56)$$

Hierin ist k ein noch zu bestimmender, aber auch aus Dimensionsgründen notwendiger Faktor.

Es ist offensichtlich, dass dies nicht die Zustandsfunktion des oszillierenden Körpers, sondern die des *Systems Oszillator* ist, das aus diesem Körper *und*, sagen wir, der Federkraft besteht.

Invarianz (Zeitunabhängigkeit) der Zustandsfunktion (3.56) meint nun

$$dZ(p, x) = \frac{1}{M}pdp + kxdx = 0$$

Mit $p(t) = M \frac{d}{dt}x(t) \equiv M\dot{x}(t)$ erhält man hieraus $\dot{p}(t) + kx(t) = 0$, mithin $M\ddot{x}(t) = -kx(t)$. Das ist die Newtonsche Bewegungsgleichung mit der Kraftfunktion $K(x) = -kx$. Damit beschreibt der Summand $\frac{k}{2}x(t)^2$ die zu dieser Kraftfunktion gehörende potentielle Energie, und Z ist gleich der Gesamtenergie E .

Nach der Teilung durch dt lässt sich die Gleichung $dZ(p, x) = 0$ wie folgt schreiben:

⁵⁶ Wir müssen hier nicht fordern, dass der Zustand auch vom Ort abhängen kann, denn die Auslenkung x ist kein Ort im äußeren Raum, sondern tritt nach außen nurmehr als innerer Parameter auf, der als verallgemeinerte Koordinate die Bewegungsbeschränkungen repräsentiert.

$$\frac{dZ}{dt} = \frac{\partial Z}{\partial p} \frac{dp}{dt} + \frac{\partial Z}{\partial x} \frac{dx}{dt} = 0$$

Allgemeine Lösungen dieser Gleichung lauten

$$\frac{\partial Z}{\partial p} = a \frac{dx}{dt}; \quad \frac{\partial Z}{\partial x} = -a \frac{dp}{dt}$$

Die Kompatibilität mit der Newtonschen Bewegungsgleichung erfordert $a = 1$. Wenn der kanonische gleich dem kartesischen Impuls ist, sind diese Gleichungen wegen $Z = E$ isomorph zu den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (3.17). Allerdings wurden sie hier nur für den stationären Fall abgeleitet – ihre Gültigkeit für den nichtstationären Fall werden wir sogleich nachweisen.

Dazu betrachten den Fall einer von außerhalb auf das System harmonischer Oszillator erfolgenden zeitabhängigen Einwirkung, die mit Hilfe der explizit zeitabhängigen potentiellen Energie $V_{ext}(x, t)$ beschrieben sei. Als Zustandsfunktion wählen wir aus den oben genannten Gründen die jetzt explizit zeitabhängige Hamilton-Funktion:

$$Z(t) = H(t, x(t), p(t)) = H_0(x(t), p(t)) + V_{ext}(t, x(t))$$

Hierin ist $H_0(x, p) = \frac{k}{2}x^2 + \frac{1}{2M}p^2$. Wenn nun die Zustandsänderung nur von den *äußeren* Einflüssen abhängt, haben wir

$$dZ = dH = \frac{\partial H}{\partial p} dp + \frac{\partial H}{\partial x} dx + \frac{\partial H}{\partial t} dt \stackrel{!}{=} \frac{\partial V_{ext}}{\partial t} dt$$

Folglich ist erneut $\frac{\partial H}{\partial p} dp + \frac{\partial H}{\partial x} dx = 0$. Damit haben wir die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen auch für den nichtstationären Fall abgeleitet.

In enger Anlehnung an die im vorigen Paragraphen aufgeführten Prinzipien der Zustandsänderung für klassische Körper (PK1 ... PK5) können wir folglich ganz analoge Prinzipien der Zustandsänderung für konservative Systeme aufstellen:

Prinzip PS1: Die Änderungen der Zustandsgrößen (dZ) hängen nur von den äußeren Ursachen ($\partial V_{ext}/\partial t$) ab, nicht aber von den inneren Ursachen (H_0); insbesondere gilt $dZ = 0$, wenn $\partial V_{ext}/\partial t = 0$;

Prinzip PS2: Die Änderungen der Zustandsgrößen (dZ) sind unabhängig von den Zustandsgrößen (Z) selbst;

Prinzip PS3: Die Änderungen der Nicht-Zustandsgrößen (dx, dp) hängen nur von den Zustandsgrößen (Z) ab; die äußeren Ursachen ($\partial V_{ext}/\partial t$) beeinflussen die Nicht-Zustandsgrößen (x, p) nur indirekt über die Zustandsgrößen (Z);

Prinzip PS4: Die Änderungen der Zustands- (dZ) und der Nicht-Zustandsgrößen (dx, dp) sind unabhängig voneinander;

Prinzip PS5: Sobald die äußeren Ursachen verschwunden sind, verbleibt das System in dem zu diesem Zeitpunkt eingenommenen Zustand: $Z(t) = \text{const} = Z(t_1) = H_0 + V_{ext}(t_1, x(t_1))$ für $t \geq t_1$, falls $\partial V_{ext}/\partial t = 0$ für $t \geq t_1$.

Wir haben hierbei angenommen, dass die Rückwirkung auf die äußeren Ursachen vernachlässigbar ist (z. B. deshalb, weil das äußere System viel größer ist⁵⁷).

Dass die Zustandsänderung von $\partial V_{ext}/\partial t$ und nicht von V_{ext} selbst abhängt, bedeutet, dass zeitunabhängige „äußere Ursachen“ als „innere Ursachen“ in das System zu integrieren sind.

Die Eulersche Darstellung der Mechanik ist also kompatibel mit der Hamiltonschen Mechanik, die Prinzipien der Zustandserhaltung und -änderung für die Körper finden *cum grano salis* Anwendung auf konservative Systeme. Weiter unten werden wir sehen, dass sie – bei geeigneter Darstellung der Zustandsgrößen – auch für Quantensysteme gelten.

3.4.3 Separation der internen und externen Parameter am Beispiel des harmonischen Oszillators *

In der Lösung (3.8) treten die internen (Kreisfrequenz) und externen Parameter (Anfangswerte) gemischt auf. Es sollte nach dem im § 3.3.5 Gesagten instruktiv sein, diese Lösung so umzuformen, dass sie voneinander getrennt werden. Ganz allgemein gilt: Separationen verdeutlichen die tatsächlichen physikalischen Zusammenhänge. Hier betrifft es die Rück-Trennung der konstanten (Bewegungsgesetze, Systemparameter) und der veränderlichen Einflüsse (Anfangsbedingungen)⁵⁸.

Die Separation gelingt sofort, wenn wir auf die gekoppelte Darstellung beider dynamischer Variablen: $x(t)$ und $p(t)$, zurückgreifen:

$$\begin{pmatrix} x(t) \\ v(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & \frac{1}{M\omega} \sin(\omega t) \\ -M\omega \sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x(0) \\ v(0) \end{pmatrix} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{D}(t) \begin{pmatrix} x(0) \\ v(0) \end{pmatrix}$$

Diese Form erhält man übrigens auch, wenn man die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (3.17) als Gleichungssystem löst. Die Matrix $\hat{D}(t)$ enthält nur noch interne Parameter und die Zeit. Sie beschreibt Drehungen im Phasenraum und besitzt daher die Gruppeneigenschaft

$$\hat{D}(t) = \hat{D}(t - t') \cdot \hat{D}(t'); \quad 0 \leq t' \leq t$$

Diese Beziehung ist ein punktmechanisches Analogon zum Huygensschen Prinzip der Wellenausbreitung.⁵⁹

⁵⁷ Vgl. Born, Heisenberg & Jordan, *Über Quantenmechanik II*, 1926, §5.

⁵⁸ Vgl. hierzu Wigner, *Events, laws of nature, and invariance principles*, 1963.

⁵⁹ Vgl. Enders, 1996. – Tatsächlich wurde das Superpositionsprinzip von Huygens zuerst für mechanische Bewegungen formuliert: Beim lotrechten Fall addieren sich die in jedem Augenblick erlangten Geschwindigkeitszuwächse zu der davor inne gehabten Geschwindigkeit (*Horologium oscillatorium*, 1673; nach Simonyi, 1990, S.241f.). Dies impliziert die Differenzierbarkeit der Geschwindigkeit: $v(t + dt) = v(t) + dv$, mithin die Glattheit der Bahnkurven.

Da das Zeitverhalten explizit allein von der Kreisfrequenz, nicht jedoch von der Masse abhängt, wollen wir die Vermischung beider in der Matrix $\hat{D}(t)$ auch noch überwinden. Dazu diagonalisieren wir $\hat{D}(t)$ (was sonst?):

$$\begin{pmatrix} \tilde{x}(t) \\ \tilde{p}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\omega t} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{x}(0) \\ \tilde{p}(0) \end{pmatrix} = \hat{D}(t) \begin{pmatrix} \tilde{x}(0) \\ \tilde{p}(0) \end{pmatrix} \quad (3.57)$$

Die transformierten Variablen sind

$$\begin{pmatrix} \tilde{x}(t) \\ \tilde{p}(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & \frac{i}{M\omega} \\ iM\omega & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} x(t) + \frac{i}{M\omega}p(t) \\ iM\omega x(t) + p(t) \end{pmatrix} \quad (3.58)$$

Sie besitzen gemäß Gleichung (3.57) die höchst einfachen Zeitabhängigkeiten

$$\tilde{x}(t) = \tilde{x}(0)e^{i\omega t}; \quad \tilde{p}(t) = \tilde{p}(0)e^{-i\omega t}$$

Aus ihnen lassen sich sofort zwei Erste Integrale der Oszillator-Bewegung ablesen, nämlich

$$I_1 = e^{-i\omega t}\tilde{x}(t) = \tilde{x}(0); \quad I_2 = e^{i\omega t}\tilde{p}(t) = \tilde{p}(0)$$

Da es keine weiteren unabhängigen Ersten Integrale gibt, ist die Energie eine Funktion dieser beiden. Tatsächlich ist sie – bis auf einen Faktor – gleich dem Produkt beider: $E = -i\omega I_1 I_2$. Folglich *faktorisieren* die Variablen (3.58) die Hamilton-Funktion (3.19):

$$H(x, p) = \frac{M}{2}\omega^2 x^2(t) + \frac{1}{2M}p^2(t) = -i\omega \tilde{x}(t)\tilde{p}(t) = -i\omega \tilde{x}(0)\tilde{p}(0) = E$$

Schließlich genügen die Variablen (3.58) nicht Bewegungsgleichungen von zweiter Ordnung, wie $x(t)$ und $p(t)$, sondern von *erster* Ordnung in der Zeit:

$$\frac{d}{dt}\tilde{x}(t) = +i\omega\tilde{x}(t); \quad \frac{d}{dt}\tilde{p}(t) = -i\omega\tilde{p}(t)$$

Die Faktorisierung jener: $(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2) = (\frac{d}{dt} + i\omega)(\frac{d}{dt} - i\omega)$, ist unschwer zu erkennen.

Diese Separation von innerer Bewegung und externen Einflüssen ist nur unter Verwendung der imaginären Einheit $i \equiv \sqrt{-1}$ möglich. Dies gibt ihr eine *physikalische* (und nicht nur mathematisch-rechentechnische) Berechtigung bereits in der Klassischen Mechanik. Das erleichtert ihre Verwendung in der Wellenmechanik (in der *Vierten Mitteilung* äußerte Schrödinger noch Vorbehalte gegenüber einer Faktorisierung, die i enthält).

Wir werden Variablen wie \tilde{x} und \tilde{p} in der Wellenmechanik wieder begegnen; sie finden auch bei den Untersuchungen zur geometrischen Phase Verwendung (Shapere & Wilczek, 1989).

4. Von der Klassischen Mechanik zur Quantenmechanik

Man hat versucht, die nicht mechanischen Energieformen durch hypothetische Vorstellungen auf die rein mechanischen Urformen zurückzuführen. ... Derartige Vorstellungen sind wegen ihrer Anschaulichkeit sehr nützlich, dürfen aber wegen ihres hypothetischen Charakters nicht mit dem Inhalt des Energieprinzips vermengt werden. Dieses Prinzip steht als ein bis jetzt überall bestätigter Erfahrungssatz über diesen Hypothesen [über die Beschaffenheit der wechselwirkenden Systeme] und kann der Veranschaulichung entbehren.

(H. von Helmholtz, 1911, § 52¹)

Der Übergang von der Klassischen Mechanik zur Quantenmechanik ist historisch auf zwei Wegen erfolgt. Im Anschluss an die Einführung des Wirkungsquantums durch Planck und das Bohrsche Atommodell beziehungsweise de Broglies Konzept der Materiewellen entwickelten Heisenberg und Schrödinger die Matrizen- beziehungsweise Wellenmechanik². Die Ergebnisse sind zwar hinsichtlich Ausgangspunkt und Methode ganz verschieden, doch mathematisch weitgehend äquivalent³ und können sich daher gegenseitig ergänzen.

Heisenberg (1925) beginnt mit einer radikalen Analyse der klassischen Bahnbewegung und kommt zu der Erkenntnis, dass es sich bei der neuen Theorie nicht lediglich um eine „Abweichung von der klassischen Mechanik“ handeln könne, da „schon die Einstein-Bohrsche Frequenzbedingung eine so völlige Absage ... an die dieser Mechanik zugrunde liegende Kinematik darstellt, dass auch bei den einfachsten quantentheoretischen Problemen an eine

¹ Wir werden Helmholtz folgen, das Energieprinzip als universell gültig voraussetzen und aus dieser Gültigkeit Schlussfolgerungen über die Beschaffenheit von nicht-klassischen Systemen ableiten.

² Mehra & Rechenberg, *The Historical Development of Quantum Theory*, 1999f.; Ludwig, *Wellenmechanik*, 1970; Simonyi, *Kulturgeschichte der Physik*, 1990, Abschn. 5.3; Jammer, *The conceptual development of quantum mechanics*, 1967, Kap.5.

³ Schrödinger, *Über das Verhältnis der Born-Heisenberg-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen*, 1926; *Zweite Mitteilung*, S.513f. – Diese Äquivalenz hatte bereits David Hilbert (1862-1943) vermutet: „Hilbert ... sagte, er hätte nur einmal mit Matrizen zu tun gehabt, und zwar bei der Lösung von Differenzialgleichungen mit Randbedingungen. Um weiterzukommen, sollten sie sich daher die Differenzialgleichung ansehen, aus der sich ihre Matrizen ergeben hätten. Die Physiker hielten das für eine Ungereimtheit und dachten sich, Hilbert wüsste nicht, wovon er redet.“ (Condon, *60 Years of Quantum Physics*, 1962)

Gültigkeit der Klassischen Mechanik schlechterdings nicht mehr gedacht werden kann.“ Seine Intentionen fasst er bereits im Titel zusammen: „Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen“. Schrödinger gelangt auf einem völlig anderen Weg zu seiner Gleichung, indem er von der Analogie zwischen Wellenoptik und geometrischer Optik und der Hamilton-Jacobischen Theorie ausgeht.

„Angeregt wurde meine Theorie durch L. de Broglie, Ann. de Physique (10) **3**, S. 22. 1925 (Thèses, Paris 1924) und durch kurze, aber unendlich weitblickende Bemerkungen A. Einsteins, Berl. Ber. 1925. S. 9ff. Eines genetischen Zusammenhangs mit Heisenberg bin ich mir durchaus nicht bewußt. Ich hatte von seiner Theorie natürlich Kenntnis, fühlte mich aber . . . durch den Mangel an Anschaulichkeit abgeschreckt, um nicht zu sagen abgestoßen.“⁴

Der Grund hierfür ist offensichtlich: „Die Heisenbergsche Theorie knüpft die Lösung eines Problems der Quantenmechanik an die Auflösung eines Systems von unendlich vielen algebraischen Gleichungen . . . “ (*Ebda.*, S.735). Schrödingers Weg zeichnet sich durch die größere Anschaulichkeit einer Differentialgleichung gegenüber unendlichdimensionalen Matrizengleichungen aus. Während die Matrizenmechanik eine „wahre Diskontinuumstheorie“ ist (Born & Jordan, 1925, S.879), bedeutet die Wellenmechanik „gerade umgekehrt von der klassischen Mechanik aus einen Schritt auf die Kontinuumstheorie zu“ (Schrödinger, *a. a. O.*); die Übergänge zwischen verschiedenen stationären Zuständen sieht Schrödinger als Schwebungen der Eigenschwingungen⁵.

Schrödinger hat die Klippen, die er bei der Schöpfung der Wellenmechanik zu umschiffen hatte, mit außerordentlicher Klarheit beschrieben. Wir werden vier der von ihm benannten Probleme lösen. Doch zunächst skizzieren wir seinen Zugang.

4.1 Schrödingers Ableitung der Wellengleichung

Denn es zeigt sich in allen Fällen der klassischen Dynamik, die ich bisher untersucht habe, dass die Gleichung $\text{div grad } \psi - u^{-2} \partial^2 \psi / \partial t^2$ die Quantenbedingungen in sich trägt. Sie sondert in gewissen Fällen, und zwar in denjenigen, in denen die Erfahrung dafür spricht, selbsttätig gewisse Frequenzen und Energieniveaus als die für die stationären Vorgänge möglichen aus, ohne irgendeine weitere Zusatzannahme als die für eine physikalische Größe beinahe selbstverständliche Anforderung an die Funktion ψ : dieselbe soll im ganzen Konfigurationsraum eindeutig endlich und stetig sein.

(E. Schrödinger, *Zweite Mitteilung*, S.511)

⁴ Schrödinger, *Über das Verhältnis der Born-Heisenberg-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen*, S. 735, Fn.2.

⁵ Schrödinger, *Erste Mitteilung*, S.374ff.; *Zweite Mitteilung*, S.514; *Dritte Mitteilung*, S.465; *Vierte Mitteilung*, S.121f.

Schrödinger sieht die Differenz zwischen klassischer und quantenmechanischer Theorie anders als Heisenberg, er äußert den „Verdacht, ... daß unsere klassische Mechanik bei sehr kleinen Bahndimensionen ... versagt“, so dass es gilt, „eine ‚undulatorische Mechanik‘ zu suchen.“ (Zweite Mitteilung, S. 496f.) Diese Differenz stellt sich dar als das Verhältnis zwischen einer „genaueren“ und einer „weniger genauen“ Theorie.

„Man muss statt von den Grundgleichungen der Mechanik von einer Wellengleichung für den q -Raum ausgehen und die Mannigfaltigkeit der nach ihr möglichen Vorgänge betrachten. Die Wellengleichung wurde in dieser Mitteilung noch nicht explizite benützt und überhaupt noch nicht aufgestellt. Das einzige Datum zu ihrer Aufstellung ist die durch (6) oder (6') als Funktion des mechanischen Energieparameters bzw. der Frequenz gegebene Wellengeschwindigkeit und durch dieses Datum ist die Wellengleichung nicht eindeutig festgelegt. Es ist gar nicht ausgemacht, dass sie gerade von der zweiten Ordnung sein muss, nur das Bestreben nach Einfachheit veranlaßt dazu, es zunächst einmal damit zu versuchen. Man wird dann für die Wellenfunktion ansetzen

$$\operatorname{div} \operatorname{grad} \psi - \frac{1}{u^2} \psi = 0 \quad (4.1)$$

gültig für Vorgänge, welche von der Zeit nur durch einen Faktor $e^{2\pi i \nu t}$ abhängen.“ (S. 509f.)

Diese Gleichung hat den Vorzug, der „Wellennatur“ der quantenmechanischen Systeme entgegenzukommen, die nach de Broglie unabdingbar ist – sie trägt aber den ebenso unabdingbaren Nachteil in sich, keinen Hinweis auf ein „Wirkungsquantum“ oder eine Größe von der Dimension einer Wirkung erkennbar werden zu lassen. Eine solche, wenn auch klassische, d. h. nicht-gequantelte Größe, stellt allerdings die Hamilton-Jacobische Theorie bereit. Schrödinger kombiniert deshalb die Wellengleichung mit dieser Theorie.

Die System- und Zustandseigenschaften können nur über die Phasengeschwindigkeit u in Gleichung (4.1) eingehen [sie können auch in die Metrik eingehen (vgl. *Ebda.*, § 2), doch birgt dieser Fall physikalisch nichts Neues]. Diese muss deshalb eine Funktion von $V(x)$ und von E sein: $u = u(E, V(x))$. Vor allem aber ist die Funktion ψ – im Unterschied zu einer gewöhnlichen klassischen Auslenkung – nicht unabhängig von der Wellengleichung gegeben, sondern wird durch diese erst „definiert“, so dass sie nicht nur von den Koordinaten und der Zeit, sondern auch von der Energie abhängt: $\psi = \psi_E(x, t)$. Man hat also nicht eine, sondern *zwei unbekannte* Größen: $\psi_E(x, t)$ und $u(E, V(x))$, und kann dementsprechend zwei Fälle unterscheiden:

1. u ist gegeben, ψ ist gesucht (direktes Problem);
2. ψ ist gegeben, u ist gesucht (inverses Problem).

Wenn weder u noch ψ bekannt ist, handelt es sich um eine implizite Gleichung für u und für ψ (und gegebenenfalls auch für E).

Schrödinger betrachtete das direkte Problem, nachdem er für u die Geschwindigkeit der Flächen konstanter Wirkung nach Hamilton und Jacobi verwendete. Wir wollen anhand des inversen Problems zeigen, dass sich dieses Ergebnis für u auch mit Hilfe der Helmholtzschen Überlegungen ableiten lässt.

Dazu schreiben wir Gleichung (4.1) mit $\psi_E(x, t) = \psi_E(x)e^{i\omega t}$ in der Form

$$\frac{-1}{\omega^2 \psi_E(x)} \frac{\partial^2 \psi_E(x)}{\partial x^2} = \frac{1}{u^2(E, V(x))} \quad (4.2)$$

Hier wechselt die linke Seite an den Wendepunkten der Funktion $\psi_E(x)$ das Vorzeichen (da sie „im ganzen Konfigurationsraum eindeutig endlich und stetig sein“ soll, besitzt sie mindestens zwei Wendepunkte). Daher muss auch u^2 als Funktion von x Vorzeichenwechsel besitzen; u ist also keine klassische Geschwindigkeit, sondern eine Funktion der Differenz

$$E - V(x) \quad (4.3)$$

Diese Differenz wurde bereits im § 3.3.4 diskutiert. Zum Schrödingerschen Ausdruck gelangt man dann durch Dimensionsbetrachtungen.

Das heißt, Schrödingers Annahme, dass das System durch eine Wellengleichung beschrieben werden kann, reicht bereits aus, um die Eigenschaften der Funktion $u(E, x)$ zu erhalten; die Hamilton-Jacobische Gleichung ist sogar entbehrlich.

Im Energiesatz für klassische Systeme tritt neben der Orts- die Impulsvariable auf. In Gleichung (4.1) gibt es keine explizite Abhängigkeit von der Impulsvariablen. Das System wird hier allein durch die Gesamtenergie und die potentielle Energie charakterisiert. Der Beziehung (4.3) lässt sich jedoch die komplementäre Beziehung zwischen Gesamtenergie und kinetischer Energie im Impulsraum gegenüberstellen:

$$E - V(x) \leftrightarrow E - T(p) \quad (4.4)$$

Dementsprechend können wir eine Ausbreitungsgeschwindigkeit im Impulsraum:

$$u(E, x) \leftrightarrow w(E, p) \quad (4.5)$$

und die zu Gleichung (4.2) komplementäre Helmholtz-Gleichung betrachten:

$$\frac{-1}{\omega^2 \phi_E(p)} \frac{\partial^2 \phi_E(p)}{\partial p^2} = \frac{1}{w^2(E, T(p))} \quad (4.6)$$

Tatsächlich wird in der Wellenmechanik die Bewegung im Phasenraum durch Paare von Größen und Beziehungen im Orts- und im Impulsraum dargestellt. In der nachfolgenden Ableitung werden die Wurzeln dieser Eigentümlichkeit deutlich hervortreten.

4.2 Quantisierung als Auswahlproblem I.

Voraussetzungsfreie Ableitung der stationären Schrödinger-Gleichung

4.2.1 Problemstellung

Es ist offensichtlich, dass die Menge der physikalisch realisierbaren Bewegungen bei weitem geringer ist als die Menge der geometrisch möglichen Verschiebungen (Leibnitz, 1695). Was sind die mathematischen und physikalischen Auswahlkriterien für jene Menge?

Die allgemeinsten physikalischen Kriterien sind die Erhaltungssätze. Viele andere Kriterien sind zweigspezifisch. Zum Beispiel zeichnet das Prinzip der kleinsten Wirkung genau eine Bahn aus der unendlichen Menge der geometrisch möglichen benachbarten Wege aus. In der Wellentheorie sondern die Randbedingungen alle diejenigen Wellen aus, die ihnen nicht genügen, auch wenn sie dynamisch möglich sind (d. h. die Wellengleichung erfüllen).

Nach Einstein (1907) besitzen Quantensysteme eine „geringere Anzahl“ von stationären Zuständen als klassische Systeme. Was ist das Auswahlkriterium hierfür, außer der Kompatibilität mit der Planckschen Strahlungsformel?

Planck, Einstein und Bohr haben das Energiespektrum aus empirischen Gründen auf die *diskreten* Werte $n \cdot h\nu$ (ν – Schwingungsfrequenz eines Oszillators) beziehungsweise $-\frac{n}{2}h\nu$ (ν – Umlauffrequenz eines Elektrons) begrenzt. Durch die Bohr-Sommerfeldschen⁶ Quantisierungsbedingungen (die anfänglich *Zustandsbedingungen* hießen, siehe Pauli, 1926, § 6) werden die Werte $n \cdot h$ beziehungsweise $(n + \frac{1}{2})h$ (n ganzzahlig) des Wirkungsintegrals $\oint pdq$ „ausgezeichnet“ (Heisenberg, 1977) beziehungsweise „ausgewählt“ (Pauli, 1926; Messiah, 1999, S.34).

Wegen dieser Diskretheit und weil ihr Minimum durch h festgelegt ist, unterliegt die Wirkung – im Unterschied zur Klassischen Mechanik – nicht einem Variationsprinzip.⁷

Tatsächlich besteht dieses Auswahlproblem aus zwei Teilen:

1. Das Auswahlproblem zwischen klassischen und nicht-klassischen mechanischen Systemen; wir werden es mit Hilfe der möglichen und unmöglichen Konfigurationen aus § 3.3.5 formulieren: dank dessen werden die Schwierigkeiten vermieden, die bei der Benutzung von – in der Quantenmechanik ja so nicht mehr vorhandenen – Bahnen auftreten.
2. Die (nicht-klassische) Auswahl der Quanten-Zustände; wir werden sie mit Hilfe von Rekursionsbeziehungen und des Energiesatzes formulieren: dank dessen werden die Schwierigkeiten vermieden, die bei der Benutzung von Wellenfunktionen auftreten, die als Lösung eines klassischen (!) Eigenwertproblems berechnet wurden.

⁶ Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld (1868 – 1951), *Atombau und Spektrallinien*, 1919-29 (2 Bände).

⁷ Siehe auch Dirac, *The Lagrangian in Quantum Mechanics*, 1933.

Diese Umformulierung der „Quantisierung als Eigenwertproblem“ in „Quantisierung als Auswahlproblem“ ermöglicht es, die stationäre Schrödinger-Gleichung aus der Klassischen Mechanik durch eine *zwanglose und eindeutige* Prozedur abzuleiten, wobei die Motivation zur Verallgemeinerung *aus der Klassischen Mechanik selbst* kommt und die Axiomatik nur in ihrer *Darstellung* verändert wird. Die nicht-stationäre und die Viel-Teilchen-Gleichung werden sich in dem gleichen Rahmen ergeben. Im Unterschied zum klassischen (!) Eigenwertproblem kann das nicht-klassische Auswahlproblem formuliert und gelöst werden, *ohne* irgendwelche zusätzliche *a-priori*-Annahmen über die Natur der Quantensysteme zu machen, wie den Welle-Teilchen-Dualismus, eine zugrundeliegende Wellengleichung oder die Existenz des Planckschen Wirkungsquantums. Die Existenz eines solchen zusätzlichen Parameters – als *einzigem* zusätzlichen – tritt in diesem Zugang von selbst zutage.

Unsere Ausgangspunkte sind also der Newton-Eulersche Zustandsbegriff (siehe §§ 3.1.1, 3.2.2) nebst den Eulerschen Prinzipien der Zustandserhaltung und -veränderung in ihrer Anwendung auf konservative Systeme (§§ 3.3.2, 3.4.2), Eulers Methode der Minima und Maxima (§ 3.3.5), der Energieerhaltungssatz (§ 3.3.1) sowie die Menge der möglichen (Impuls-)Konfigurationen (§ 3.3.6).

4.2.2 Die Beziehung zwischen Klassischer und Quantenmechanik als Auswahlproblem

We are faced here with the full force of the logical opposition between an
 either – or (point mechanics)
 and a
 both – and (wave mechanics)

This would not matter much, if the old system were to be dropped entirely and to be replaced by the new.

(E. Schrödinger, *The fundamental idea of wave mechanics*, 1933, S.315)

Die Frage nach der physikalischen Bedeutung des Energieerhaltungssatzes ist zugleich eine Frage nach der physikalischen Bedeutung des Arbeitsvorrates und seiner Darstellung als Lage- beziehungsweise Bewegungsenergie im nicht-klassischen Fall. In der klassischen Mechanik wird er auf eine der möglichen (Impuls-)Konfigurationen des Systems bezogen. Der Arbeitsvorrat ist gleich der Lage- und der Gesamtenergie, wenn keine Umwandlung zugeführter Arbeit in Bewegungsenergie stattfindet. Betrachtet man beide Formen des Arbeitsvorrates als gleichzeitig variierende Größen, so gilt bei konstanter Gesamtenergie $\Delta T = -\Delta V$: sie ändern sich nicht unabhängig voneinander, sondern gegenläufig.

Betrachten wir dagegen die Beziehung zwischen Gesamt- und Lageenergie, *ohne* auf diese gegenläufige Abhängigkeit Rücksicht zu nehmen, so können wir – zunächst hypothetisch – Ungleichungen zwischen Gesamt- und Lageenergie einerseits sowie zwischen Gesamt- und Bewegungsenergie andererseits aufstellen, die zu denen im § 3.3.6 komplementär sind. Wir werden danach die

physikalischen Konsequenzen dieser alternativen Ungleichungen untersuchen und hierbei einen Baustein für unseren Weg zur Quantenmechanik finden.

Helmholtz (1911, S.215) fügte in Gleichung (3.40) beziehungsweise (3.41) das Minuszeichen ein, weil die potentielle Energie $V(x)$ eine direktere Beziehung zum Arbeitsvorrat besitzt als die Wirksamkeit $\hat{V}(x) = -V(x)$. Es widerspricht aber *nicht* den Axiomen der Zustandserhaltung, wenn wir anstelle von $T(p) = E - V(x)$ oder $E - T(p) = +V(x)$ (3.43) die Beziehung $E - T(p) = -V(x)$ setzen, wobei in beiden Fällen die Kraft $\mathbf{K}(x) = -\nabla V(x)$ sein soll.

Tatsächlich kann man statt der Newtonschen Bewegungsgleichung (3.5) auch

$$M\ddot{\mathbf{x}}(t) = -\mathbf{F}(\mathbf{x}(t)) \quad (4.7)$$

postulieren, *ohne* in einen Widerspruch mit dem 1. und dem 3. Newtonschen Axiom zu geraten. Analog zu dem obigen Vorgehen gelangt man in diesem Fall zu der Beziehung $T(p) = +V(x) + \text{const}$ statt $T(p) = -V(x) + \text{const}$. Das Ergebnis ist eine Klassische, aber *nicht*-Newtonsche Mechanik, die frei von inneren logischen Widersprüchen, gleichwohl in unserer Welt nicht verwirklicht ist.

In der Tat führt die Bewegungsgleichung (4.7) zur Selbstbeschleunigung. Zum Beispiel erhält man für den linearen Oszillator mit dem Kraftgesetz (3.6) die Ortskurve

$$x(t) = \frac{1}{2} \left[x(0) + \frac{1}{\omega} \dot{x}(0) \right] e^{\omega t} + \frac{1}{2} \left[x(0) - \frac{1}{\omega} \dot{x}(0) \right] e^{-\omega t} \quad (4.8)$$

Wir stellen nun diese *Alternativen* als logische Beziehungen dar; deren Synthese wird sich als ein weiterer Schritt in Richtung Quantenmechanik herausstellen.

Es gibt jeweils zwei einander ausschließende Alternativen im Konfigurations- und im Impuls-Konfigurationsraum (ohne Beschränkung der Allgemeinheit der weiteren Ausführungen sehen wir, um das Wesentliche deutlicher hervor zu kehren, im weiteren von den Bewegungsbeschränkungen ab und setzen $C_{\text{möglich}}^{\text{Lagrange}} = C_{\text{all}}$, $P_{\text{möglich}}^{\text{Lagrange}} = P_{\text{all}}$):

1. Für alle möglichen Konfigurationen x gilt

$$E - V(x) \geq 0 \quad (4.9)$$

Die Menge der möglichen Konfigurationen ist gleich der Leibniz-Menge im Ortsraum (3.49):

$$C_{\text{möglich}} = C_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}(E) \quad (4.10)$$

Wir können – wie im Energiesatz (3.43) –

$$E - V(x) = T(p) \equiv \frac{1}{2M} p^2 \quad (4.11)$$

setzen. Wenn wir hier x und p mit der Zeit t parametrisieren und nach dieser differenzieren, erhalten wir $-\frac{\partial V}{\partial x} \frac{dx}{dt} = F \frac{dx}{dt} = +\frac{p}{M} \frac{dp}{dt}$. Dieser Fall gehört offenbar zur Newtonschen Mechanik.

2. Für alle möglichen Konfigurationen x gilt

$$E - V(x) \leq 0 \quad (4.12)$$

Die Menge der möglichen Konfigurationen ist gleich der zur Menge (4.10) komplementären Menge:

$$C_{\text{möglich}} = C_{\text{all}} \setminus C_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}(E) \quad (4.13)$$

Hier können wir

$$E - V(x) = -T(p) \equiv -\frac{1}{2M}p^2 \quad (4.14)$$

setzen. Wenn wir erneut x und p mit der Zeit parametrisieren und nach dieser differenzieren, erhalten wir $-\frac{\partial V}{\partial x} \frac{dx}{dt} = F \frac{dx}{dt} = -\frac{p}{M} \frac{dp}{dt}$. Dies bedeutet entweder $p = -M\dot{x}$ oder $dp = -Fdt$. Dieser Fall gehört zur der Klassischen nicht-Newtonschen Mechanik (4.7).

3. Für alle möglichen Impuls-Konfigurationen p gilt

$$E - T(p) \geq 0 \quad (4.15)$$

(diesen Fall hatte Helmholtz betrachtet, siehe § 3.3.4).

Die Menge der möglichen Impuls-Konfigurationen ist gleich der Leibniz-Menge im Impulsraum (3.50):

$$P_{\text{möglich}} = P_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}(E) \quad (4.16)$$

Hier können wir

$$E - T(p) = V(x) - V_{\min} \quad (4.17)$$

setzen, wie im Energiesatz (3.43). Dieser Fall gehört offenbar ebenfalls zur Newtonschen Mechanik.

4. Für alle möglichen Impuls-Konfigurationen p gilt

$$E - T(p) \leq 0 \quad (4.18)$$

Hier können wir

$$E - T(p) = -[V(x) - V_{\min}] \quad (4.19)$$

setzen. Die Menge der möglichen Impuls-Konfigurationen ist gleich der zur Menge (4.16) komplementären Menge:

$$P_{\text{möglich}} = P_{\text{all}} \setminus P_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}(E) \quad (4.20)$$

Dieser Fall gehört offenbar zur der Klassischen, nicht-Newtonschen Mechanik von Fall **2** (mit $E|_{\text{Fall 4}} = -E|_{\text{Fall 2}}$).

Wir wollen jetzt auf unsere Frage aus dem § 3.3.6 zurückkommen, ob es Systeme gibt, in denen die Menge der möglichen (Impuls-)Konfigurationen *nicht* durch die Existenz einer energetischen Erhaltungsgröße eingeschränkt wird. Dazu müssen offenbar *beide* Ungleichungen: (4.9) UND (4.12) bzw. (4.15) UND (4.18), möglich sein – wobei der Widerspruch zwischen den jeweiligen Paaren durch eine neue, *nichtklassische* Darstellung der Energie aufzuheben sein wird.

Um dieser Synthese näher zu kommen, besinnen wir uns auf das logische Verhältnis der Eulerschen Axiome E1 und E2 zueinander. Es gibt je drei logisch mögliche Fälle für die Gültigkeit der obigen Ungleichungen; wir beginnen mit denen im Impuls-Konfigurationsraum, weil Helmholtz von der lebendigen Kraft $2T(p)$ ausgegangen ist (siehe § 3.3.1).

- 1) **Helmholtzsche Bedingung für die Definition klassischer Größen:** Die Differenz $E - T(p)$ ist *semi-definit*.

Das heißt, für *alle* möglichen Impuls-Konfigurationen im Zustand E gilt

$$\text{ENTWEDER } E - T(p) \geq 0 \quad \text{ODER} \quad E - T(p) \leq 0$$

Die Menge aller im Zustand E möglichen Impuls-Konfigurationen ist

$$\text{ENTWEDER } P_{\text{möglich}} = P_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}} \quad \text{ODER} \quad P_{\text{möglich}} = P_{\text{all}} \setminus P_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}$$

Mit anderen Worten,

$$\text{ENTWEDER } p|_{E-T(p) \geq 0} \in P_{\text{möglich}} \quad \text{ODER} \quad p|_{E-T(p) \leq 0} \in P_{\text{möglich}}$$

Diese Alternativen gehören zu den obigen Fällen **3** und **4**.

- 2) **Helmholtzsche Bedingung für die Definition nichtklassischer Größen:** Die Differenz $E - T(p)$ ist *indefinit*.

Das heißt, *beide* Ungleichungen,

$$E - T(p) \geq 0 \quad \text{UND} \quad E - T(p) \leq 0$$

sind für die möglichen Impuls-Konfigurationen im Zustand E zugelassen. Die Menge aller im Zustand E möglichen Impuls-Konfigurationen ist die Vereinigungsmenge von $P_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}(E)$ und $P_{\text{all}} \setminus P_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}(E)$:

$$p|_{E-T(p) \geq 0} \in P_{\text{möglich}} \quad \text{UND} \quad p|_{E-T(p) \leq 0} \in P_{\text{möglich}}$$

Das heißt,

$$P_{\text{möglich}} = P_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}} \cup \left(P_{\text{all}} \setminus P_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}} \right) = P_{\text{all}}$$

Wie wir am Anfang dieses Paragraphen gesehen haben, sind die im Gebiet $P_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}$ mit $E - T(p) \geq 0$ geltenden klassischen dynamischen Gesetze inkompatibel zu denen im Gebiet $P_{\text{all}} \setminus P_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}$, wo $E - T(p) \leq 0$ ist. Das heißt, es gibt *kein einheitliches* Kraftgesetz, das in *beiden* Gebieten eine äußere Einwirkung in Form einer klassischen Kraft mit dem klassischen Impuls verbindet.

3) **Nichtmechanische Bedingung:** Es ist

$$\text{WEDER } E - T(p) \geq 0 \quad \text{NOCH} \quad E - T(p) \leq 0$$

für *irgendeine* Impuls-Konfiguration im Zustand E . Wegen $P_{\text{möglich}} = \emptyset$ lässt sich überhaupt keine Mechanik durchführen, weshalb wir diesen Fall nicht weiter beachten wollen.

Die drei hierzu komplementären Fälle im Konfigurationsraum lauten wie folgt.

1') **Komplementäre Helmholtzsche Bedingung für die Definition klassischer Größen:** Die Differenz $E - V(x)$ ist *semi-definit*.

Das heißt, für *alle* möglichen Konfigurationen im Zustand E gilt

$$\text{ENTWEDER } E - V(x) \geq 0 \quad \text{ODER} \quad E - V(x) \leq 0$$

Die Menge aller im Zustand E möglichen Konfigurationen ist

$$\text{ENTWEDER } C_{\text{möglich}} = C_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}} \quad \text{ODER} \quad C_{\text{möglich}} = C_{\text{all}} \setminus C_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}$$

Mit anderen Worten,

$$\text{ENTWEDER } x|_{E-V(x) \geq 0} \in C_{\text{möglich}} \quad \text{ODER} \quad x|_{E-V(x) \leq 0} \in C_{\text{möglich}}$$

Diese Alternativen gehören zu den obigen Fällen **1** und **2**.

2') **Komplementäre Helmholtzsche Bedingung für die Definition nichtklassischer Größen:** Die Differenz $E - V(x)$ ist *indefinit*.

Das heißt, *beide* Ungleichungen,

$$E - V(x) \geq 0 \quad \text{UND} \quad E - V(x) \leq 0$$

sind für die möglichen Konfigurationen im Zustand E zugelassen. Die Menge aller im Zustand E möglichen Konfigurationen ist die Vereinigungsmenge von $C_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}(E)$ und $C_{\text{all}} \setminus C_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}(E)$:

$$x|_{E-V(x) \geq 0} \in C_{\text{möglich}} \quad \text{UND} \quad x|_{E-V(x) \leq 0} \in C_{\text{möglich}}$$

Mit anderen Worten,

$$C_{\text{möglich}} = C_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}} \cup \left(C_{\text{all}} \setminus C_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}} \right) = C_{\text{all}}$$

Nun sind die im Gebiet $C_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}$ mit $E - V(x) \geq 0$ geltenden klassischen dynamischen Gesetze mit denen im Gebiet $C_{\text{all}} \setminus C_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}$ mit $E - V(x) \leq 0$ *nicht* verträglich (vergleiche die Diskussion zur Bedingung **2**). Das heißt erneut, dass es kein einheitliches Kraftgesetz gibt, das in beiden Gebieten eine äußere Einwirkung in Form einer klassischen Kraft mit dem klassischen Impuls verbindet. Zustands- und Bewegungsgleichungen für das Gesamtgebiet, C_{all} (P_{all}), müssen deshalb die äußere Einwirkung auf ein System auf eine neue Weise, das heißt auch, mit neuen (nichtklassischen) Größen beschreiben.

3') **Komplementäre Nichtmechanische Bedingung:** Es ist

$$\text{WEDER } E - V(x) \geq 0 \quad \text{NOCH} \quad E - V(x) \leq 0$$

für irgendeine Konfiguration im Zustand E .

Wegen $C_{\text{möglich}} = \emptyset$ lässt sich – wie unter der Bedingung **3** – überhaupt keine Mechanik durchführen.

Diese sechs Bedingungen entsprechen der folgenden *Hierarchie von Auswahlproblemen*:

1. Das zwischen Newtonscher klassischer Mechanik mit $V(x(t)) + T(p(t)) = \text{const}$ und nicht-Newtonscher klassischer Mechanik mit $V(x(t)) - T(p(t)) = \text{const}$;
2. Das zwischen klassischer (ENTWEDER – ODER) und nichtklassischer Mechanik (UND);
3. Das zwischen Mechanik (Bedingungen **1** ... **2'**) und Nicht-Mechanik (Bedingungen **3/3'**).

Es können mithin *alternative* Definitionen der Menge der möglichen (Impuls-) Konfigurationen aufgestellt werden, *ohne* in Konflikt mit der Eulerschen Axiomatik zu kommen. Die logische Beziehung in den Auswahlproblemen (XOR) ist die gleiche wie die zwischen den Eulerschen Axiomen E1 and E2 (siehe Axiom E0 im § 3.2.2). Daraus schließen wir, dass auch diese Alternativen einander ausschließen und zugleich bedingen, auf ihre Weise „in Harmonie zueinander“ sind.

Das erste Auswahlproblem kann mit Hilfe des Energiesatzes (Nicht-Existenz des *perpetuum mobile*) entschieden werden.

Das zweite Auswahlproblem wurde von Schrödinger 1933 diskutiert (siehe Zitat am Anfang dieses Paragraphen). Es ist eine Verallgemeinerung der Bohr-Heisenbergschen Komplementarität (Bohr, 1927; v. Weizsäcker, 1955) zwischen Klassischer und Quantenmechanik auf die zwischen Klassischer und Nichtklassischer Mechanik.

4.2.3 Systeme mit unbeschränkten (Impuls-)Konfigurationen

Wir haben zwei eng miteinander verbundene Stellen herausgearbeitet, an denen eine natürliche und axiomatisch-deduktive Modifizierung der Klassischen Mechanik (vergleiche die Bedingungen **2/2'** oben) angezeigt wird.

Stelle 1: Aufhebung der Aufteilung der Menge der (Impuls-)Konfigurationen in mögliche und unmögliche: $C_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}(E) \stackrel{!}{=} C_{\text{all}}$ (Bedingung **2'**),
 $P_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}(E) \stackrel{!}{=} P_{\text{all}}$ (Bedingung **2**).

Stelle 2: Darstellung der Gesamtenergie E und der Ausdehnung als interne Parameter für *alle* stationären Zustände (*alle* möglichen E -Werte⁸), nicht nur für den Zustand der Ruhe ($E = V_{\text{min}}$).

⁸ Da jedes System einen Grundzustand besitzt (siehe § 3.3.1), ist für jedes System die Menge der möglichen Energiewerte weiterhin nach unten begrenzt.

Die nichtklassischen Bedingungen **2/2'** unterscheiden sich grundlegend von den klassischen Bedingungen **1/1'**:

1. Es gibt keine eindeutige, punktweise algebraische Beziehung wie $V(x) + T(p) = \text{const}$ zwischen den Orts- und Impuls-Koordinaten; dies sollte tiefgreifende Konsequenzen für die Bewegung derartiger Systeme zeitigen.
2. Die Koordinaten $x_{\min/\max}$ und $p_{\min/\max}$, die die Grenzen eines Systems anzeigen, bestimmen sich nicht aus den Ausdrücken $E - V(x)$ und $E - T(p)$, weil diese nicht (semi-)definit sind. Ebenso ist die Funktion $V(x)$ [$T(p)$] nicht länger der Beitrag der (Impuls-)Konfiguration x (p) zur Gesamtenergie E , weil sie im Gebiet C_{all} [P_{all}] unbegrenzt ist. Die Energie sollte aber weiterhin aus x - und aus p -abhängigen Ausdrücken zusammengesetzt sein, da sich andernfalls die Anzahl der Freiheitsgrade verringern würde.

Beide Unterschiede sind miteinander verbunden und beide bedingen, dass

- A) alle (Impuls-)Konfigurationen gleichzeitig betrachtet werden müssen und – im Unterschied zur punktweisen algebraischen Beziehung im klassischen Fall – *alle* Konfigurationen mit *allen* Impuls-Konfigurationen verbunden sind (und umgekehrt);
- B) neue Größen notwendig sind, um die Ausdehnung eines Systems im (Impuls-)Konfigurationsraum und ihre Beziehung zur Gesamtenergie zu beschreiben; es ist zu vermuten, dass diese Größen Funktionen von x beziehungsweise p sind, wobei die Koordinaten ihrer Extremwerte die Rolle von $x_{\min/\max}$ und $p_{\min/\max}$ spielen.

Für die unter **B** erwähnten Funktionen schreiben wir $V_{\text{nkl}}(x)$ und $T_{\text{nkl}}(p)$. Für die Energie muss eine neue, nichtklassische Darstellung E_{nkl} konstruiert werden, die $V_{\text{nkl}}(x)$ und $T_{\text{nkl}}(p)$ enthält.

Wenn die Grenzen eines Systems im Unendlichen liegen, kann man natürlich höchstens über seine *effektiven* Ausdehnungen im Orts- und im Impulsraum sprechen, vergleichbar mit der Linienbreite einer Absorptionskurve; wir werden diese Ausdehnungen mit $x_{\text{max}}^{\text{nkl}}$ und $p_{\text{max}}^{\text{nkl}}$ bezeichnen. Sie sind die Koordinaten der Maxima der Funktionen $V_{\text{nkl}}(x)$ und $T_{\text{nkl}}(p)$: $\max_{-\infty < x < +\infty} V_{\text{nkl}}(x) = V_{\text{nkl}}(x_{\text{max}}^{\text{nkl}})$, $\max_{-\infty < p < +\infty} T_{\text{nkl}}(p) = T_{\text{nkl}}(p_{\text{max}}^{\text{nkl}})$. Analog zum klassischen Fall sollen zu jeder geordneten Menge $E_{\text{nkl},1} < E_{\text{nkl},2} < \dots$ geordnete Mengen $x_{\text{max},1}^{\text{nkl}} < x_{\text{max},2}^{\text{nkl}} < \dots$ mit $V_{\text{nkl}}(x_{\text{max},1}^{\text{nkl}}) < V_{\text{nkl}}(x_{\text{max},2}^{\text{nkl}}) < \dots$ und $p_{\text{max},1}^{\text{nkl}} < p_{\text{max},2}^{\text{nkl}} < \dots$ mit $T_{\text{nkl}}(p_{\text{max},1}^{\text{nkl}}) < T_{\text{nkl}}(p_{\text{max},2}^{\text{nkl}}) < \dots$ gehören. Um dieser Forderung zu genügen, müssen die nichtklassischen Funktionen $V_{\text{nkl}}(x)$ und $T_{\text{nkl}}(p)$ in den Gebieten C_{all} bzw. P_{all} begrenzt sein und die Werte $x_{\text{max}}^{\text{nkl}}$ und $p_{\text{max}}^{\text{nkl}}$ und folglich die Funktionen $V_{\text{nkl}}(x)$ und $T_{\text{nkl}}(p)$ (parametrisch) von der Energie abhängen.

Die „Harmonie“ zwischen den klassischen und den nicht-klassischen Funktionen ist am einfachsten dadurch gewährleistet, dass letztere jene enthalten. Damit letztere Extremwerte besitzen, multiplizieren wir jene mit dimensionslosen *begrenzenden* Faktoren $F_{E_{\text{nkl}}}$ bzw. $G_{E_{\text{nkl}}}$ derart, dass

$$V_{\text{nkl}}(x) = V_{E_{\text{nkl}}}(x) = F_{E_{\text{nkl}}}(x/x_0) \cdot V(x) \leq E_{\text{nkl}}; \quad x \in C_{\text{all}} \quad (4.21)$$

$$T_{\text{nkl}}(p) = T_{E_{\text{nkl}}}(p) = G_{E_{\text{nkl}}}(p/p_0) \cdot T(p) \leq E_{\text{nkl}}; \quad p \in P_{\text{all}} \quad (4.22)$$

gilt. x_0 und p_0 sind Bezugsgrößen, die aus den Systemparametern zu bilden sind, um die Faktoren $F_{E_{\text{nkl}}}$ und $G_{E_{\text{nkl}}}$ dimensionslos zu machen. Die Forderung $V_{E_{\text{nkl}}}(x) \leq E_{\text{nkl}}$, $T_{E_{\text{nkl}}}(p) \leq E_{\text{nkl}}$ erwächst daraus, dass, wenn alle Orts- mit allen Impuls-Konfigurationen zusammenhängen, es keinen Kompensationsmechanismus zwischen x - und p -abhängigen Gliedern gibt.

Additive Zusatzglieder zu den klassischen Funktionen würden zusätzliche Arbeitsvorräte des Systems definieren. Die Produkte beschreiben dagegen lediglich Modifikationen bezüglich der (Impuls-)Konfigurationen, wobei das System Oszillator weiterhin durch die Systemparameter Masse, Potenzialkonstante und Energie definiert wird.

Die Existenz der Bezugsgrößen x_0 und p_0 bedeutet, dass – im Unterschied zum klassischen Fall – jedes nichtklassische System der hier untersuchten Art einen charakteristischen Längen- und einen charakteristischen Impulsparameter besitzt.

Die Funktionen $F_{E_{\text{nkl}}}(x/x_0)$ und $G_{E_{\text{nkl}}}(p/p_0)$ sind im folgenden zu finden.

4.2.4 Die nichtklassische Darstellung der Energie

„ $\psi\bar{\psi}$ ist eine Art *Gewichtsfunktion* im Konfigurationsraum des Systems. Die *wellenmechanische* Konfiguration des Systems ist eine *Superposition* vieler, streng genommen *aller*, kinematisch möglichen punktmechanischen Konfigurationen. Dabei steuert jede punktmechanische Konfiguration mit einem gewissen *Gewicht* zur wahren wellenmechanischen Konfiguration bei, welches Gewicht eben durch $\psi\bar{\psi}$ gegeben ist.“

(E. Schrödinger, 1926⁹)

Da nach dem im vorangegangenen Paragraphen gesagten *alle* (Impuls-)Konfigurationen *gleichzeitig* berücksichtigt werden müssen, ergibt sich die Gesamtenergie aus der Integration über $T_{\text{nkl}}(p)$ und $V_{\text{nkl}}(x)$:

$$E_{\text{nkl}} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} G_{E_{\text{nkl}}}(p/p_0) T(p) dp}{\int_{-\infty}^{+\infty} G_{E_{\text{nkl}}}(p/p_0) dp} + \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} F_{E_{\text{nkl}}}(x/x_0) V(x) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} F_{E_{\text{nkl}}}(x/x_0) dx} \quad (4.23)$$

Die Ausdrücke im Nenner wurden aus Dimensionsgründen hinzugefügt ($F_{E_{\text{nkl}}}$ und $G_{E_{\text{nkl}}}$ sind dimensionslos). Das ist der *nicht-klassische Ausdruck für die Gesamtenergie eines nicht-klassischen mechanischen Systems*. Er enthält *keine externen* Parameter (es sei daran erinnert, dass auch in der Bohrschen

⁹ Vierte Mitteilung, S.135 (Hervorhebungen im Originaltext).

Theorie Energie und Ausdehnung der stationären Zustände als interne Parameter definiert sind).

Wir nehmen hier der Einfachheit halber an, dass alle Integrale existieren. Später werden wir uns von dieser Einschränkung befreien.

Im Unterschied zur klassischen ist die nichtklassische Darstellung (4.23) keine Vorschrift zur Berechnung der Energie, denn ihre rechte Seite hängt ebenfalls von der Energie ab: es handelt sich um eine *implizite* Gleichung für die Energie. Jedoch können alle in Frage kommenden Größen: die Energie sowie die Funktionen $F_{E_{\text{nkl}}}$ und $G_{E_{\text{nkl}}}$, berechnet werden, wenn man berücksichtigt, dass letztere nicht unabhängig voneinander sind, da beide von E_{nkl} abhängen und zu jedem Wert der Energie paarweise auftreten.

Die Funktionen $F_{E_{\text{nkl}}}$ und $G_{E_{\text{nkl}}}$ können nicht nur als Begrenzungs-, sondern auch als Gewichtsfunktionen für die Beiträge der einzelnen (Impuls-) Konfigurationen zur Gesamtenergie angesehen werden (vgl. Zitat am Anfang dieses Paragraphen). Man darf die Gewichtung aber nicht isoliert betrachten, weil man andernfalls für diese Einzelbeiträge wieder $V(x)$ bzw. $T(p)$ erhielte.

Man erhält aus der nichtklassischen Darstellung (4.23) die klassische Darstellung,

$$E_{\text{kl}} = V(x) + T(p); \quad x = x(t), \quad p = p(t) = M\dot{x}(t) \quad (4.24)$$

wenn man die Menge der möglichen (Impuls-)Konfigurationen auf die der klassischen Bahn: $x = x(t)$, $p = p(t)$, beschränkt:

$$F_{E_{\text{nkl}}}(x) \rightarrow x_0 \delta(x - x(t)); \quad G_{E_{\text{nkl}}}(p) \rightarrow p_0 \delta(p - p(t)) \quad (4.25)$$

Dies bedeutet jedoch *keinen Grenzübergang*, denn die Extremwerte der Delta-Funktionen lassen sich nicht mit den Mitteln der klassischen Analysis berechnen und bestimmen deshalb keine Ausdehnungen (vgl. § 3.3.5). Den nicht-klassischen Beziehungen (4.21) f. entsprechen vielmehr die klassischen Beziehungen

$$V_{E_{\text{kl}}}(x) = F_{E_{\text{kl}}}(x/x_0) \cdot V(x) \leq E_{\text{kl}}; \quad x \in C_{\text{all}} \quad (4.26)$$

und

$$T_{E_{\text{kl}}}(p) = G_{E_{\text{kl}}}(p/p_0) \cdot T(p) \leq E_{\text{kl}}; \quad p \in P_{\text{all}} \quad (4.27)$$

mit den klassischen Begrenzungsfunktionen

$$F_{E_{\text{kl}}}(x/x_0) = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \quad \text{für } x \begin{cases} \in \\ \notin \end{cases} C_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}(E) \quad (4.28)$$

bzw.

$$G_{E_{\text{kl}}}(p/p_0) = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \quad \text{für } p \begin{cases} \in \\ \notin \end{cases} P_{\text{möglich}}^{\text{Leibniz}}(E) \quad (4.29)$$

Um die oben begründete „Harmonie“ mit der Klassischen Mechanik zu erhalten, insbesondere die Beziehung zwischen Energie und Ausdehnung vermittelt geordneter Mengen, dürfen die Faktoren $F_{E_{nkl}}(x)$ und $G_{E_{nkl}}(p)$ nicht die Vorzeichen der nichtklassischen Funktionen $V_{E_{nkl}}(x)$ und $T_{E_{nkl}}(p)$ gegenüber denen der klassischen Funktionen $V(x)$ und $T(p)$ ändern; sie sind daher nicht-negativ.

Um die nachfolgenden Rechnungen von dieser Bedingung zu befreien („je weniger Forderungen, umso besser“), setzen wir¹⁰ $F_{E_{nkl}}(x/x_0) = |f_{E_{nkl}}(x/x_0)|^2$, $G_{E_{nkl}}(p/p_0) = |g_{E_{nkl}}(p/p_0)|^2$ und erhalten (ab sofort lassen wir den Index *nkl* fort)

$$E = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{g}_E(p/p_0) g_E(p/p_0) T(p) dp}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{g}_E(p/p_0) g_E(p/p_0) dp} + \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_E(x/x_0) f_E(x/x_0) V(x) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_E(x/x_0) f_E(x/x_0) dx} \quad (4.30)$$

Die Strukturen des Systems im Orts- und im Impulsraum werden jetzt durch die Funktionen f_E und g_E beschrieben. Man kann sie im oben genannten Sinne als Begrenzungs- oder Gewichtsamplituden ansehen.

Nun, da die Funktionen f_E und g_E von demselben Parameter E abhängen, muss zwischen ihnen eine gewisse *funktionale* Beziehung bestehen. Diese ersetzt offenbar die klassische algebraische Verknüpfung der Konfigurationen mit den Impuls-Konfigurationen. Für sie kommt deshalb nur eine Integraltransformation in Frage.¹¹ Sie muss den folgenden Bedingungen genügen:

- Der Argumentbereich umfasst für beide Variablen die gesamte reelle Achse: $-\infty < x < +\infty$, $-\infty < p < +\infty$; dadurch scheiden einseitige Transformationen und Transformationen in der komplexen Ebene aus;
- Die Transformierte einer Begrenzungsfunktion (das sei eine Funktion, die ihr absolutes Minimum oder Maximum im Endlichen besitzt) ist wieder eine Begrenzungsfunktion;
- Die Integrale in Gleichung (4.30) existieren; dadurch scheidet die Hilbert-Transformation (Zwillinger, 1992, Tab.74) aus;
- Im Grenzfall $V \rightarrow 0$ ist $|f_{E_{nkl}}(x/x_0)| = \text{const}$ und beschreibt $g_{E_{nkl}}(p/p_0)$ ein Teilchen mit definiertem Impuls (hierbei ist das zweite Glied auf der rechten Seite von Gleichung (4.30) natürlich fortzulassen); dadurch scheidet die Hartley-Transformation (*Ebda.*) aus.

¹⁰ Im § 4.3.6 werden wir sehen, dass mit reellwertigen Funktionen f und g nicht auszukommen ist. Letztere würden für die innere Bewegung eines Systems lediglich den Vorzeichenwechsel dieser Funktionen erlauben (vgl. Duck, 2003, S.4).

¹¹ Auch die Kramers-Kronig-Relationen (Kramers, 1927; Kronig, 1926) zwischen Real- und Imaginärteil linearer Response-Funktionen wie der dielektrischen Suszeptibilität sind Integraltransformationen zwischen zwei korrelierten Größen als Konsequenz einer einfachen, aber grundlegenden Beziehung, hier des Kausalitätsprinzips (Landau & Lifschitz, *Statistische Physik*, 1971, S.425).

Die Fourier-Transformation¹² genügt der Gesamtheit dieser Forderungen, deshalb setzen wir

$$f_E(x/x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i \frac{xp}{x_0 p_0}} g_E(p/p_0) \frac{dp}{p_0} \quad (4.31)$$

$$g_E(p/p_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i \frac{px}{p_0 x_0}} f_E(x/x_0) \frac{dx}{x_0} \quad (4.32)$$

Den Normierungsfaktor $(2\pi)^{-1}$ haben wir symmetrisch zwischen Hin- und Rücktransformation aufgeteilt, damit die Transformation bis auf die Normierungsvolumina unitär ist (Parseval-Theorem; Nolting, *Quantenmechanik*, § 2.2.4):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f_E(x/x_0)|^2 \frac{dx}{x_0} = \int_{-\infty}^{+\infty} |g_E(p/p_0)|^2 \frac{dp}{p_0} \quad (4.33)$$

Damit ihre Fourier-Transformierten existieren, müssen die Funktionen $f_E(x/x_0)$ und $g_E(p/p_0)$ absolut-integrabel sein:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f_E(x/x_0)| dx < \infty; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |g_E(p/p_0)| dp < \infty \quad (4.34)$$

(auf Modifikationen für ungebundene Zustände werden wir zu gegebener Zeit hinweisen). Als Fourier-Transformierte besitzen sie außerdem folgende Eigenschaften:

- Sie sind kontinuierlich und auf der gesamten reellen Achse beschränkt:

$$|g_E(p/p_0)| \leq \int_{-\infty}^{+\infty} |f_E(x/x_0)| \frac{dx}{x_0}; \quad |f_E(x/x_0)| \leq \int_{-\infty}^{+\infty} |g_E(p/p_0)| \frac{dp}{p_0} \quad (4.35)$$

- Sie verschwinden im Unendlichen:

$$f_E(-\infty) = f_E(+\infty) = 0; \quad g_E(-\infty) = g_E(+\infty) = 0 \quad (4.36)$$

¹² Jean-Baptiste Joseph Baron de Fourier (1768-1830), *La Théorie Analytique de la Chaleur*, 1922, Kap. IX. – Die Vorzeichenwahl im Exponenten ist willkürlich und erfolgt entsprechend den Vorzeichen in den Gleichungen, die weiter unten diskutiert werden.

Schrödinger hatte das Verschwinden der Wellenfunktion im Unendlichen dadurch begründet, dass sie sich auf ein System im Endlichen beziehen möge. Ihre Rolle als Begrenzungsamplitude konkretisiert diese Begründung. Die Randbedingungen werden hier trotzdem *nicht* „eingeschleppt“, denn wir werden uns weiter unten von ihnen befreien.

Wenn die Funktionen $f_E(x)$ und $g_E(p)$ n -mal stetig differenzierbar und die n -ten Ableitungen absolut-integrierbar sind, gelten die folgenden Entsprechungen zwischen Orts- und Impulsraum:

$$\begin{aligned} \left(\frac{x}{x_0}\right)^j f\left(\frac{x}{x_0}\right) &\leftrightarrow (ip_0 \frac{d}{dp})^j g\left(\frac{p}{p_0}\right); \\ \left(\frac{p}{p_0}\right)^j g\left(\frac{p}{p_0}\right) &\leftrightarrow (-ix_0 \frac{d}{dx})^j f\left(\frac{x}{x_0}\right) \end{aligned} \quad j = 1 \cdots n \quad (4.37)$$

In den Transformationsgleichungen (4.31) f. tritt aus Dimensionsgründen der positiv-reellwertige Parameter $\alpha \equiv x_0 p_0$ von der Dimension einer Wirkung auf. Er hängt offensichtlich *nicht* von den Koordinaten x und p oder den Funktionen $f_E(x)$ und $g_E(p)$ ab. Damit geht er als *neuer, universeller* Parameter in die Theorie ein.

Mit Hilfe der Entsprechungen (4.37) können wir die Funktion $f_E(x)$ und $g_E(p)$ aus der Darstellung (4.30) eliminieren [wir nehmen dabei an, dass die Funktion $V(x)$ in eine konvergente Potenzreihe entwickelbar ist] und erhalten drei äquivalente Ausdrücke (die hierzu nötigen Rechenschritte empfehlen wir selbständig durchzuführen; wir unterdrücken im folgenden auch x_0 und p_0 , wo dies nicht zu Unklarheiten führt):

a) die Standard-Form,

$$\begin{aligned} E &= \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_E(x) \left[V(x) - \frac{\alpha^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} \right] f_E(x) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_E(x) f_E(x) dx} \\ &= \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{g}_E(p) \left[V\left(i\alpha \frac{d}{dp}\right) + T(p) \right] g_E(p) dp}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{g}_E(p) g_E(p) dp} \end{aligned} \quad (4.38)$$

b) die symmetrische Form,

$$E = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \left[V(x) |f_E(x)|^2 + \frac{\alpha^2}{2M} \left| \frac{df_E(x)}{dx} \right|^2 \right] dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_E(x) f_E(x) dx} \quad (4.39)$$

sowie

c) die zur Standard-Form (4.38) komplex-konjugierte Form,

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} f_E(x) \left[V(x) - \frac{\alpha^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} \right] \bar{f}_E(x) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_E(x) f_E(x) dx} \\
 &= \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} g_E(p) \left[V(-i\alpha \frac{d}{dp}) + T(p) \right] \bar{g}_E(p) dp}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{g}_E(p) g_E(p) dp}
 \end{aligned} \tag{4.40}$$

Konstruktionsgemäß sind die Energiewerte E nach unten begrenzt, wie es der Energiesatz verlangt (siehe § 3.3.1). Zudem können wir aus der Formel (4.39) bereits die wesentliche Schlussfolgerung ziehen, dass die Gesamtenergie stets *größer* als das Minimum der potentiellen Energie ist:

$$E > V_{\min} \tag{4.41}$$

Das heißt, ein solches nichtklassisches System besitzt keinen klassischen Zustand der Ruhe ($E = V_{\min}$). Das ist auch nicht weiter verwunderlich, denn in diesem Zustand ist eine einzige Konfiguration ($x = x_{\min}$) mit einer einzigen Impuls-Konfiguration verbunden ($p = p_{\min} = 0$). Diese punktweise Zuordnung würde der oben begründeten Verknüpfung aller Konfigurationen mit allen Impuls-Konfigurationen widersprechen.

In den Räumen der Funktionen $f_E(x)$ bzw. $g_E(p)$ mit den Eigenschaften (4.34) definieren wir die Operatoren

$$\hat{H}(x) \stackrel{\text{def}}{=} V(x) - \frac{\alpha^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2}; \quad \hat{H}(p) \stackrel{\text{def}}{=} V(i\alpha \frac{d}{dp}) + T(p) \tag{4.42}$$

Sie heißen nach ihrer Abstammung aus der klassischen Hamilton-Funktion $H(x(t), p(t))$ Hamilton-Operator (kurz: Hamiltonian) in der Orts- bzw. Impuls-Darstellung. Mit ihrer Hilfe schreiben wir für die Energie kürzer

$$E = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_E(x) \hat{H}(x) f_E(x) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_E(x) f_E(x) dx} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{g}_E(p) \hat{H}(p) g_E(p) dp}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{g}_E(p) g_E(p) dp} \tag{4.43}$$

4.2.5 Die stationäre Schrödinger-Gleichung

Die beiden Darstellungen (4.43) der Energie lassen sich wie folgt umformen:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_E(x) \left[\hat{H}(x) - E \right] f_E(x) dx = 0 \tag{4.44}$$

bzw.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{g}_E(p) \left[\hat{H}(p) - E \right] g_E(p) dp = 0 \quad (4.45)$$

Es ist nun naheliegend, die Erfüllung dieser Gleichungen durch die Forderungen

$$\left[\hat{H}(x) - E \right] f_E(x) \stackrel{!}{=} 0 \quad (4.46)$$

bzw.

$$\left[\hat{H}(p) - E \right] g_E(p) \stackrel{!}{=} 0 \quad (4.47)$$

zu *garantieren*. Tatsächlich sind diese Forderungen zumindest für den Grundzustand erfüllt. Gleichung (4.46) ist nämlich die Eulersche Gleichung des Variationsproblems [vergleiche Formel (4.39)]

$$\frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \left[V(x) |f_E(x)|^2 + \frac{\alpha^2}{2M} \left| \frac{df_E(x)}{dx} \right|^2 \right] dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |f_E(x)|^2 dx} \stackrel{!}{=} \text{Minimum} \quad (4.48)$$

Die Existenz dieses Minimums folgt aus der Existenz eines Grundzustandes (siehe § 3.3.1).¹³ Analog zum klassisch-mechanischen Variationsproblem (3.14) erfolgt die Variation über alle Funktionen $f_E(x)$, die zur Lösung der Gleichung (4.46) infinitesimal benachbart sind und dieselben Randbedingungen wie diese erfüllen; die bei der Variation unterstellten Funktionen sind *virtuelle* Wellenfunktionen, da sie selbst der Gleichung (4.46) *nicht* genügen.

Der direkten Anwendung der Variationsrechnung steht allerdings die folgende Überlegung entgegen. Während jeder einzelne Punkt der klassischen virtuellen Bahnen ein möglicher Anfangswert für einen stationären Zustand ist, sind die virtuellen Wellenfunktionen *keine* möglichen Anfangsfunktionen für stationäre Zustände. Wir werden deshalb die Gültigkeit der Gleichungen (4.46) f. auf *alle* Zustände mit der Begründung ausdehnen, dass man hierdurch von den Randbedingungen (4.36) unabhängig wird, da dann die linke Gleichung (4.43) durch die Formel

$$E = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\int_{-R}^{+R} \bar{f}_E(x) \hat{H}(x) f_E(x) dx}{\int_{-R}^{+R} \bar{f}_E(x) f_E(x) dx} \quad (4.49)$$

¹³ Für den mathematischen Existenzbeweis siehe Gould, *Variational Methods for Eigenvalue Problems*, 1957, § III.9.

ersetzt werden kann. Diese Unabhängigkeit ist notwendig, weil man keine Beschränkung der effektiven Ausdehnung eines Systems im Zustand E im Konfigurationsraum erwartet, wenn das entsprechende klassische System in dessen Zustand E unbegrenzt ist (ungebundene Zustände). Das wird am Beispiel des freien Teilchens im § 4.3.6 noch deutlicher werden.

Die Ausdehnung der Gültigkeit der Gleichungen (4.46) und (4.47) auf alle Zustände entspricht dem Schrödingerschen Ziel nach *allgemeinen und einheitlichen Veränderungsgesetzen* für die Wellenfunktionen (*Vierte Mitteilung*, S.109).

Die Gleichungen (4.46) und (4.47) entsprechen der stationären Schrödinger-Gleichung in der Orts- beziehungsweise Impulsdarstellung, beide Darstellungen wurden hier in symmetrischer, mithin gleichberechtigter Weise abgeleitet:

$$-\frac{\alpha^2}{2M} \frac{d^2 f_E(x)}{dx^2} + V(x)f_E(x) = Ef_E(x) \quad (4.50)$$

bzw.

$$V(i\alpha \frac{d}{dp})g_E(p) + \frac{p^2}{2M}g_E(p) = Eg_E(p) \quad (4.51)$$

Wir identifizieren daher $f_E(x/x_0) = \sqrt{x_0}\psi_E(x)$ und $g_E(p/p_0) = \sqrt{p_0}\phi_E(p)$. Beide Gleichungen sind konstruktionsgemäß die Fourier-Transformierten voneinander. Entsprechende Gleichungen gelten für die kongugiert-komplexen Funktionen $\bar{f}_E(x/x_0) = \sqrt{x_0}\bar{\psi}_E(x)$ und $\bar{g}_E(p/p_0) = \sqrt{p_0}\bar{\phi}_E(p)$.

Die Wellenfunktion $\psi_E(x)$ wird üblicherweise „auf Eins normiert“: $\int |\psi_E(x)|^2 dx = 1$. Den Wert $\alpha = \hbar$ werden wir aus dem Energiespektrum des harmonischen Oszillators erhalten.

Bemerkenswert ist, dass die *klassischen* Funktionen $V(x)$ und $T(p)$ in jeweils einer der beiden Darstellungen unverändert erhalten bleiben. Diese Beziehung zur Klassischen Mechanik käme nicht so deutlich zum Vorschein, wenn man nur die von Schrödinger abgeleitete Gleichung im Ortsraum und nicht die Gleichungen im Orts- und im Impulsraum gemeinsam betrachtete. Es sei aber noch einmal betont, dass diese Funktionen nicht mehr die Lagebeziehungsweise Bewegungsenergie beschreiben – andernfalls missdeutet man den Tunneleffekt¹⁴ als Eindringen in eine klassische (!) Barriere, die für ein Quantenteilchen natürlich *nicht* vorhanden ist.

Die Gleichungen (4.50) f. für sich genommen, das heißt unabhängig von zusätzlichen Bedingungen wie die Randbedingungen (4.36), besitzen unendlich viele Lösungen, und zwar je zwei für das gesamte Kontinuum von Energiewerten: $-\infty < E < +\infty$. Die physikalisch realisierbaren Lösungen müssen durch Zusatzbedingungen „ausgesondert“ werden. Das wird im folgenden Abschnitt auf eine neuartige Weise geschehen.

¹⁴ Hund, *Zur Deutung der Molekelspektren*, 1927; Nordheim, *Zur Theorie der thermischen Emission und der Reflexion von Elektronen an Metallen*, 1927.

4.3 Quantisierung als Auswahlproblem II.

Eine *nicht* klassische Methode zur Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung

Die mathematische Lösungsmannigfaltigkeit einer Differentialgleichung der Physik enthält die physikalischen und die nicht-physikalischen Lösungen. Letztere sind oft für gewisse Parameterwerte oder Koordinatenwerte divergent und werden deshalb verworfen. Für die Differentialgleichungen (4.50) f. fordert man üblicherweise die Erfüllung der Randbedingungen (4.36) und behandelt sie nach Schrödinger als Eigenwertproblem. Der Vorteil dieser Methode besteht darin, dass der gut ausgebaute und bereits von der Klassischen Physik her bekannte Apparat der Differentialgleichungen (Rayleigh, 1945) benutzt werden kann. Ihr Nachteil besteht darin, dass hierdurch die *physikalischen* Unterschiede zwischen der quantenmechanischen Diskretisierung der Energiewerte und der klassischen Diskretisierung der Frequenzwerte verwischt werden.

Schrödinger selbst verweist auf das „mathematisch völlig analoge Problem der freien Schwingungen von Saiten und Membranen“ (*Vierte Mitteilung*, S.175) und erkennt, dass seine Ableitung nicht zwischen Frequenz- und Energie-Diskretisierung unterscheiden kann (*Zweite Mitteilung*, S.511).

Wir werden deshalb in diesem Abschnitt eine völlig neue Lösungsmethode vorstellen, die diese Nachteile nicht besitzt, sondern der Schrödingerschen Forderung (*Ebda.*, S.513) nach einer *nichtklassischen* Lösungsmethodik genügt. Mit Hilfe der Whittakerschen Integraldarstellungen der Lösungsfunktionen und des Energiesatzes nach Helmholtz ist es nämlich möglich, auch die Berechnung der stationären Wellenfunktionen als *Auswahlproblem* zu behandeln.

4.3.1 Rationalisierung der stationären Schrödinger-Gleichung.

Nicht-klassischer Charakter der Energie

Für den harmonischen Oszillator (siehe § 3.1.2) lautet die Gleichung (4.50)

$$-\frac{\alpha^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f\left(\frac{x}{x_0}\right) + \frac{\kappa}{2} x^2 f\left(\frac{x}{x_0}\right) = E \cdot f\left(\frac{x}{x_0}\right) \quad (4.52)$$

In den dimensionslosen Variablen

$$\xi = \frac{x}{x_0}; \quad x_0 = \sqrt[4]{\frac{\alpha^2}{4\kappa M}}; \quad u_\nu(\xi) = f_E(\xi); \quad \nu \equiv \frac{E}{\alpha\omega_{kl}} - \frac{1}{2} \quad (4.53)$$

vereinfacht sie sich zu

$$\frac{d^2 u_\nu(\xi)}{d\xi^2} + \left(\nu + \frac{1}{2} - \frac{1}{4} \xi^2 \right) u_\nu(\xi) = 0 \quad (4.54)$$

Dies entspricht der Whittakerschen Schreibweise der Weberschen Gleichung¹⁵, einer der beiden Standardformen der Gleichung für den parabolischen Zylinder.

Man sieht übrigens auch an diesem Beispiel, dass die Verwendung dimensionsloser Variablen eine vereinfachte Dimensionsanalyse darstellt, aus der die charakteristischen Parameterkombinationen ersichtlich werden, von denen das Systemverhalten tatsächlich abhängt. Außerdem ist dies im allgemeinen für numerische Rechnungen vorteilhaft.

Bis auf die Skalierung x_0 werden die stationären Zustände offenbar allein durch den dimensionslosen Energieparameter ν bestimmt. Das bedeutet, dass die Energie E des Quantenoszillators proportional zur Frequenz ω ist – wogegen in der klassischen Schwingungslehre $E \sim \omega^2$ gilt.

Der „Energieparameter“ (Schrödinger, *Erste Mitteilung*) ist primär ein mathematischer Parameter der Differentialgleichung; er wird zu einem physikalischen Parameter erst, nachdem er geeignete Kriterien erfüllt hat.

Alle Informationen über das System sind in den Parametern M , κ und α sowie im *Energiesatz* enthalten. Der Parameter α bestimmt den *Unterschied zu einem klassischen System* und ist insofern ebenfalls zu den Systemparametern zu rechnen.

Der neue Parameter α bewirkt zunächst nichts anderes als eine nichtklassische Skalierung: $E \sim \omega$ statt $E \sim \omega^2$, keineswegs eine Quantisierung (einschließlich Diskretisierung) der Energie. Diese Skalierung stellt nichtsdestoweniger eine völlig neue, in der klassischen Mechanik unbekannte und (mangels Notwendigkeit) auch nicht in Erwägung gezogene Darstellung der Energie als Funktion der Systemparameter dar: Die Energie hängt hier ausschließlich von invarianten *inneren* Systemparametern und dem universellen Parameter α ab und besitzt keine Beziehung zu einer bestimmten Länge oder einem bestimmten Impuls. Die Frequenz ω kommt als eigenständige Größe nicht mehr vor, so dass – im Unterschied zu klassischen stehenden Wellen – die Diskretisierung nicht sie betreffen kann.

Aufgabe: Führen Sie die komplementären Rechnungen in der Impulsdarstellung selbständig durch! Zeigen Sie, dass man für die Bezugsgrößen x_0 und p_0 die Integrale $\int_{-\infty}^{+\infty} F(x/x_0)dx$ und $\int_{-\infty}^{+\infty} G(p/p_0)dp$ benutzen kann! Hinweis: Zeigen Sie, dass $dx dp = \text{Zahl} \cdot \alpha \cdot d\xi d\eta$ gilt, wobei η die dimensionslose Impulsvariable ist!

¹⁵ Heinrich Weber (1842-1913), *Über die Integration der partiellen Differentialgleichung ...*, 1869. – Gl. (4.54) wurde von Weber und von Whittaker [Proc. London Math. Soc. XXXV (1903) 417-427] lange vor der Aufstellung der Schrödinger-Gleichung (1926) untersucht. Ihre mathematische Lösungstheorie ist daher – wie die Eigenwerttheorie überhaupt – unabhängig von den quantenmechanischen Anwendungen: nämlich für die *gesamte* Lösungsmannigfaltigkeit, entwickelt worden.

4.3.2 Die klassische Methode: Lösung als Eigenwertproblem

Die Gleichung (4.54) ist gerade in ξ , daher gibt es für jeden Wert von ν je eine *gerade* und eine *ungerade* Lösung als linear unabhängige Lösungen (Abramowitz & Stegun, 1964, 19.2):

$$y_\nu^g(\xi) = e^{-\frac{1}{4}\xi^2} M(-\frac{1}{2}\nu, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\xi^2) = e^{\frac{1}{4}\xi^2} M(\frac{1}{2}\nu + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\xi^2) \quad (4.55)$$

$$y_\nu^u(\xi) = \xi e^{-\frac{1}{4}\xi^2} M(-\frac{1}{2}\nu + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\xi^2) = \xi e^{\frac{1}{4}\xi^2} M(\frac{1}{2}\nu + 1, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\xi^2) \quad (4.56)$$

Hierin ist $M(a, b, z)$ die Kummersche Funktion¹⁶

$$M(a, b, z) = 1 + \frac{az}{b} + \frac{(a)_2 z^2}{(b)_2 2!} + \cdots + \frac{(a)_n z^n}{(b)_n n!} + \cdots \quad (4.57)$$

mit $(a)_n \equiv a(a+1)(a+2)\cdots(a+n-1)$.

Die allgemeine Lösung der Gleichung (4.54) ist eine Linearkombination der beiden Lösungen (4.55) f.:

$$u_\nu(\xi) = C_\nu^g y_\nu^g(\xi) + C_\nu^u y_\nu^u(\xi) \quad (4.58)$$

Die Koeffizienten C_ν^g und C_ν^u werden durch Zusatzbedingungen an die Lösungen $u_\nu(\xi)$ bestimmt; in den klassisch-physikalischen Anwendungen sind dies die Anfangs- und/oder Randbedingungen.

Die Randbedingungen (4.36) werden erfüllt, wenn die Funktionen $M(-\frac{1}{2}\nu, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\xi^2)$ und $M(-\frac{1}{2}\nu + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\xi^2)$ konvergieren. Dazu müssen die jeweiligen unendlichen Reihen (4.57) abbrechen. Dies geschieht genau dann, wenn ν nicht-negativ ganzzahlig ist:

$$\nu = n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.59)$$

Dies sind die Eigenwerte der dimensionsreduzierten Gleichung (4.54). Die Energie-Eigenwerte der dimensionsbehafteten Gleichung (4.52) sind dementsprechend die Werte

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \alpha \omega; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.60)$$

Für diese Eigenwerte reduzieren sich die Kummerschen Funktionen (4.57) auf die Hermiteschen¹⁷ Polynome, und man erhält

$$u_n(\xi) = e^{-\frac{1}{4}\xi^2} H e_n(\xi) = 2^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{1}{4}\xi^2} H_n(\xi/\sqrt{2}); \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.61)$$

Die Lösung des Eigenwertproblems ist damit abgeschlossen, die stationären Zustände des Systems sind vollständig bestimmt.

¹⁶ Ernst Eduard Kummer (1810-1893), J. für Math. XV (1836) 139ff. – $M(a, b, z)$ ist eine konfluente hypergeometrische Funktions, sie wird oft auch mit ${}_1F_1(a, b, z)$ oder $\Phi(a, b, z)$ bezeichnet.

¹⁷ Charles Hermite (1822-1901), Comptes Rendue LVIII (1864) 266-273.

4.3.3 Auswahl der mathematisch ausgezeichneten Zustände ($E/\alpha\omega$ halbzahlig)

... die wahren Gesetze der Quantenmechanik bestünden nicht in bestimmten Vorschriften für die einzelne Bahn, sondern in diesen wahren Gesetzen seien die Elemente der ganzen Bahnenmannigfaltigkeit eines Systems durch Gleichungen verbunden, so daß scheinbar eine gewisse Wechselwirkung zwischen den verschiedenen Bahnen bestehe.

(E. Schrödinger, *Zweite Mitteilung*, 1926, S.508)

In der vorliegenden nichtklassischen Anwendung hat der Parameter ν als dimensionslose Energie eine besondere physikalische Bedeutung, die ihm in den klassischen Fällen eben *nicht* zukommt. Dank dessen gelingt die eindeutige Bestimmung der Koeffizienten C_ν^g und C_ν^u auch *ohne* zusätzliche Annahmen, wie sie insbesondere die Randbedingungen darstellen. Man kann deshalb von einem *internen* Auswahlkriterium für die physikalisch realisierbaren Werte des Energieparameters sprechen. Dieser Paragraf beschreibt den mathematischen Teil des Auswahlverfahrens.

Für die Werte $\nu = -1$ and $\nu = 0$ und nur für diese faktorisiert die linke Seite von Gleichung (4.54) gemäß

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{d\xi} + \frac{\xi}{2}\right) \left(-\frac{d}{d\xi} + \frac{\xi}{2}\right) u_{-1}(\xi) &= 0; \\ \left(-\frac{d}{d\xi} + \frac{\xi}{2}\right) \left(\frac{d}{d\xi} + \frac{\xi}{2}\right) u_0(\xi) &= 0 \end{aligned} \quad (4.62)$$

Infolgedessen sind die Werte $\nu = -1$ and $\nu = 0$ mathematisch vor allen anderen ν -Werten ausgezeichnet. Die entsprechenden Lösungsfunktionen sind mathematisch, aber nicht physikalisch äquivalent, denn $u_0(\xi) = u_0(0) \exp\{-\frac{1}{4}\xi^2\}$ ist eine begrenzende Funktion, während $u_{-1}(\xi) = u_{-1}(0) \exp\{+\frac{1}{4}\xi^2\}$ dies offensichtlich nicht ist. Das zeichnet den Wert $\nu = 0$ vor dem Wert $\nu = -1$ *physikalisch* aus – wir werden in kürze darauf zurückkommen.

Wenn es keine weiteren ausgezeichneten ν -Werte gäbe, würde das System nur den einen Zustand $\nu = 0$ besitzen und nicht in der Lage sein, Energie mit seiner Umgebung auszutauschen. Folglich muss es weitere ausgezeichnete ν -Werte geben. Um diese zu finden, benutzen wir die *Rekursionsbeziehungen* für die Lösungen (4.55) f. (vgl. Abramowitz & Stegun, 1964, 19.6.9 ff.):

$$\left(\frac{d}{d\xi} + \frac{\xi}{2}\right) y_\nu^g(\xi) = -\nu y_{\nu-1}^u(\xi) \quad (4.63)$$

$$\left(-\frac{d}{d\xi} + \frac{\xi}{2}\right) y_\nu^g(\xi) = (\nu + 1) y_{\nu+1}^u(\xi) \quad (4.64)$$

$$\left(\frac{d}{d\xi} + \frac{\xi}{2}\right) y_{\nu+1}^u(\xi) = y_\nu^g(\xi) \quad (4.65)$$

$$\left(-\frac{d}{d\xi} + \frac{\xi}{2}\right) y_{\nu-1}^u(\xi) = -y_{\nu}^g(\xi) \quad (4.66)$$

Die Rekursionsbeziehungen (4.63) und (4.66) bzw. (4.64) und (4.65) stellen jeweils eine spezielle Zerlegung der Differentialgleichung 2. Ordnung (4.54) in ein System zweier gekoppelter Differentialgleichungen 1. Ordnung dar.¹⁸ Sie ergeben sich aber nicht aus dem üblichen Lösungsverfahren für das Eigenwertproblem, sondern aus der Whittakerschen Integraldarstellung der Lösungen¹⁹. Sie gelten für alle Werte des Energieparameters, d. h. insbesondere auch für diejenigen Werte, die *keine* Eigenwerte im Sinne des vorigen Paragraphen sind. Sie stellen deshalb die gesuchte *intrinsische diskrete* Struktur der stationären Schrödinger-Gleichung dar.

Wenn es eine derartige Zerlegung gibt, ist das Energiespektrum diskret – andernfalls ist es kontinuierlich. Die Quantisierung selbst ist aber *nicht* an die Diskretisierung des Energiespektrums gebunden, wie wir weiter unten am Beispiel des freien Teilchens sehen werden.

In den Rekursionsbeziehungen werden nun nicht alle Lösungsfunktionen untereinander verknüpft, sondern immer nur eine bestimmte Teilmenge derselben, nämlich jeweils nur diejenigen, deren ν -Werte sich um ± 1 unterscheiden: die Lösungen $u_{\nu}(\xi)$ und $u_{\nu\pm 1}(\xi)$. Durch die Angabe nur einer Funktion, sagen wir $u_{\nu_1}(\xi)$, sind demnach zugleich alle Funktionen dieser Teilmenge: $u_{\nu_1\pm 1}(\xi)$, $u_{\nu_1\pm 2}(\xi)$, ... , eindeutig festgelegt. Dadurch teilen die Rekursionsbeziehungen das Kontinuum der ν -Werte in überabzählbar unendlich viele Klassen mit jeweils abzählbar unendlich vielen ν -Werten ein:

Klasse a): $\nu = \{\dots, -3, -2, -1\}$ [die Beziehungen (4.64) brechen bei $\nu = -1$ ab; das ist einer der beiden bereits oben gefundenen ausgezeichneten Werte];

Klasse b): $\nu = \{0, +1, +2, \dots\}$ [die Beziehungen (4.63) brechen bei $\nu = 0$ ab; das ist der andere der bereits oben gefundenen ausgezeichneten Werte];

Klasse c): $\nu = \dots, -2 + \nu_{ref}, -1 + \nu_{ref}, \nu_{ref}, +1 + \nu_{ref}, +2 + \nu_{ref}, \dots, -1 < \nu_r < 0$ [kein Abbruch der Beziehungen (4.63) oder (4.64)].

Das kleinste Intervall, das mittels der Rekursionsbeziehungen *alle* Lösungen repräsentiert, ist das geschlossene Intervall $\nu = [-1, 0]$. Auch hier sind die Werte $\nu = -1$ (Klasse a) und $\nu = 0$ (Klasse b) mathematisch ausgezeichnet, nämlich als die Randwerte dieses Intervalls. Alle inneren Punkte: $-1 < \nu < 0$ (Klasse c), sind mathematisch gleichwertig, folglich ist keiner von ihnen vor den anderen mathematisch ausgezeichnet.

Aufgabe: Vergleichen Sie die Operator-Faktoren in Gl.(4.62) mit den klassischen Variablen (3.55)!

¹⁸ Vgl. Schrödinger, *The Factorization of the Hypergeometric Equation*, 1941.

¹⁹ Whittaker & Watson, *A Course of Modern Analysis*, 1927, §16.12.

4.3.4 Auswahl der physikalisch ausgezeichneten Zustände ($E/\alpha\omega$ positiv)

Während im klassischen Fall alle E -Werte des Kontinuums $E > V_{\min}$ mathematisch (und physikalisch) gleichwertig sind, gibt es im quantenmechanischen Fall die mathematische Auszeichnung einer diskreten Teilmenge des Kontinuums, nämlich der Klassen (a) und (b). Da diese zwei Klassen mathematisch untereinander gleichwertig sind, können sie nur physikalisch voneinander unterschieden werden.

Was wir oben für die Funktionen $u_{-1}(\xi)$ und $u_0(\xi)$ im speziellen festgestellt haben, gilt nun für die Funktionen der Klassen (a) und (b) im allgemeinen: die Funktionen der Klasse (a) sind keine Begrenzungsfunktionen, während die der Klasse (b) solche sind. Tatsächlich steigen die Werte $x_{\max,n}$, für die die Hermiteschen Polynome $He_n(\xi)$ und damit die Lösungen $u_n(\xi)$ (4.61) ihr Maximum annehmen, mit n streng monoton an: $x_{\max,0} < x_{\max,1} < \dots$. Damit ist die Ordnungsrelation zwischen Energie und (effektiver) Ausdehnung in Orts- und Impulsraum entsprechend der verallgemeinerten Helmholtzschen Regel verwirklicht. Die kleinste Ausdehnung liegt – wie im Bohrschen Atommodell – im Grundzustand vor.

Ein noch stärkeres Auswahlkriterium liefert der Energiesatz. Da die Rekursionsbeziehungen mögliche Übergänge zwischen Systemzuständen anzeigen, könnte ein System im Zustand $\nu < 0$ in Zustände mit beliebig kleiner Energie ($E \rightarrow -\infty$) übergehen und dabei unbeschränkt Energie an die Umgebung abgeben (beispielsweise an ein Strahlungsfeld); es besäße damit einen unerschöpflichen Energievorrat. Diese Eigenschaft, ein *perpetuum mobile* zu sein, steht aber im Widerspruch zur Erfahrung.

Das heißt, die Übergänge in Zustände mit geringerer Energie müssen bei einem gewissen Minimum aufhören. Ein solches Minimum [„permanenter Zustand/Grundzustand“ (Bohr 1913) oder „Normalzustand“ (Heisenberg 1925)] ist nur in der Klasse (b) enthalten: $E_0 = \frac{1}{2}\alpha\omega$, $E_1 = \frac{3}{2}\alpha\omega$, \dots . Damit ist die Klasse (b) *physikalisch* vor der Klasse (a) durch ihre Verträglichkeit mit dem Energiesatz ausgezeichnet, mithin die physikalisch realisierbare.

Für den Wert $\nu = 0$ haben wir

$$\hat{b}u_0(\xi) = \frac{\xi}{2}u_0(\xi) + \frac{d}{d\xi}u_0(\xi) = 0; \quad u_0(\xi) = u_0(0)e^{-\xi^2/4} \quad (4.67)$$

Alle anderen Funktionen $u_n(\xi)$, $n = 1, 2, \dots$, lassen sich aus der Funktion $u_0(\xi)$ aufbauen:

$$u_{n+1}(\xi) = \hat{b}^+ u_n(\xi); \quad n = 0, 1, \dots \quad (4.68)$$

Dies sind gerade die Lösungen (4.61). Die entsprechenden Energien sind gerade die in Gl. (4.60) gefundenen:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \alpha\omega_{kl}; \quad n = 0, 1, \dots \quad (4.69)$$

Dieses Spektrum ist tatsächlich nach unten beschränkt [obwohl die hierfür übliche Forderung der Normierbarkeit (Bohm, 1989, § 13.5; Haken, 1973, §3) ausdrücklich *nicht* erhoben wurde]:

$$E_n \geq E_{\min} = E_0 = \frac{1}{2}\alpha\omega_{kl} \quad (4.70)$$

Das System besitzt also einen Grundzustand mit der Energie $E_0 = \frac{1}{2}\alpha\omega_{kl}$. Dieser ist größer als das Minimum der potenziellen Energie, $V_{\min} = 0$, in Übereinstimmung mit dem ganz allgemeinen Ergebnis (4.41).

Damit bestimmen die Rekursionsbeziehungen (4.63) f. die *physikalischen* Lösungen $f_E(x)$ und $g_E(p)$ *vollständig*, und zwar *ohne* Benutzung der Randbedingungen (4.36) – letztere werden „automatisch“ erfüllt. Diese Bestimmtheit ist klassischen Kontinuumtheorien fremd, sie rührt offenbar von der *intrinsisch diskreten* Struktur des Spektrums her. Die Schrödinger-Gleichung besitzt damit maximale „Stärke“ im Sinne Einsteins (1977, S.132).

Diese Überlegungen lassen sich in Richtung Dynamische Symmetrie weiterführen (Barut, 1964; Dothan, Gell-Mann & Ne’eman, 1965; Mukunda, O’Raifeartaigh & Sudarshan, 1965). Eine andere Verallgemeinerung dieses Zuganges stellt die Supersymmetrische Quantentheorie dar (Schwabl, *QM I*, Kap.19).

Schließlich kann man mit Hilfe der Rekursionsformel $He_{n+1}(x) = xHe_n(x) - nHe_{n-1}(x)$ und der Ungleichung $|He_n(x)| < \exp\{\frac{1}{4}x^2\}k\sqrt{n!}$ ($k \approx 1,086435$)²⁰ zeigen, dass in der Tat $V_{nkl}(x), T_{nkl}(p) \leq E_{nkl}$ gilt, wie oben gefordert wurde. Es ist sogar $u_n^2(\xi)\frac{1}{4}\xi^2 < (n + \frac{1}{2})$ ($-\infty < \xi < +\infty, n = 0, 1, \dots$). Das Kleiner-Zeichen anstelle des Kleiner-oder-gleich-Zeichens bedeutet, dass die Gesamtenergie nicht durch eine einzige (Impuls-)Konfiguration repräsentiert werden kann, insbesondere nicht durch die Konfiguration $x = 0$: Der Quantenoszillator besitzt keinen Zustand der Ruhe, wie wir es bereits im § 4.3.1 aus der Tatsache $E > V_{\min}$ geschlussfolgert hatten.

Es sei hervorgehoben, dass diese Ergebnisse allein aus den allgemeinsten Prinzipien der Zustandsbeschreibung nach Leibniz, Euler, Helmholtz und Schrödinger erwachsen, ohne irgend eine Zustands- oder Bewegungsgleichung gelöst zu haben.

4.3.5 Einsteinscher Oszillator – Bedeutung des Parameters α

Der numerische Wert des Parameters α kann – wie alle anderen universellen Naturkonstanten auch – nicht im Rahmen derjenigen Theorie berechnet werden, in der er eingeführt wurde. Den Vergleich mit dem Experiment nehmen wir anhand des Einsteinschen Oszillatormodells vor, da dieses ebenfalls äquidistante Energieniveaus besitzt: $E_{p+1} - E_p = h\nu_{Osz}$ ($p = 0, 1, \dots$; siehe Abschnitt 1.2). Folglich beschreibt unser nichtklassischer Oszillator einen Einsteinschen Oszillator, wenn wir

²⁰ Nach Abramowitz & Stegun (Hrsg.), *Handbook of Mathematical Functions*, 1964, 22.14.17.

$$\omega_{kl} = 2\pi\nu_{kl} = 2\pi\nu_{Osz} \quad (4.71)$$

und

$$\alpha = \frac{h}{2\pi} \equiv \hbar \quad (4.72)$$

setzen.

Dies hat wesentliche Konsequenzen:

1. Die klassische Kreisfrequenz ω_{kl} in $H(x, p)$ wird durch die Quantenoszillator-Frequenz ω_{Osz} ersetzt. Jedoch hat letztere nichts, aber auch gar nichts mit der periodischen Bewegung eines Massepunktes auf einer klassischen Bahn zu tun – vielmehr besitzt der nichtklassische Oszillator eine *andere* Art innerer Schwingung, wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden. Dieser fundamentale Unterschied wird verwischt, wenn man von der klassischen Hamilton-Funktion ausgeht und dann die klassische Schwingungsfrequenz stillschweigend mit der Einsteinschen Frequenz identifiziert.
2. \hbar ist eine systemunabhängige Konstante, die nicht nur für Strahlungsvorgänge charakteristisch ist.

Die Gleichheit von klassischer und quantenmechanischer Schwingungsfrequenz lässt sich für große Quantenzahlen auch aus dem Korrespondenzprinzip ableiten – die Gleichheit für kleine und mittlere Quantenzahlen bleibt dann aber ein Postulat²¹.

Zur Einführung und Bestimmung des Parameters $\alpha = \hbar$ sind noch einige weitere Bemerkungen angebracht.

- Der Parameter α erscheint als Folge der Verallgemeinerung der axiomatischen Voraussetzungen: α musste eingeführt werden, weil sich aus den klassischen inneren System-Parametern keine Größe mit der Dimension einer Wirkung ableiten lässt; insofern ist diese Einführung analog zu der von Planck (1900).
- Die Endlichkeit des Parameters α impliziert einen endlichen Abstand der kleinsten Gesamtenergie vom Minimum der potentiellen Energie; mithin gibt es keinen klassischen Zustand der Ruhe ($E = V_{\min}$, $x = x_{\min}^{kl}$, $p = 0$).
- Die Bestimmung der Energie ist damit vollständig, denn wenn sie noch von weiteren Parameter abhinge, wären ihre Werte nicht auf die hier berechneten beschränkt.

4.3.6 Wechselwirkungsfreier Körper – de Broglie-Beziehung $\lambda = h/p$

Das „freie Teilchen“, d.h. der wechselwirkungsfreie Körper ist als Sonderfall eines Systems ohne innere und äußere Wechselwirkung von grundlegender

²¹ Vgl. Bohr, *Über die Quantentheorie der Linienspektren*, 1923, S.27-36; Jammer, *The conceptual development of quantum mechanics*, 1967, Abschn. 3.2.

methodischer Bedeutung nicht nur für die Klassische, sondern auch für die Quantenmechanik. Er erweist sich auch für unsere Untersuchungen als wichtiger Spezialfall allgemeiner Ergebnisse.

Für verschwindendes Potenzial wird aus den Gleichungen (4.52) f.

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} f_{\text{frei}}(x) = E f_{\text{frei}}(x) \quad (4.73)$$

und

$$\frac{p^2}{2M} g_{\text{frei}}(p) = E g_{\text{frei}}(p) \quad (4.74)$$

Gemäß Gleichung (4.74) gilt für freie Quantenteilchen die klassische (!) Energie-Impuls-Beziehung.

Die erste Gleichung lässt sich elementar lösen:

$$f_{\text{frei}}(x) = f_{\lambda}(x) = f_c \cos\left(2\pi \frac{x}{\lambda}\right) + f_s \sin\left(2\pi \frac{x}{\lambda}\right); \quad E = E_{\lambda} = \frac{\hbar^2}{2M\lambda^2} \quad (4.75)$$

($f_{c,s}$ – Integrationskonstanten). Nun muss $F_{\text{frei}}(x) = |f_{\text{frei}}(x)|^2 = \text{const}$ gelten, weil infolge der Homogenität des Konfigurationsraumes alle Konfigurationen gleichwertig sind. Aus dieser Bedingung folgen die Reellwertigkeit von λ und die Komplexwertigkeit von $f_{\text{frei}}(x)$, d. h.

$$f_{\text{frei}}(x) = f_{\lambda}(x) = f_{\lambda}(0) \cdot e^{\pm 2\pi i \frac{x}{\lambda}}; \quad 0 \leq E = E_{\lambda} = \frac{\hbar^2}{2M\lambda^2} < \infty \quad (4.76)$$

Im Unterschied zum harmonischen Oszillator ist E_{λ} „automatisch“ nach unten beschränkt, und zwar für Werte $\lambda < \infty$. Deshalb benötigen wir keine Abbruchbedingungen. Und es gibt keine Rekursionsgleichungen, das heißt, die Menge der Energiewerte der Zustandsgleichung (4.73) zerfällt nicht in diskrete Untermengen – es wäre ja auch kein Auswahlkriterium für eine dieser Untermengen als physikalisch realisierbare vorhanden: der Energiesatz ist dank Gleichung (4.74) bereits für alle Energiewerte (4.76) erfüllt, und nach unten beschränkt sind diese auch.

Die Funktion $g_{\text{frei}}(p)$ lässt sich als Fourier-Transformierte der Funktion $f_{\text{frei}}(x)$ bestimmen:

$$g_{\text{frei}}(p) = g_{\lambda}(p) = f_c \sqrt{\hbar} \delta(p \pm p_{\lambda}); \quad p_{\lambda} = \frac{\hbar}{\lambda} \quad (4.77)$$

Hier tritt die de Brogliesche Beziehung (1924)

$$\lambda = \frac{\hbar}{p} \quad (4.78)$$

auf, die damit unabhängig und im Rahmen einer nichtrelativistischen Theorie hergeleitet wurde (de Broglie schlussfolgerte, dass die Plancksche Beziehung $E = h\nu$ aus speziell-relativistischen Gründen für alle Komponenten des Energie-Impuls-Vierervektors einerseits und des Frequenz-Wellenzahl-Vierervektors andererseits gelten sollte).

Wir haben damit alle Relationen, die de Broglie seinerzeit als notwendige und hinreichende Voraussetzungen benutzte, um die Synthese des Wellen- und des Teilchenbildes zu begründen, aus völlig anderen, teilweise sogar konträren Annahmen über die Beschaffenheit eines nichtklassischen Systems abgeleitet.

Ein wechselwirkungsfreies Quantenteilchen ist trotz der eindeutigen Zuordnung eines bestimmten Impuls-Wertes nicht mit einem klassischen wechselwirkungsfreien Körper zu verwechseln, da $F_{\text{frei}}(x) \neq F_{E_{\text{kl}}}(x)$ und $G_{\text{frei}}(p) \neq G_{E_{\text{kl}}}(p)$ sind.

Aufgabe:*

- A) Kann man die Lösung (4.75) als Grenzfall der Lösung (4.61) erhalten?
 B) Die Integrale $\int_{-\infty}^{+\infty} |f_{\lambda}(x)| dx$, $\int_{-\infty}^{+\infty} |f_{\lambda}(x)|^2 dx$ und $\int_{-\infty}^{+\infty} |g_{\lambda}(p)|^2 dp$ existieren nicht. Hat das Konsequenzen für die Anwendbarkeit unseres Zuganges?
 Hinweis: Gl.(4.49). Untersuchen Sie auch den Ansatz $G(p) = p_o \delta(p - p_o)$!

Aufgabe: Diskutieren Sie die Tatsache, dass hier der Fall der Ruhe möglich ist! Hinweis: Ersetzen Sie λ durch E und setzen Sie $E = 0$!

4.3.7 Energie versus Ausdehnung eines quantenmechanischen Systems *

Wir zeigen nun, dass in der Tat auch bei quantenmechanischen Systemen eine Erhöhung der Gesamtenergie mit einer Vergrößerung der effektiven Ausdehnung verbunden ist.

Dazu betrachten wir den quantenmechanischen Virialsatz²²

$$2 \int \bar{\psi}_E(\mathbf{x}) T(-i\hbar \nabla) \psi_E(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int \bar{\psi}_E(\mathbf{x}) (\mathbf{x} \cdot \nabla V)(\mathbf{x}) \psi_E(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (4.79)$$

für homogene Potenziale vom Grade n : $V(\mathbf{x}) = V_x |x|^n + V_y |y|^n + V_z |z|^n$ ($V_{x,y,z} \geq 0$, $n > 0$). In diesem Fall ist nach dem Eulerschen Satz für homogene

²² Vgl. Ruark, *The Zeeman effect and Stark effect of hydrogen in wave mechanics: the force equation and the virial theorem in wave mechanics*, 1928. – Der Satz stammt ursprünglich aus der mechanischen Wärmelehre (Clausius, *Über einen auf die Wärme anwendbaren mechanischen Satz*, 1870). Rudolf Clausius (1822-1888) bezeichnete die Größe $\frac{1}{2} \sum_a \mathbf{r}_a(t) \cdot \mathbf{K}_a(t)$ (es wird über alle Körper a des Systems summiert und das zeitliche Mittel gebildet) als *Virial* (nach dem lateinischen Wort *vir* für Kraft). Dabei wird vorausgesetzt, dass die Bewegung ganz im Endlichen verläuft und die Kräfte beschränkt seien; s. auch Landau & Lifschitz, *Mechanik*, §10.

Funktionen $\mathbf{x} \cdot \nabla V(\mathbf{x}) = nV(\mathbf{x})$. Damit und dank der Separation $\psi_E(\mathbf{x}) = \psi_{E_x}(x)\psi_{E_y}(y)\psi_{E_z}(z)$ erhalten wir für die Gesamtenergie

$$E = \left(\frac{n}{2} + 1\right) \int \bar{\psi}_E(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}) \psi_E(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \left(\frac{n}{2} + 1\right) \int V_x |x|^n \psi_{E_x}(x)^2 dx + \dots \quad (4.80)$$

Der Leser möge sich anhand des harmonischen Oszillators und des Kepler-Potenzials davon überzeugen, dass mit zunehmenden Energiewerten $E_{x(y,z)}$ die Maxima der Begrenzungsfunktionen $F_{E_{x(y,z)}}$ bei ebenfalls zunehmenden Werten von $|x|$ ($|y|$, $|z|$) liegen.

Aufgabe: Beweisen Sie Gleichung (4.79)! Hinweis: Lösen Sie den Kommutator in der Identität $\int \bar{\psi}_E(\mathbf{x}) [\hat{H}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{p}}] \psi_E(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \equiv 0$ auf (vgl. Schwabl, *QM I*, S. 206)!

4.4 Von der Amplituden- zur eigentlichen Wellengleichung: Voraussetzungsfreie Begründung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

Sobald aber V die Zeit explizite enthält, ist es offenbar unmöglich, der Gleichung (1) bzw. (1') zu genügen durch eine Funktion ψ , welche nur nach (2) von der Zeit abhängt.

(E. Schrödinger, 1926²³)

Mit dem Aufstellen der Wellengleichung (4.1) war für Schrödinger der entscheidende Schritt getan. Nach der Ersetzung der Energie erhielt Schrödinger eine partielle Differentialgleichung von zweiter Ordnung in der Zeit- und vierter Ordnung in der Ortsvariablen, ähnlich der Wellengleichung für dicke Platten (*Vierte Mitteilung*, S.176, Fn.1). Um die Ortsableitung vierter Ordnung zu vermeiden, faktorisierte er die entsprechende stationäre Gleichung zu

$$\Delta\psi - \frac{8\pi^2}{h^2} V\psi \mp \frac{4\pi i}{h} \frac{\partial\psi}{\partial t} = 0 \quad (4.81)$$

Er postulierte dann, dass diese Gleichung auch für nichtstationäre Vorgänge gültig sei. Tatsächlich führt die auf dieser Gleichung beruhende Störungstheorie (*Ebda.*, §2) zu den richtigen Termserien der Spektroskopie und zum Erhaltungssatz $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = \text{const}$ (*Ebda.*, §7).

In Gleichung (4.81) tritt der imaginäre Faktor $i = \sqrt{-1}$ nicht mehr nur als Rechengröße auf, wie etwa in der Elektrotechnik. „Eine gewisse Härte

²³ *Vierte Mitteilung*, S.110; gemeint sind die stationäre Gleichung und der Faktor $\exp\{i\omega t\}$.

liegt ohne Zweifel zurzeit noch in der Verwendung einer *komplexen* Wellenfunktion.“ (*Ebda.*, S.139) Wir haben diese Komplexwertigkeit schon in den klassischen Variablen (3.55) und bei der Ortsabhängigkeit der Wellenfunktion (4.76) für das freie Teilchen angetroffen und können daher mit ihr ungezwungener umgehen.

Da wir von einer zeit*freien* Zustandsbeschreibung ausgegangen sind, müssen wir die Zeitabhängigkeit separat einführen. Dazu werden wir verschiedene, voneinander unabhängige Wege einschlagen. Zunächst untersuchen wir die Zeitabhängigkeit der stationären Zustände.

4.4.1 Die Zeitabhängigkeit der stationären Zustände

Im stationären Fall sind die Funktionen $T(p)$ und $V(x)$ nach wie vor zeitunabhängig. Eine Zeitabhängigkeit kann daher nur über die Wellenfunktionen in die Zustandsbeschreibung eingehen; wir setzen deshalb $f_E(x) \rightarrow f_E(x, t)$ und $g_E(p) \rightarrow g_E(p, t)$. Wir leiten in diesem Paragrafen die *einzige mit der Stationarität verträgliche* Zeitabhängigkeit der Wellenfunktionen $f_E(x, t)$ und $g_E(p, t)$ ab.

In Analogie zur klassischen Wellenlehre würde man vermuten, dass die stationären Schrödinger-Gleichungen (4.50) und (4.51) die Gleichungen für die räumliche Variation der Amplituden stehender Wellen sind (Schrödinger, *Vierte Mitteilung*, S.110). In diesem Fall wären sie aus der multiplikativen Separation der Variablen entstanden:

$$\hat{H}(x)f_E(x, t) = \hat{E}(t)f_E(x, t); \quad \hat{H}(p)g_E(p, t) = \hat{E}(t)g_E(p, t) \quad (4.82)$$

$$f_E(x, t) = f_E(x)\theta_E(t); \quad g_E(p, t) = g_E(p)\theta_E(t) \quad (4.83)$$

Der Faktor $\theta_E(t)$ ist für beide Funktionen: $f_E(x, t)$ und $g_E(p, t)$, derselbe, da diese aus denselben Gründen Fourier-Transformierte voneinander sind, aus denen es die Funktionen $f_E(x)$ und $g_E(p)$ sind. $\hat{E}(t)$ ist der zu bestimmende Differentialoperator bezüglich der Zeit, und E spielt die Rolle der Separationskonstanten:

$$\hat{E}(t)\theta_E(t) = E\theta_E(t) \quad (4.84)$$

Tatsächlich ist nur eine multiplikative Zeitabhängigkeit der Form (4.83) mit der nichtklassischen Darstellung der Energie,

$$E = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} |g_E(p, t)|^2 T(p) dp}{\int_{-\infty}^{+\infty} |g_E(p, t)|^2 dp} + \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} |f_E(x, t)|^2 V(x) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |f_E(x, t)|^2 dx} \quad (4.85)$$

verträglich. Es findet – im Unterschied zum klassischen Fall – keine Kompensation zeitlicher Veränderungen zwischen den beiden additiven Termen statt: beide sind für sich zeitunabhängig.

Der Differentialoperator $\hat{E}(t)$ und die Funktion $\theta_E(t)$ lassen sich – bis auf eine Konstante – aus recht allgemeinen Überlegungen bestimmen:

1. Die Funktionen $F_E(x, t) = |f_E(x, t)|^2$ und $G_E(p, t) = |g_E(p, t)|^2$ sind zeitunabhängig, denn andernfalls würde die Zuordnung zwischen Energie und effektiver Ausdehnung verloren gehen. Folglich kommt für den Zeitfaktor nur ein Phasenfaktor infrage:

$$\theta_E(t) = e^{i\varphi_E(t)} \quad (4.86)$$

2. Da nur die Lösungen $f_E(x)$ und $g_E(p)$ als Anfangsbedingungen zur Verfügung stehen:

$$f_E(x, 0) = f_E(x); \quad g_E(p, 0) = g_E(p) \quad (4.87)$$

ist der Differentialoperator $\hat{E}(t)$ von erster Ordnung. Die Formeln (4.84) und (4.86) ergeben daraus sofort die Ausdrücke

$$\hat{E}(t) = i\beta \frac{\partial}{\partial t}; \quad \theta_E(t) = \exp \left\{ \frac{Et}{i\beta} \right\} \quad (4.88)$$

Der reellwertige Faktor β hat die Dimension einer Wirkung. Damit besitzt die Funktion $\theta_E(t)$ die kombinierte Zeitumkehrsymmetrie der orts- und impulsabhängigen Funktionen in Gleichung (3.55): $\theta(-t) = \bar{\theta}(t)$. – Wir hätten übrigens auch mit dieser Eigenschaft beginnen können den Zeitfaktor zu bestimmen.

3. Für freie Teilchen (siehe § 4.3.6) ist $f_E(x, t) \sim e^{i(kx - \omega t)}$, $g_E(p, t) \sim \delta(p - \hbar k) e^{-i\omega t}$ ($\omega = E/\beta$) nebst $E = \hbar^2 k^2 / 2M$. Hierbei ist die Gruppengeschwindigkeit gleich der (zeitunabhängigen) Teilchengeschwindigkeit: $v_g = d\omega/dk \stackrel{!}{=} p/M$. Demnach ist $\beta = \hbar$ und schließlich

$$f_E(x, t) = f_E(x) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}; \quad g_E(p, t) = g_E(p) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \quad (4.89)$$

Es ist hiernach dieselbe universelle Konstante \hbar , die die nichtklassische Ausdehnung im Phasenraum einerseits und das nichtklassische Zeitverhalten andererseits bestimmt (üblicherweise wird ein solcher Zusammenhang durch eine Geschwindigkeit vermittelt).

4.4.2 Die Zustandsänderungs- und Bewegungsgleichungen im stationären Fall

Wir zeigen nun, das man diese nichtklassischen Ergebnisse auch dann erhält, wenn man die klassischen Methoden der Zustandsbeschreibung aus dem Abschnitt 3.4 auf geeignete Weise anwendet. Das untermauert ihre nachfolgende Anwendung auf den nichtstationären nichtklassischen Fall.

Wir können zunächst wieder die Entsprechungen (4.37) benutzen, um jeweils eine der beiden Funktionen: $f_E(x, t)$ bzw. $g_E(p, t)$, zu eliminieren:

$$E = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_E(x, t) \hat{H}(x) f_E(x, t) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_E(x, t) f_E(x, t) dx} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{g}_E(p, t) \hat{H}(p) g_E(p, t) dp}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{g}_E(p, t) g_E(p, t) dp} \quad (4.90)$$

Nach dem Vorbild der klassischen Zustandsfunktion $Z(t) = H(x(t), p(t))$ (siehe § 3.4.2) wählen wir für die nichtklassische Zustandsfunktion den Ausdruck

$$Z_E(t) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_E(x, t) \hat{H}(x) f_E(x, t) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_E(x, t) f_E(x, t) dx} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{g}_E(p, t) \hat{H}(p) g_E(p, t) dp}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{g}_E(p, t) g_E(p, t) dp} \quad (4.91)$$

Um die nachfolgenden Rechnungen übersichtlicher zu gestalten, bedienen wir uns der Diracschen²⁴ Bra-Ket-Notation und setzen (die Durchführung der analogen Rechnungen im Impulsraum empfehlen wir wie immer als Übung)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_E(x, t) \hat{H}(x) f_E(x, t) dx &\equiv \langle f_E(x, t) | \hat{H}(x) | f_E(x, t) \rangle \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}_E(x, t) f_E(x, t) dx &\equiv \langle f_E(x, t) | f_E(x, t) \rangle \end{aligned} \quad (4.92)$$

Dann haben wir für die Zustandsänderung bezüglich der Zeit ($d\hat{H} = \hat{0}$)

$$dZ_E(t) = \frac{\langle df | \hat{H} | f \rangle + \langle f | \hat{H} | df \rangle - (\langle df | f \rangle + \langle f | df \rangle) E}{\langle f | f \rangle} = 0 \quad (4.93)$$

Das impliziert

$$\hat{H}(x) f_E(x, t) = E f_E(x, t) \quad (4.94)$$

und/oder

$$\langle df | \hat{H} | f \rangle + \langle f | \hat{H} | df \rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle df | f \rangle + \langle f | df \rangle = 0 \quad (4.95)$$

Wir werden sehen, dass beide Forderungen zu denselben Ergebnissen führen.

Um die Gleichungen (4.95) zu befriedigen, setzen wir

$$\begin{aligned} f_E(x, t) &= \hat{U}_E(x, t) f_E(x, 0); & \hat{U}_E(x, 0) &= \hat{1}; \\ df_E(x, t) &= d\hat{U}_E(x, t) f_E(x, 0) \end{aligned} \quad (4.96)$$

²⁴ Paul Adrien Maurice Dirac (1902-1984, Nobelpreis 1933), *The Principles of Quantum Mechanics*, 1930.

an. Der unitäre Operator $\hat{U}_E(x, t)$ beschreibt die zeitliche Veränderung der Funktion $f_E(x, t)$. Die Homogenität in f_E berücksichtigt die Tatsache, dass gemäß Gleichung (4.85) nur die *relativen* Werte von $f_E(x, t)$ physikalische Bedeutung besitzen.

Damit schreiben sich die Gleichungen (4.95) zu

$$\left\langle d\hat{U}_E f_E | \hat{H} | \hat{U}_E f_E \right\rangle + \left\langle \hat{U}_E f_E | \hat{H} | d\hat{U}_E f_E \right\rangle = 0 \quad (4.97)$$

und

$$\left\langle d\hat{U}_E f_E | \hat{U}_E f_E \right\rangle + \left\langle \hat{U}_E f_E | d\hat{U}_E f_E \right\rangle = 0 \quad (4.98)$$

Die beide Beziehungen sowie die „Anfangsbedingung“ $\hat{U}_E(x, 0) = \hat{1}$ befriedigende Lösung lautet

$$d\hat{U}_E(x, t) = i\gamma \hat{H}(x) \hat{U}_E(x, t) dt; \quad \hat{U}_E(x, t) = e^{i\gamma \hat{H}(x)t} \quad (4.99)$$

Der reellwertige Zahlenfaktor γ wurde aus Dimensions- und Flexibilitätsgründen eingesetzt.

Die Wellenfunktion $f_E(x, t)$ genügt demnach der Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} f_E(x, t) = i\gamma \hat{H}(x) f_E(x, t); \quad f_E(x, 0) = f_E(x) \quad (4.100)$$

Da $\hat{H}(x)$ zeitunabhängig ist, können wir zu ihrer Lösung die Bernoullische Separationsmethode²⁵ anwenden:

$$f_E(x, t) = f_E(x) \cdot \theta_E(t) \quad (4.101)$$

Jetzt sind die Gleichungen (4.94) f. befriedigt, wenn

$$\hat{H}(x) f_E(x) = E f_E(x) \quad (4.102)$$

und

$$\theta_E(t) = e^{i\gamma E t} \quad (4.103)$$

gelten. Der Vergleich mit der Wellenfunktion für ein freies Teilchen liefert analog zum vorangegangenen Paragrafen den Wert $\gamma = -1/\hbar$. Die weitere Diskussion dieser Lösung verläuft dann wie im Text nach Gleichung (4.89).

Damit erweist sich $\hat{U}_E(x, t)$ als der bekannte stationäre *Zeitentwicklungsoperator* in der Ortsdarstellung (Pauli, 1933, § I.8), und wir können die Funktionen $f_E(x, t)$ und $g_E(p, t)$ im wesentlichen mit den Schrödingerschen Wellenfunktionen $\psi_E(x, t)$ und $\phi_E(p, t)$ identifizieren.

²⁵ Bernoulli, *Examen principorum mechanicae*, 1726 (nach Gould, 1957, Kap. III).

4.4.3 Die Prinzipien der Zustandsänderung für quantenmechanische Systeme

Da die Prinzipien PS1 bis PS5 der Zustandsveränderung für klassisch-mechanische Systeme aus dem § 3.4.2 nur das Verhältnis von Zustands- und Nicht-Zustandsgrößen sowie ihren Änderungen betreffen, sind sie verallgemeinerungsfähig. Im nichtklassischen Fall treten natürlich andere Variablen als Zustands- bzw. Nicht-Zustandsgrößen auf, nämlich eine nichtklassische Zustandsfunktion anstelle der klassischen sowie die Wellenfunktionen $\psi(x, t)$ und $\phi(p, t)$ anstelle der Bahnparameter $x(t)$ und $p(t)$. Infolge dieser Ersetzungen ergeben sich die folgenden Prinzipien der Zustandsänderung für quantenmechanische Systeme:

Prinzip PQ1: Die Änderungen der Zustandsgrößen (dZ) hängen nur von den äußeren Ursachen ($\partial V_{ext}/\partial t$) ab, nicht aber von den inneren Ursachen (H_0); insbesondere gilt $dZ = 0$, wenn $\partial V_{ext}/\partial t = 0$;

Prinzip PQ2: Die Änderungen der Zustandsgrößen (dZ) sind unabhängig von den Zustandsgrößen (Z) selbst;

Prinzip PQ3: Die Änderungen der Nicht-Zustandsgrößen ($d\psi, d\bar{\psi}$) hängen direkt nur von den Zustandsgrößen (Z) ab; die äußeren Ursachen ($\partial V_{ext}/\partial t$) beeinflussen die Nicht-Zustandsgrößen ($\psi, \bar{\psi}$) nur indirekt über die Zustandsgrößen (Z);

Prinzip PQ4: Die Änderungen der Zustands- (dZ) und der Nicht-Zustandsgrößen ($d\psi, d\bar{\psi}$) sind unabhängig voneinander;

Prinzip PQ5: Sobald die äußeren Ursachen verschwunden sind: $\partial V_{ext}/\partial t = 0$ für $t \geq t_1$, verbleibt das System in dem zu diesem Zeitpunkt eingenommenen Zustand; falls dieser Zustand ein stationärer Zustand des Hamiltonians $\hat{H}(t_1, x) = \hat{H}_0(x) + V_{ext}(t_1, x)$ ist, sagen wir, E_1 , so ist $\psi(x, t) = \psi_{E_1}(x, t) = \psi_{E_1}(x, t_1) \exp\{-\frac{i}{\hbar} E_1 (t - t_1)\}$ für $t \geq t_1$.

Analog zur Ableitung der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen aus den klassischen Prinzipien PS1 ... PS5 im § 3.4.2 werden wir jetzt aus den quantenmechanischen Prinzipien PQ1 ... PQ5 die wellenmechanischen Bewegungsgleichungen ableiten.

4.4.4 Die Zustandsänderungsgleichungen im nichtstationären Fall

... wir entnehmen den zeitlich *variablen* Teil der Potenzialfunktion mit ebensoviel oder ebensowenig Recht der gewöhnlichen Mechanik, wie früher, z. B. beim Kepler-Problem, den *konstanten*

(E. Schrödinger, 1926²⁶)

Die Gleichung (4.100) ist nur kinetischer, nicht dynamischer Natur, wir müssen sie für den allgemeinen zeitabhängigen Fall aus geeigneten dynamischen Prinzipien für die Zustandsänderung ableiten. Hierfür bedienen wir uns der Prinzipien PQ1 ... PQ5 aus dem vorangegangenen Paragraphen.

²⁶ *Vierte Mitteilung*, S.113 (Hervorhebungen im Originaltext).

Als Zustandsfunktion wählen wir in Verallgemeinerung der Funktion $Z_E(t)$ (4.91) den Ausdruck

$$Z_{\text{nkl}}(t) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(x, t) \hat{H}(t, x) \psi(x, t) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(x, t) \psi(x, t) dx} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\phi}(p, t) \hat{H}(t, p) \phi(p, t) dp}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\phi}(p, t) \phi(p, t) dp}; \quad (4.104)$$

$$\hat{H}(t, x) = \hat{H}_0(x) + V_{\text{ext}}(t, x); \quad \hat{H}(t, p) = \hat{H}_0(p) + V_{\text{ext}}(t, i\hbar \frac{\partial}{\partial p}) \quad (4.105)$$

$\psi(x, t)$ und $\phi(p, t)$ sind die natürlichen Verallgemeinerungen der Funktionen $\psi_E(x, t)$ und $\phi_E(p, t)$ auf den allgemeinen zeitabhängigen Fall; aus Kontinuitätsgründen sind sie Fourier-Transformierte voneinander. Im stationären Zustand ist gemäß PQ5 $\psi(x, t) = \psi_E(x, t)$, $\phi(p, t) = \phi_E(p, t)$, $Z_{\text{nkl}} = E_{\text{nkl}} = \text{const}$ und $dZ_{\text{nkl}} = 0$.

Das bedeutet für die *Zustandsänderung* (wir lassen den Index nkl wieder fort)

$$\begin{aligned} dZ &= \frac{\langle d\psi | \hat{H} | \psi \rangle + \langle \psi | d\hat{H} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{H} | d\psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} - \frac{\langle d\psi | \psi \rangle + \langle \psi | d\psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle^2} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \\ &\stackrel{!}{=} \frac{\langle \psi | d\hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \end{aligned} \quad (4.106)$$

Diese Forderung impliziert die zwei Bedingungen

$$\langle d\psi | \hat{H} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{H} | d\psi \rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle d\psi | \psi \rangle + \langle \psi | d\psi \rangle = 0 \quad (4.107)$$

Um diese zu befriedigen, setzen wir analog zum stationären Fall (4.99)

$$\psi(x, t) = \hat{U}(x; t, 0) \psi(x, 0); \quad \hat{U}(x; t, t) = 1; \quad d\psi(x, t) = d\hat{U}(x; t, 0) \psi(x, 0) \quad (4.108)$$

Damit schreiben sich die Bedingungen (4.107)

$$\langle d\hat{U} \psi | \hat{H} | \hat{U} \psi \rangle + \langle \hat{U} \psi | \hat{H} | d\hat{U} \psi \rangle = 0 \quad (4.109)$$

und

$$\langle d\hat{U} \psi | \hat{U} \psi \rangle + \langle \hat{U} \psi | d\hat{U} \psi \rangle = 0 \quad (4.110)$$

Die im Prinzip PQ5 beschriebene Kompatibilität mit dem stationären Ausdruck (4.99) führt auf die Lösung

$$d\hat{U}(x; t, 0) = \frac{-i}{\hbar} \hat{H}(x, t) \hat{U}(x; t, 0) dt;$$

$$\hat{U}(x; t_2, t_1) = \hat{P} \left(\exp \left\{ \frac{-i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \hat{H}(x, t') dt' \right\} \right) \quad (4.111)$$

wobei \hat{P} Dysons²⁷ Zeitordnungsoperator ist. Der unitäre Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(x; t, t')$ wird oft auch Dyson-Operator genannt.

Damit erhalten wir die *Zustandsänderungsgleichung*

$$dZ(t) = \frac{1}{\langle \psi(x, t) | \psi(x, t) \rangle} \left\langle \psi(x, t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \hat{H}(x, t) \right| \psi(x, t) \right\rangle dt \quad (4.112)$$

4.4.5 Die Bewegungsgleichungen im nichtstationären Fall

Als *Bewegungsgleichung* erhalten wir aus Gleichung (4.111) zunächst die nichtstationäre Schrödinger-Gleichung in Operator-Form für den Zeitentwicklungsoperator:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(x; t, 0) = \hat{H}(x, t) \hat{U}(x; t, 0) \quad (4.113)$$

Mit Gleichung (4.108) folgt daraus die *nichtstationäre Schrödinger-Gleichung* für die Wellenfunktion selbst:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H}(x, t) \psi(x, t); \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \bar{\psi}(x, t) = \hat{H}(x, t) \bar{\psi}(x, t) \quad (4.114)$$

Sie wäre nach Schrödinger (*Vierte Mitteilung*, S.110) – im Unterschied zu der stationären „Amplitudengleichung“ (4.46) bzw. (4.47) – als die „eigentliche Wellengleichung“ zu bezeichnen.

Auf analoge Weise erhält man die Impuls-Darstellung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(p, t) = \hat{H}(p, t) \phi(p, t); \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \bar{\phi}(p, t) = \hat{H}(p, t) \bar{\phi}(p, t) \quad (4.115)$$

Die beiden Paare (4.114) und (4.115) betrachten wir als die wellenmechanischen *Bewegungsgleichungen* oder, mit Schrödingers Worten (*Vierte Mitteilung*, S.109), als die *allgemeinen* und *einheitlichen* Veränderungsgesetze für die „mechanischen Feldskalare“.

Wie im klassischen Fall enthält die Bewegungsgleichung *keine* Erhaltungsgrößen.

Aus seiner Definition (4.108) folgt sofort, dass der Zeitentwicklungsoperator auch im allgemeinen, nichtstationären Fall die Gruppeneigenschaft

$$\hat{U}(x; t_2, t_1) \hat{U}(x; t_1, t_0) = \hat{U}(x; t_2, t_0) \quad (4.116)$$

²⁷ Freeman John Dyson (*1923), *The radiation theories of Tomonaga, Schwinger, and Feynman*, 1949; *The S-matrix in quantum electrodynamics*, 1949.

besitzt (vergleiche die analoge Formel im § 3.4.3). Mithin gilt (Pauli, 1933, § I.8)

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} U(x, x'; t, 0) \psi(x', 0) dx'; \quad U(x, x'; 0, 0) = \delta(x - x') \quad (4.117)$$

Dieser Integralkern genügt der Chapman-Kolmogoroff-Gleichung²⁸:

$$U(x, x'; t_2, t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} U(x, x''; t_2, t_1) U(x'', x'; t_1, t_0) dx''; \quad t_0 \leq t_1 \leq t_2 \quad (4.118)$$

Diese Gleichung ist eine universelle Formulierung des Huygensschen Prinzips und der Kern $U(x, x'; t_1, t_0)$ die Greensche Funktion²⁹ der nichtstationären Schrödinger-Gleichung (4.114). Verbindet man diese Greensche Funktion mit den Übergangswahrscheinlichkeits-Amplituden zwischen zwei Zuständen, so stellt Gleichung (4.118) die Grundlage des Feynmanschen Wegintegralverfahrens³⁰ dar. Die Anwendung dieser Vorstellung auf die Optik und andere Wellenprozesse gelingt durch die Rückführung der Wellengleichungen auf Systeme von Differentialgleichungen von *erster* Ordnung bzgl. der Zeitvariablen (Enders, 1996).

Aufgabe: Sind $\psi(x, t)$ und $\phi(p, t)$ unabhängige dynamische Variable? Hinweis: Die Anfangsbedingungen solcher Variablen sind unabhängig voneinander.

4.4.6 Der invariante Ausdruck im nichtstationären Fall *

Abschließend zeigen wir, dass man zur nichtstationären Schrödinger-Gleichung auch gelangt, indem man einen invarianten Ausdruck konstruiert, der den invarianten Ausdruck (4.104) ersetzt – sich im stationären Fall aber auf jenen reduziert.

Wenn die potenzielle Energie von der Zeit abhängt, ist der Ausdruck auf der rechten Seite von Gleichung (4.30) nicht mehr zeitlich konstant:

²⁸ Sydney Chapman (1888-1970) & T.G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases. An account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction, and diffusion in gases*, 1939; Andrej Nikolajewitsch Kolmogoroff (1903-1987), *Über die analytischen Methoden der Wahrscheinlichkeitsrechnung*, 1931; *Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung*, 1933.

²⁹ George Green (1793-1841), *Essay on the application of mathematical analysis on the theories of electricity and magnetism*, 1828. – Siehe auch Dyson, *George Green and physics*, 1993.

³⁰ Richard Phillips Feynman (1918-1988, Nobelpreis 1965), *Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics*, 1948.

$$\frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\phi}(p, t) \phi(p, t) T(p) dp}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\phi}(p, t) \phi(p, t) dp} + \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(x, t) \psi(x, t) V(x, t) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(x, t) \psi(x, t) dx} \neq \text{const} \quad (4.119)$$

Die Forderung nach einer Invarianz des Gesamtausdruckes kann deshalb nur erfüllt werden, wenn neben den Wellenfunktionen weitere zeitabhängige Ausdrücke berücksichtigt werden. Da wir für das „Veränderungsgesetz für den Feldskalar“ (Schrödinger) eine Differentialgleichung in der Zeit suchen (ein Ausdruck ohne Zeitableitung impliziert eine instantane Reaktion auf eine äußere Einwirkung), versuchen wir, die zeitlichen Abhängigkeiten der Zähler durch Zeitableitungen im Nenner zu kompensieren:

$$\frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\phi}(p, t) \phi(p, t) T(p) dp}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\phi}(p, t) \frac{\partial}{\partial t} \phi(p, t) dp} + \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(x, t) \psi(x, t) V(x, t) dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) dx} \stackrel{!}{=} \delta = \text{const} \quad (4.120)$$

Ableitungen höherer Ordnung werfen das Problem der Anfangswerte der Ableitungen niedrigerer Ordnung auf.

Nach dieser Modifikation hat der Gesamtausdruck die Dimension einer Wirkung und es fragt sich, ob damit ein weiterer Parameter von der Dimension einer Wirkung eingeführt und festgelegt wird, oder der Wirkungsparameter des stationären Falles Verwendung findet. Tatsächlich trifft letzteres zu, denn dieser Ausdruck ist mit dem stationären Fall (4.100) kompatibel, wenn wir $\delta = i\hbar$ setzen.

Analog zum stationären Fall können wir nun die Funktion $\phi(p, t)$ beziehungsweise $\psi(x, t)$ mittels Fourier-Transformation eliminieren und gelangen so ebenfalls zu den zeitabhängigen Schrödinger-Gleichungen (4.114) f.

4.5 Symmetrie der Begrenzungsfunktionen – Symmetrie der Wellenfunktionen

Symmetrien und die mit ihnen verbundenen Erhaltungssätze spielen eine hervorgehobene Rolle, denn der Begriff der Veränderung ist undenkbar ohne den Begriff der Nicht-Veränderung (Erhaltung, Unveränderlichkeit). Während man in der Ästhetik die Symmetrie vorzugsweise an einzelnen Dingen betrachtet, studiert man sie in der Physik an Klassen von Dingen (im mententheoretischen Sinne).³¹ Wir wollen uns hier mit Symmetrieeigenschaften

³¹ Prägnante Zusammenfassungen der wichtigsten allgemeinen physikalischen Aspekte finden sich z.B. in den Nobelpreisreden von Wigner (*Events, laws of nature, and invariance principles*, 1963) und Yang (*The law of parity conservation and other symmetry laws of physics*, 1957).

beschäftigen, die aus der *physikalischen Bedeutung der Begrenzungsfunktionen* erwachsen. Dank letzterer werden uns einige Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktionen selbst mehr oder weniger in den Schoß fallen, die üblicherweise weitere, *zusätzliche* Postulate benötigen. Die durch den Energiesatz vorgegebene Symmetrie der Begrenzungsfunktionen kann sogar die möglichen Formen der Wechselwirkung einer elektrischen Ladung mit einem elektromagnetischen Feld einschränken.

4.5.1 Die Theoreme von Noether, von Neumann und Wigner

Die grundsätzliche Bedeutung der Symmetrie in der Physik wird durch das

Noethersche Theorem: *Zu jeder Symmetrie gehört eine Erhaltungsgröße.*³²

und durch das

von-Neumannsche Theorem: *Die Observablen besitzen die Symmetrie des Systems.*³³

unterstrichen. Die Symmetrie des Systems ist durch die Symmetrie der Lagrange- und der Hamilton-Funktion definiert, sie betrifft nicht nur die Bewegung eines Systems im Phasenraum, sondern auch die Abhängigkeit von Parametern und den Austausch gleicher Teilsysteme (Permutationssymmetrie, siehe Abschnitt 5.2). Beide Theoreme gelten sowohl in der klassischen, als auch in der Quantenphysik. „Observablen“ bezieht sich klassisch auf Zustandsfunktionen wie die Hamilton-Funktion – quantenmechanisch auf den Hamilton-Operator und auf die den beobachtbaren Größen Ort, Impuls u.s.w. entsprechenden Operatoren. Dagegen können die Bahnen eine *geringere* Symmetrie als die Hamilton-Funktion besitzen, wie man an den Kepler-Bahnen sieht.

Auch die Wellenfunktionen können eine geringere Symmetrie als der Hamiltonian besitzen, für sie gilt das gegenüber dem von Neumannschen Theorem schwächere

Wignersche Theorem: *Wenn der Hamiltonian \hat{H} invariant gegenüber der Symmetrieeoperation \hat{R} ist (mit \hat{R} kommutiert): $\hat{R}\hat{H}\hat{R}^{-1} = \hat{H}$, dann ist mit $\psi_E(x)$ auch $\hat{R}\psi_E(x)$ eine Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung mit dem Energiewert E .*³⁴

³² Emmy Noether (1882-1935), *Invariante Variationsprobleme*, 1918. – Siehe Naas & Schmid, *Mathematisches Wörterbuch*, 1974, für die ursprüngliche Formulierung; Schmutzer, *Symmetrien und Erhaltungssätze der Physik*, 1972, für eine allgemeine und mehr formale Darstellung dieser Fragen; Greiner & Reinhardt, *Feldquantisierung*, 1993, S.46ff., für ausführliche Rechnungen und Beispiele.

³³ John von Neumann (1903-1957), *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, 1932. – Siehe auch Cracknell, 1971, § 2.10.

³⁴ Eugene Paul Wigner (1902-1995, Nobelpreis 1963), *Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren*, 1931; vgl. auch Cracknell, 1971, § 2.10.

Die geringere Symmetrie der Wellenfunktion kann allerdings zu höchst bemerkenswerten Effekten führen, wie wir weiter unten an verschiedenen Beispielen sehen werden. Die im nachfolgenden Paragraphen behandelte Symmetrie des *Betrages* der Wellenfunktion schränkt diese „Asymmetrie“ ein und erlaubt dadurch systematische Ableitungen jener Effekte.

Wie in der Klassischen Physik muss man also sorgfältig zwischen der Symmetrie der Gesetze (Grundgleichungen) und der Symmetrie einer gegebenen Situation unterscheiden.³⁵

Wir schließen diese allgemeineren Betrachtungen mit der

Hypothese: *Die Gesamtheit der bei einem gegebenen Energiewert möglichen Konfigurationen besitzt die Symmetrie der Hamilton-Funktion.*

Der quantenmechanische Sinn dieser Aussage geht aus der nachfolgenden Aufgabe hervor.

Aufgabe:* Für die Wellenfunktionen $\psi_{nlm}(\mathbf{x})$ des Wasserstoffatoms ist der Ausdruck $\sum_{lm} |\psi_{nlm}(\mathbf{x})|^2$, die Summe aller Begrenzungsfunktionen zu einem gegebenen Energiewert E_n , *kugelsymmetrisch*. Gilt das gleiche für den dreidimensionalen harmonischen Oszillator? Lassen sich diese Ergebnisse verallgemeinern und, wenn ja, wie? Hinweis: Benutzen Sie die parallele Aussage über die Gesamtheit der im Zustand E möglichen klassischen Bahnen und die in ihr implizit vollzogene „Summation“ über den Drehimpuls!

Aufgabe:* Mit Bezug auf das Noethersche Theorem wird die Energieerhaltung oft mit der Homogenität der Zeit begründet. Lässt sich diese Argumentationsreihenfolge umkehren, d.h., die Homogenität der Zeit als Konsequenz der Energieerhaltung auffassen?

4.5.2 Symmetrie des Hamilton-Operators – Symmetrie der Begrenzungsfunktionen – Symmetrie des Betrages der Wellenfunktionen

Wir analysieren nun die in den Definitionen (4.21) f. der stationären Begrenzungsfunktionen enthaltenen Ungleichungen

$$F_E(x/x_0)V(x) \leq E; \quad G_E(p/p_0)T(p) \leq E \quad (4.121)$$

hinsichtlich Symmetrieeigenschaften und Abhängigkeiten von Parametern. Die rechten Seiten hängen nur von E ab, während die linken Seiten noch von x/x_0 bzw. p/p_0 abhängen, wobei $p_0 = \hbar/x_0$ ist. Die Abhängigkeiten von x bzw. p werden durch die Schrödinger-Gleichung in der Orts- bzw. Impulsdarstellung so gestaltet, dass diese Ungleichungen für *alle* in Frage kommenden

³⁵ Nach Zee (*Fearful Symmetry*, 1999, S.14) verdanken wir diese Einsicht Newton und hätte ohne sie die Physik nicht ihre heutige Gestalt angenommen.

x - bzw. p -Werte erfüllt sind. Dank dessen hängen ihre linken Seiten letztlich nur von E und x_0 ab, so dass wir für sie symbolisch

$$C(E, x_0) \leq E \quad (4.122)$$

schreiben können.

Aus dieser Darstellung folgt sofort das

Theorem: *Die stationären Begrenzungsfunktionen $F_E(x/x_0)$ und $G_E(p/p_0)$ hängen nur von denjenigen Kombinationen von Systemparametern ab, von denen die Bezugsgröße x_0 und die Gesamtenergie E abhängen.*

Andernfalls müsste, um die Ungleichung (4.122) einzuhalten, die Funktion $C(E, x_0)$ für jeden dieser Parameter ein Maximum bei dessen Wert Null besitzen.

Zur Übertragung dieses Satzes auf den zeitabhängigen Fall benutzen wir das Prinzip PQ5 der Zustandsänderung aus dem § 4.4.3. Aus ihm folgt das

Theorem: *Die Funktionen $|\psi(x, t)|$ und $|\phi(p, t)|$ hängen nur von denjenigen Kombinationen von Systemparametern ab, von denen die Bezugsgröße x_0 und, in den stationären Zuständen, die Gesamtenergie E des Systems abhängen.*

Die Konsequenzen dieses Theorems werden wir im nächsten Paragraphen betrachten.

4.5.3 Symmetrie des Betrages der Wellenfunktionen – Symmetrie der Wellenfunktionen selbst – Geometrische Phasen

Wenn die Beträge $|\psi(x, t)|$ und $|\phi(p, t)|$ von einer Größe w unabhängig sind, dann hängen die Wellenfunktionen selbst höchstens über einen Phasenfaktor von dieser Größe ab:

$$\psi(x, t; w) = \psi(x, t)e^{i\varphi(w)}; \quad \phi(p, t; w) = \phi(p, t)e^{i\varphi(w)} \quad (4.123)$$

Ein Beispiel hierfür ist die Separation (4.83) der Zeitabhängigkeit in den stationären Zuständen; die Symmetrie des Systems besteht hier natürlich in der Zeitunabhängigkeit des Hamiltonians. Ein anderes Beispiel werden wir im nachfolgenden Abschnitt kennen lernen: Die räumliche Symmetrie eines Kristallgitters führt zu einer bestimmten Symmetrie der elektronischen Wellenfunktionen im Kristall, mit weit reichenden Folgen für die Eigenschaften eines Kristalls. Von grundlegender Wichtigkeit für die gesamte Quantentheorie ist das Verhalten der Wellenfunktion bei der Vertauschung gleicher Teilchen. Die Formeln (4.123) bedeuten hier, dass diese Vertauschung höchstens die Phase der Wellenfunktionen ändert. Wir werden so zu tief liegenden Ergebnissen

kommen, deren Ableitung ohne diese Formeln deutlich umständlicher ist, siehe § 5.1.3.

Im Gegensatz zur Phase $-Et/\hbar$, die mit der Dynamik des Systems verbunden ist und deshalb auch dynamische Phase genannt wird, besitzt (wie im nächsten Paragraphen deutlicher werden wird) die Phase $\varphi(w)$ eine geometrische Interpretation und wird deshalb geometrische Phase genannt. Obwohl ihre allgemeine Bedeutung noch gar nicht so lange bekannt ist (Berry, 1984), hat sie – auch unter der Bezeichnung adiabatische Phase – in kurzer Zeit zahlreiche Anwendungen in der Klassischen und vor allem in der Quantenphysik gefunden (Shapere & Wilczek, 1989; Bohm, Mostafazadeh, Koizumi, Niu & Zwanziger, 2003). Ihre Theorie ist damit auch ein Beitrag zur Einheit der Physik.

Hier wollen wir noch auf die Konsequenzen der Separation (4.123) für die Schrödinger-Gleichung für den Fall eingehen, dass die Größe w vom Ort und von der Zeit abhängt. Dies wird uns zu dem eminent wichtigen Begriff der Eichinvarianz führen.

4.5.4 Eichsymmetrie *

Die Begriffe Eichinvarianz und Eichsymmetrie, das heißt die Invarianz gegenüber einer Eichtransformation, spielen seit Weyls³⁶ frühen Ansätzen zu einer einheitlichen Feldtheorie eine überragende Rolle in der modernen Quantentheorie (Kugo, 1997). Der Grund hierfür liegt darin, dass die Eichinvarianz der Lagrange-Funktion nach dem Noetherschen Theorem (siehe § 4.5.1) mit der Erhaltung einer Größe verknüpft ist, die in Analogie zum elektromagnetischen Feld als „Ladung“ interpretiert wird. Wir können an dieser Stelle nur zeigen, wie die Invarianz der Begrenzungsfunktionen auf ganz natürliche Weise zur Eichinvarianz der Schrödinger-Gleichung führt.

Wir betrachten zunächst den stationären Fall und schreiben gemäß Formel (4.123)

$$\psi_E(\mathbf{x}; \varphi) = \psi_E(\mathbf{x}; 0) e^{i\varphi(\mathbf{x})} \quad (4.124)$$

Setzen wir dies in die stationäre Schrödinger-Gleichung (4.50) ein:

$$[T(\hat{\mathbf{p}}) + V(\mathbf{x})] \psi_E(\mathbf{x}; \varphi) = E \psi_E(\mathbf{x}; \varphi) \quad (4.125)$$

so erhalten wir für den von $\varphi(\mathbf{x})$ unabhängigen Faktor $\psi_E(\mathbf{x}; 0)$ die Schrödinger-Gleichung

$$[T(\hat{\mathbf{p}} + \hbar \nabla \varphi(\mathbf{x})) + V(\mathbf{x})] \psi_E(\mathbf{x}; 0) = E \psi_E(\mathbf{x}; 0) \quad (4.126)$$

³⁶ Hermann Weyl (1885-1955), *Gravitation und Elektrizität*, 1918; *Raum – Zeit – Materie*, 1918. – Das „Prinzip der Eichinvarianz“ hat er in *Gruppentheorie und Quantenmechanik* (1928, § 12) auf die Wechselwirkung zwischen elektromagnetischem und Schrödinger-Feld eingeschränkt.

Die Bezeichnungen sind in dieser Form allerdings etwas verwirrend, deshalb vertauschen wir $\psi_E(\mathbf{x}; \varphi)$ und $\psi_E(\mathbf{x}; 0)$ in den letzten beiden Gleichungen. Damit sind wir bei dem

Satz: Die Lösung $\psi_E(\mathbf{x}; \varphi)$ der stationären Schrödinger-Gleichung

$$[T(\hat{\mathbf{p}} + \hbar \nabla \varphi(\mathbf{x})) + V(\mathbf{x})] \psi_E(\mathbf{x}; \varphi) = E \psi_E(\mathbf{x}; \varphi) \quad (4.127)$$

lässt sich in der Form

$$\psi_E(\mathbf{x}; \varphi) = \psi_E(\mathbf{x}; 0) e^{-i\varphi(\mathbf{x})} \quad (4.128)$$

schreiben, wobei $\psi_E(\mathbf{x}; 0)$ die Lösung für den „feldfreien“ Fall $\varphi(\mathbf{x}) \equiv 0$ ist:

$$[T(\hat{\mathbf{p}}) + V(\mathbf{x})] \psi_E(\mathbf{x}; 0) = E \psi_E(\mathbf{x}; 0) \quad (4.129)$$

Dieser Satz impliziert bestimmte Einschränkungen für die Modellierung gewisser Felder:

Theorem: Ein zeitunabhängiges Feld $w(\mathbf{x})$, das nicht mit der Gesamtenergie E und nicht mit der charakteristischen Länge x_0 zusammen hängt, geht in den Hamiltonian als additiver Gradienten-Term zum kinetischen Impuls ein: $T(\hat{\mathbf{p}}) \rightarrow T(\hat{\mathbf{p}} + \hbar \nabla \varphi)$, wobei $\varphi(\mathbf{x})$ eine dimensionslose Funktion von $w(\mathbf{x})$ ist.

Es liegt nun nahe und ist für eine Interpretation der entsprechenden klassischen Bewegungsgleichungen erforderlich, den Ausdruck (4.124) auf ein zeitabhängiges Feld auszudehnen. Durch elementare Rechnung ergibt sich der

Satz: Die Lösung $\psi(\mathbf{x}, t; \varphi)$ der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t; \varphi) = \left[T(\hat{\mathbf{p}} + \hbar \nabla \varphi(\mathbf{x}, t)) + V(\mathbf{x}) + \hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\mathbf{x}, t) \right] \psi(\mathbf{x}, t; \varphi) \quad (4.130)$$

lässt sich in der Form

$$\psi(\mathbf{x}, t; \varphi) = \psi(\mathbf{x}, t; 0) e^{-i\varphi(\mathbf{x}, t)} \quad (4.131)$$

schreiben, wobei $\psi(\mathbf{x}, t; 0)$ die Lösung für den „feldfreien“ Fall $\varphi(\mathbf{x}, t) \equiv 0$ ist:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t; 0) = [T(\hat{\mathbf{p}}) + V(\mathbf{x})] \psi(\mathbf{x}, t; 0) \quad (4.132)$$

In diesem Satz drückt sich die Eichinvarianz der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung aus: Sie ist invariant gegenüber einer „Umeichung“ der (Phase der) Wellenfunktion: $|\psi| e^{i\alpha} \rightarrow |\psi| e^{i\alpha - i\varphi}$, wenn gleichzeitig der kartesische Impuls:

$m\mathbf{v} = \mathbf{p}_{\text{kart}} = \mathbf{p}_{\text{kan}} \rightarrow \mathbf{p}_{\text{kan}} + \hbar \nabla \varphi$, und das skalare Potenzial: $V \rightarrow V + \hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi$, auf die durch Gleichung (4.130) beschriebene Weise „umgeeicht“ werden.

Im Rahmen der genuinen Klassischen Mechanik (Wechselwirkung nur durch Stöße) gibt es keinen Anlass, diese Symmetrie zu untersuchen. Zwar sind die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen invariant gegenüber der Verschiebung („Umeichung“) von Impuls und Potenzial um jeweils irgend eine konstante Größe, doch ist diese „globale Eichsymmetrie“ nurmehr eine mathematische Verschiebung von Integrationskonstanten. Denn physikalisch sind diese Konstanten durch den Zustand der Ruhe (siehe § 3.2.2) bzw. durch den Arbeitsvorrat (siehe § 3.3.3) festgelegt.

Die dem Hamiltonian in Gleichung (4.130) entsprechende Hamilton-Funktion lautet

$$H(\mathbf{p}_{\text{kan}}, \mathbf{x}, t) = \frac{1}{2m} [\mathbf{p}_{\text{kan}} + \hbar \nabla \varphi(\mathbf{x}, t)]^2 + V(\mathbf{x}) + \hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\mathbf{x}, t) \quad (4.133)$$

Hierin sind $\hbar \nabla \varphi(\mathbf{x}, t)$ und $\hbar \dot{\varphi}(\mathbf{x}, t)$ lokale Umeichungen des kartesischen Impulses bzw. der potenziellen Energie. Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen lauten (vgl. § 3.1.2)

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_{\text{kan}}} H(\mathbf{p}_{\text{kan}}, \mathbf{x}, t) = \frac{1}{m} [\mathbf{p}_{\text{kan}}(t) + \hbar \nabla \varphi(\mathbf{x}(t), t)] = \mathbf{v}(t) \quad (4.134)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_{\text{kan}}}{dt} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} H(\mathbf{p}_{\text{kan}}, \mathbf{x}, t) = \frac{d[m\mathbf{v}(t) - \hbar \nabla \varphi(\mathbf{x}(t), t)]}{dt} \quad (4.135)$$

$$= -[\mathbf{v}(t) \hbar \nabla] \nabla \varphi(\mathbf{x}(t), t) - \nabla V(\mathbf{x}(t)) - \nabla \hbar \dot{\varphi}(\mathbf{x}(t), t) \quad (4.136)$$

Nun ist $\frac{d}{dt} \nabla \varphi(\mathbf{x}(t), t) = [\mathbf{v}(t) \cdot \nabla] \nabla \varphi(\mathbf{x}(t), t) + \frac{\partial}{\partial t} \nabla \varphi(\mathbf{x}(t), t)$, so dass sich die zweite Gleichung (4.134) auf die Bewegungsgleichung $\frac{d}{dt} m\mathbf{v}(t) = -\nabla V(\mathbf{x}(t))$ für den kartesischen Impuls reduziert. Hierin drückt sich die lokale Eichsymmetrie der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen aus.

Wir müssen nun noch klären, wie sich diese Ergebnisse mit der Forderung vertragen, dass zeitunabhängige externe Felder (Potenziale) in das betrachtete System zu integrieren seien (siehe § 3.4.2). Da die potenzielle Energie unausweichlich mit der Gesamtenergie verknüpft sind, kehren wir zur Zustandsänderungsgleichung (3.36) zurück, um Felder einzuführen, die *keinen* Einfluss auf die Gesamtenergie ausüben.

Offensichtlich gehen in die Zustandsänderungsgleichung (3.36) keine Kräfte ein, die senkrecht zu $d\mathbf{s} = \mathbf{v} dt$ wirken. Der allgemeinste Ausdruck für derartige Kräfte lautet $\mathbf{v}(t) \times \tilde{\mathbf{F}}_{\perp}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}, \mathbf{a}, \dots)$ ($\mathbf{a} \equiv d^2\mathbf{x}/dt^2$)³⁷. Das bekannteste Beispiel hierfür ist die Kraft, die ein Magnetfeld der Stärke \mathbf{B} auf eine elektrische Ladung q ausübt: $q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ (Lorentz, 1895). Die entsprechende Hamilton-Funktion lautet (Fick, 1988, 1.2 § 5b)

$$H(\mathbf{p}_{\text{kan}}, \mathbf{x}, t) = \frac{1}{2m} [\mathbf{p}_{\text{kan}}(t) - q\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)]^2 \quad (4.137)$$

³⁷ Private Mitteilung von Lipschitz an v. Helmholtz, s. *Über die Erhaltung der Kraft*, Zusatz 3 (1881).

Hierin sind $\mathbf{p}_{\text{kan}} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A}$ der kanonische Impuls und \mathbf{A} das Vektorpotenzial: $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Nach dem Fundamentalsatz der Vektorrechnung lässt sich der Vektor \mathbf{A} wie jeder Vektor als Summe eines Gradienten- und eines Wirbelfeldes darstellen. Der Gradientenanteil trägt wegen $\nabla \times \nabla = \mathbf{0}$ nichts zum Magnetfeld bei. Es ist deshalb nur konsequent, dass sich der Gradienten-, nicht aber der Wirbelanteil aus dem Hamiltonian in die Phase der Wellenfunktion transformieren lässt. Diese Phase lässt sich experimentell messen (Aharonov-Bohm-Effekt, siehe § 8.8.3).

Aufgabe: Diskutieren sie die Aussage, dass die Symmetrie der Erscheinungen im allgemeinen geringer ist als die der Grundgesetze, aus der sie hervorgehen, anhand der Kepler-Bahnen! Hinweis: Zee, *Fearful Symmetry*, 1999, S.12.

Aufgabe:* Ein Magnetfeld \mathbf{B} überträgt keine Energie auf ein punktförmige Ladung q . Demzufolge überträgt ein Körper mit der Ladung q auch keine Energie auf das Magnetfeld \mathbf{B} . Ist das eine Erklärung für die Gleichung $\nabla \mathbf{B} = \mathbf{0}$?

Aufgabe:* Ist in dem Ausdruck $d\mathbf{s} = \mathbf{v}dt$ mit \mathbf{v} die Eulersche Zustandsgröße Geschwindigkeit gemeint oder nur die zeitliche Veränderung des Bahnparameters \mathbf{s} ?

4.6 Beispiel: Bloch-Elektronen

Um den soeben abgeleiteten Formalismus der Wellenmechanik zu veranschaulichen, betrachten wir als erste Anwendung die elementare Beschreibung von Elektronen in Kristallen. Wir werden darauf in späteren Kapiteln aufbauen. Dank der Symmetrie der Kristallgitter ist die Theorie der Kristalle in vielem entschieden einfacher als die Theorie der ungeordneten (mithin weniger symmetrischen) Festkörper oder gar die der Flüssigkeiten und Gase. Unser Konzept der Begrenzungsfunktionen wird uns das Blochsche Theorem quasi aus dem Handgelenk schütteln.

4.6.1 Symmetrie des Kristallgitters – Symmetrie der Wellenfunktion

Die hervorragendste Eigenschaft der Kristalle ist die Symmetrie des Kristallgitters.³⁸ Bemerkenswerterweise gibt es nur endlich viele verschiedene,

³⁸ Eine Symmetrie-betonte Darstellung der Festkörpertheorie gibt Altmann, *Band Theory of Solids: An Introduction from the Point of View of Symmetry*, 1994. Cracknell, *Angewandte Gruppentheorie*, 1971, enthält neben einer ausführlichen Einführung Originalarbeiten zur Symmetrie der elektronischen und der Schwingungsspektren von Molekülen und Kristallen. Wichtige Originalarbeiten wurden auch in Knox & Gold, *Symmetry in the Solid State*, 1964, nachgedruckt.

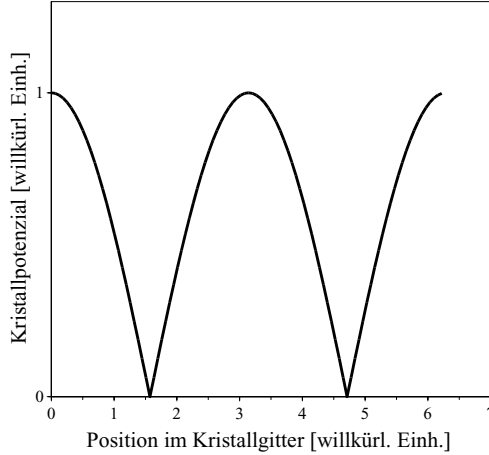


Abb. 4.1. Eindimensionales periodisches Kristallpotenzial $V(x) = V(x + \pi)$; die Minima befinden sich an den mit Atomen besetzten Gitterplätzen (schematisch)

nämlich die 14 Bravais-Gitter³⁹. Das heißt, es treten nur endlich viele diskrete Symmetrien auf.

Für die Elektronen im Kristall führt die Änderung der Raumsymmetrie infolge der gitterperiodischen Anordnung der Atome zu einer drastischen Modifikation des Impulses und der Energie der Elektronen als Funktion desselben. Insbesondere tritt an die Stelle des klassischen Impulses der sogenannte Quasi-Impuls als Erhaltungsgröße. Die Eigenschaften der Elektronen nehmen die Periodizität des Gitters an.

Das Bloch-Elektron⁴⁰ ist eine elektronische Einteilchen-Elementaranregung⁴¹ im periodischen Kristallpotenzial des als starr angenommenen Gitters (siehe Abb. 4.1),

$$V_G(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V(\mathbf{r} + \mathbf{G}); \quad \{\mathbf{G}\} - \text{Gesamtheit der Gittervektoren} \quad (4.138)$$

Seine stationären Eigenschaften werden durch die Lösungen der Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}_G(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_G(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \cdot \psi(\mathbf{r}) \quad (4.139)$$

beschrieben.

³⁹ Auguste Bravais (1811-1863), *Abhandlung über die Systeme von regelmässig auf einer Ebene oder im Raum vertheilten Punkten*, 1848.

⁴⁰ Felix Bloch (1905-1983, Nobelpreis 1952), *Über die Quantenmechanik der Elektronen im Kristallgitter*, 1928; *Bemerkungen über die Elektronentheorie des Ferromagnetismus und der elektrischen Leitfähigkeit*, 1929.

⁴¹ Wir werden auf dieses Konzept im § 6.3.2 näher eingehen.

Nun besitzen die Begrenzungsfunktionen die Gittersymmetrie des Hamiltonians:

$$F_E(\mathbf{r} + \mathbf{G}) = |\psi_E(\mathbf{r} + \mathbf{G})|^2 = F_E(\mathbf{r}) = |\psi_E(\mathbf{r})|^2 \quad (4.140)$$

In Übereinstimmung mit dem Wignerschen Theorem (siehe § 4.5.1) gilt also: Wenn die Funktion $\psi_E(\mathbf{r})$ eine Lösung der Gleichung (4.139) ist, dann ist auch die Funktion $\psi_E(\mathbf{r} + \mathbf{G})$ eine Lösung, und beide unterscheiden sich höchstens durch einen \mathbf{r} -unabhängigen Phasenfaktor voneinander:

$$\psi_E(\mathbf{r} + \mathbf{G}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{G}} \psi_E(\mathbf{r}) \quad (4.141)$$

Hieraus folgt schließlich das

Blochsche Theorem Die zeitunabhängige Ein-Elektronen-Wellenfunktion lässt sich in der Form

$$\psi_E(\mathbf{r}) = \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}; \quad u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{G}) \quad (4.142)$$

nebst

$$E = E_{n,\mathbf{k}} = E_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}}; \quad \mathbf{K} - \text{reziproker Gittervektor: } e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{G}} = 1 \quad (4.143)$$

schreiben (Bloch, 1928).⁴²

Das heißt, die Energie unterteilt sich in sogenannte Bänder und hängt innerhalb eines Bandes vom Quasi-Impuls \mathbf{k} ab. Wenn nicht anders angegeben, soll der Bandindex n auch den Spin-Index σ enthalten. Ohne äußeres Magnetfeld ist das aus allen Vektoren \mathbf{K} gebildete reziproke Gitter selbst dann inversionssymmetrisch: $E_{n,\mathbf{k}} = E_{n,-\mathbf{k}}$, wenn das direkte Gitter $\{\mathbf{G}\}$ kein Inversionszentrum besitzt (Kramers-Theorem⁴³).

Die Bewegung in einem periodischen Potenzial ist widerstandsfrei, denn die an den Atomrümpfen entstehenden Streuwellen überlagern sich kohärent, so dass immer wieder die Bloch-Wellenfunktion (4.142) entsteht. Infolgedessen bewegen sich die Bloch-Elektronen allerdings so, als wäre ihre träge Masse nicht gleich der (skalaren) Masse des freien Elektrons, sondern eine zustandsabhängige tensorielle Größe im \mathbf{k} -Raum, nämlich der sogenannte Effektivmassen-Tensor $\hat{m}_{n\mathbf{k}}$. Dieser wird über sein Inverses definiert:

$$\hat{m}_{n\mathbf{k}}^{-1} = \hbar^{-2} \nabla_{\mathbf{k}} \circ \nabla_{\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}}; \quad \hat{m}_{n,\mathbf{k}} = \hat{m}_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}} \quad (4.144)$$

⁴² Das Blochsche Theorem ist eine dreidimensionale Fassung des Floquetschen Theorems aus § 3.1.4. – *Merke:* Es gibt auch andere Formen!

⁴³ Hendrik Antoon Kramers (1894-1952), Proc. Acad. Sci. Amsterdam 33 (1930) 959ff. – Genau genommen, sind die Zustände $|n \uparrow \mathbf{k}\rangle$ und $|n \downarrow -\mathbf{k}\rangle$ entartet (\uparrow, \downarrow – einander entgegengesetzte Spinrichtungen). Siehe auch Wigner, *Über die Operation der Zeitumkehr*, 1932.

Seine Komponenten sind ebenfalls periodisch (natürlich bezüglich des reziproken Gitters), und ohne äußeres Magnetfeld gilt wegen $E_{n,\mathbf{k}} = E_{n,-\mathbf{k}}$ auch $\hat{m}_{n,\mathbf{k}} = \hat{m}_{n,-\mathbf{k}}$.

Die mittlere Geschwindigkeit eines Bloch-Elektrons im Zustand $E_{n\mathbf{k}}$ ist gleich der Gruppengeschwindigkeit des entsprechenden Wellenpaketes; und auch diese beiden sind konsequenterweise gitterperiodisch⁴⁴:

$$\mathbf{v}_{n\mathbf{k}} = \langle \psi_{n\mathbf{k}} | \frac{1}{m} \hat{\mathbf{p}} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}} \equiv \frac{\partial \omega_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}}; \quad \mathbf{v}_{n,\mathbf{k}} = \mathbf{v}_{n,\mathbf{k}+\mathbf{K}} \quad (4.145)$$

Ohne äußeres Magnetfeld gilt wegen $E_{n,\mathbf{k}} = E_{n,-\mathbf{k}}$ auch $\mathbf{v}_{n,\mathbf{k}} = \mathbf{v}_{n,-\mathbf{k}}$.

Die Beziehung (4.145) ist ein nützlicher Test für Bandstrukturmodelle, insbesondere für die Konsistenz ihrer Definition des Impuls- bzw. Geschwindigkeitsoperators. Bei äußeren Feldern kommen weitere Glieder hinzu.

*Aufgabe**: Zeigen Sie, dass die mittlere Elektronendichte gitterperiodisch ist und dass wegen der Ladungsneutralität des Gesamtkristalls die mittlere Gesamt(!)-Stromdichte verschwindet!

4.6.2 Lokalisierte Wellenfunktionen. Näherung der festen Bindung

Oft ist es vorteilhaft, Wellenfunktionen zu verwenden, die nicht über den gesamten Kristall, sondern im wesentlichen nur über einige Gitterzellen ausgedehnt sind. Der einfachste Weg zu derartigen Funktionen besteht in der diskreten Fourier-Transformation der Bloch-Funktionen (4.142):

$$\omega_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) =_{\text{def}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}}^{\text{1.BZ}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (4.146)$$

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}}^{\text{Kristall}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \omega_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \quad (4.147)$$

(*BZ* – Brillouin-Zone⁴⁵; *N* – Anzahl der Gitterplätze \mathbf{R} , diese unterscheiden sich von den Gittervektoren \mathbf{G} um die Lage der Atomrümpfe innerhalb einer Elementarzelle). Dies sind die Wannier-Funktionen⁴⁶. Sie sind üblicherweise um die Gitterplätze \mathbf{R} lokalisiert, und man kann sie sich als durch das sogenannte Kristallfeld (Bethe, 1929⁴⁷) modifizierte, orthonormierte Atomorbitale

⁴⁴ Jones & March, *Theoretical Solid State Physics, Vol.1*, 1973, App. A1.5; hier findet sich auch die Verallgemeinerung auf ein nichtlokales Potenzial.

⁴⁵ Léon Brillouin (1889-1969), *Quantenstatistik*, 1931. – Siehe auch Bouckaert, Smoluchowski & Wigner, *Theorie der Brillouin-Zonen und die Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktionen in Kristallen*, 1937; Jones, *The Theory of Brillouin Zones and Electronic States in Crystals*, 1960.

⁴⁶ Gregory H. Wannier (1911-1983), *Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals*, 1937.

⁴⁷ Hans Albrecht Bethe (1906-2005, Nobelpreis 1967), *Termaufspaltung in Kristallen*, 1929.

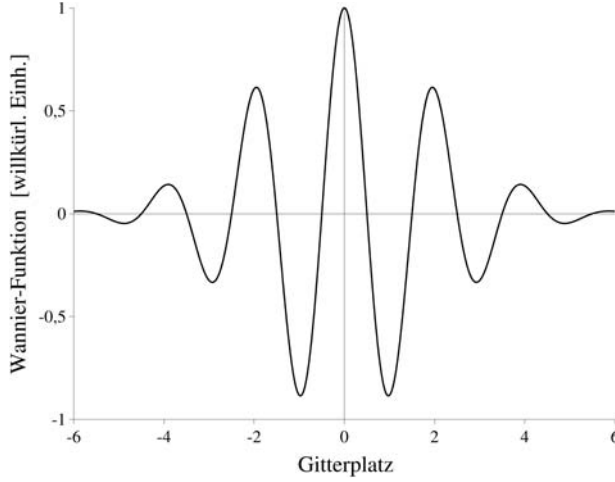


Abb. 4.2. Lokalisierung der Wannier-Funktionen (schematisch); die Oszillationen entstehen durch die Orthogonalisierung und sind je nach Material bis zu den fünft(!) nächsten Nachbarn signifikant

vorstellen.⁴⁸ Infolge der Orthogonalisierung der atomaren Wellenfunktionen zu denen der Nachbaratome ist diese Lokalisierung jedoch deutlich schwächer als die der Atomorbitale der Einzelatome, vergleiche Abb. 4.2.

Die Bloch- und die Wannier-Darstellung sind komplementär zueinander und widerspiegeln einander ergänzende Aspekte der Kristallphysik (Joffe, 1957⁴⁹; Ewarestow, 1982, S.85). Im direkten Gitter sind dies die Fernordnung und die lokale Umgebung der Gitterbausteine. Im reziproken Gitter liefern entsprechende Näherungsmethoden brauchbare Beschreibungen in der Umgebung ausgewählter Punkte des \mathbf{k} -Raumes bzw. für den gesamten \mathbf{k} -Raum.

Da die Wannier-Funktionen nicht gitterperiodisch sind, sind sie keine Eigenfunktionen des gitterperiodischen Hamiltonians; vielmehr lautet dessen Wannier-Darstellung

$$\begin{aligned} & \langle \omega_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) | \hat{H}_G(\mathbf{r}) | \omega_{n'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}') \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{1.BZ} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} - \mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}')} \langle \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) | \hat{H}_G(\mathbf{r}) | \psi_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}') \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}}^{1.BZ} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')} \delta_{nn'} E_{n\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (4.148)$$

⁴⁸ Hierauf beruht die Anwendung der LCAO-Methode (LCAO = Linear Combination of Atomic Orbitals) der Quantenchemie (Pauling, *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals*, 1960) auf Kristalle, siehe z. B. Slater & Koster, *Simplified LCAO Method for the Periodic Potenzial Problem*, 1954; Lewin, *Einführung in die Quantenchemie des Festkörpers* 1974; Ewarestow, *Quantenchemische Methoden in der Festkörpertheorie*, 1982.

⁴⁹ Abram Fjodorowitsch Joffe (Ioffe, Joffé; 1880-1960), *Physik der Halbleiter*, 1957.

Doch zeigt sich die Kristallsymmetrie darin, dass die sogenannten Hopping-Integrale

$$\langle \omega_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) | \hat{H}_G(\mathbf{r}) | \omega_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}') \rangle \equiv T_n(\mathbf{R} - \mathbf{R}'); \quad \mathbf{R} \neq \mathbf{R}' \quad (4.149)$$

nur von den Abstandsvektoren $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$ abhängen und gewisse lokale Symmetriebeziehungen erfüllen (Slater & Koster, 1954).

In der *Näherung starker Bindung* (tight-binding approximation – TBA) wird die Ausdehnung der Wannier-Funktionen als auf einige wenige Nachbarn im Gitter beschränkt gedacht.⁵⁰ Hierbei hat die Empirische Tight-Binding-Methode (ETBA)⁵¹ gezeigt, dass in vielen Fällen in guter Näherung

1. die lokalen Energien [das sind die Diagonal-Matrixelemente des Hamiltonians in Gleichung (4.139)],

$$E_n = \langle \tilde{\omega}_n(\mathbf{r}) | \hat{H}_G(\mathbf{r}) | \tilde{\omega}_n(\mathbf{r}) \rangle \quad (4.150)$$

$[\tilde{\omega}_n(\mathbf{r}) - \text{atomähnliches Orbital}]$ gleich den atomaren Eigenenergien sind und

2. die Nichtdiagonal-Matrixelemente (4.149) für nächste Nachbarn (NN) auf höchst einfache Weise von deren Abstand $d = |\mathbf{R} - \mathbf{R}'|$ abhängen:

$$T_{nn'} \equiv \langle \tilde{\omega}_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) | \hat{H}_G(\mathbf{r}) | \tilde{\omega}_{n'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}') \rangle \approx \eta_{nn'} \hbar^2 / md^2 \quad (4.151)$$

$(\eta_{nn'} - \text{„universeller Parameter“ für die betrachtete Valenzbindung; } nn' \text{ symbolisiert hier den Bindungstyp: } ss\sigma, pp\sigma, pp\pi \text{ u.s.w.})$.

Diese Formeln sind besonders für halbquantitative Berechnungen geeignet, z. B. für die Abschätzung von Deformationspotenzialen (siehe § 8.7.3) sowie für das Auffinden und die Voraussage chemischer Trends.⁵²

Als Komplement hierzu kann man die Effektivmassen($\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$)-Methode als Hückel-Methode⁵³ an der Bandkante betrachten, denn die Bloch-Funktionen entsprechen den Molekül-Orbitalen.

⁵⁰ Sommerfeld & Bethe, *Elektronentheorie der Metalle*, 1933; Madelung, *Introduction to Solid-State Theory*, 1996, Kap. 8; Fröhlich, *Localized versus Band Model of Electrons in Solids*, 1968; P. W. Anderson, *Localized Orbitals for Molecular Quantum Theory: The Hückel Theory*, 1969; Ehrenreich, Seitz & Turnbull (Hrsg.), *Solid State Physics*, Bd. 35 (1980).

⁵¹ In ihr werden die Matrixelemente des Hamiltonians nicht berechnet, sondern durch Anpassung der theoretischen Bandstruktur an experimentelle Ergebnisse gewonnen (Harrison, 1980).

⁵² Siehe z. B. Harrison, *Electronic structure and the properties of solids*, 1980; Enders, *Universal Tight-Binding Parameters for Cubic IV-VI Compounds*, 1983; Ders., *Electronic Structure of Group-V Semimetals: Tight-Binding Parameter Estimation from Chemical Trends*, 1984.

⁵³ Ernst Hückel (1896-1980), *Grundzüge der Theorie ungesättigter und aromatischer Verbindungen*, 1938.

Für ein eindimensionales Gitter mit ausschließlich Nächster-Nachbar-Wechselwirkung über s -artige Niveaus ergibt sich die elektronische Bandstruktur zu⁵⁴

$$E_k = E_s + 2T_{ss\sigma} \cos\left(2\pi \frac{k}{K}\right) \quad (4.152)$$

Bereits diese allerelementarsten Ausführungen verdeutlichen, dass die elektronischen Eigenschaften von Festkörpern wesentlich von Quanteneffekten bestimmt sind.

⁵⁴ Bloch, *Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern*, 1928; Bethe, *Zur Theorie der Metalle I: Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette*, 1931.

5. Vom Ein-Teilchen- zum Viel-Teilchen-System

Die meisten quantenmechanischen Systeme bestehen nicht aus einem, sondern aus mehreren (Elektronenhülle der Atome) oder sogar sehr vielen Teilchen (Festkörper). Während bei klassischen Systemen die hierbei zutage tretenden qualitativ neuen Erscheinungen primär mathematischen Ursprungs zu sein scheinen (wie die Nichtintegrität der Newtonschen Bewegungsgleichungen im berühmten Dreikörperproblem oder das sogenannte chaotische Verhalten gewisser nichtlinearer Systeme), treten bei Quantensystemen physikalisch *neue* Eigenschaften zutage, *ohne* dass die mathematischen Mittel und Methoden betroffen sind. Als Vorzug unserer nichtklassischen Darstellung der Energie und der Berücksichtigung des Newton-Eulerschen Zustandsbegriffes brauchen wir diese neuen Eigenschaften nicht per Postulat in die Theorie einzuführen, sie werden uns größtenteils fast von selbst in den Schoß fallen.

5.1 Systeme aus zwei Teilsystemen

Fast alle uns interessierenden Viel-Teilchen-Effekte lassen sich bereits an einem System aus zwei Teilchen untersuchen, wir beginnen deshalb mit diesem.

5.1.1 Der allgemeine Fall

Wir verallgemeinern jetzt unseren Zugang zur Quantenmechanik auf den Fall, dass sich zwei Körper in einem gemeinsamen Potenzial bewegen oder zwei Systeme ein Gesamtsystem bilden. Dabei sehen wir zunächst von der Möglichkeit ab, dass die beiden Körper beziehungsweise Systeme einander gleich sind.

Dazu beginnen wir wieder mit den stationären Zuständen. Wenn die beiden Teilsysteme nicht mit einander wechselwirken, ist die Hamilton-Funktion des Gesamtsystems einfach die Summe der Hamilton-Funktionen der beiden Teilsysteme. Für zwei harmonische Oszillatoren, zum Beispiel, heißt das

$$\begin{aligned} H(x_1, x_2; p_1, p_2) &= H(x_1, p_1) + H(x_2, p_2) \\ &= \frac{\kappa_1}{2} x_1^2 + \frac{1}{2M_1} p_1^2 + \frac{\kappa_2}{2} x_2^2 + \frac{1}{2M_2} p_2^2 \quad (5.1) \end{aligned}$$

Die klassische Zustandsgleichung für ein solches System lautet natürlich

$$H(x_1(t), x_2(t); p_1(t), p_2(t)) = \text{const} = E = E_1 + E_2 \quad (5.2)$$

Für das nichtklassische Gesamtsystem führen wir in völliger Analogie zum Einteilchen-System (siehe § 4.2.3) die *Zweiteilchen*-Begrenzungsfunktionen $F_E(x_1, x_2)$ und $G_E(p_1, p_2)$ ein:

$$\begin{aligned} V_E^{(\text{nl})}(x_1, x_2) &= F_E(x_1/x_0, x_2/x_0)V(x_1, x_2) \leq E \\ G_E^{(\text{nl})}(p_1, p_2) &= G_E(p_1/p_0, p_2/p_0)T(p_1, p_2) \leq E \end{aligned} \quad (5.3)$$

Die nichtklassische Darstellung des Energiesatzes lautet dementsprechend (unter Fortlassung von x_0 und p_0 , wenn sie keine Rolle spielen)

$$E = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} F_E(x_1, x_2)V(x_1, x_2)dx_1dx_2}{\int_{-\infty}^{+\infty} F_E(x_1, x_2)dx_1dx_2} + \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} G_E(p_1, p_2)T(p_1, p_2)dp_1dp_2}{\int_{-\infty}^{+\infty} G_E(p_1, p_2)dp_1dp_2} \quad (5.4)$$

Diese Darstellung braucht offensichtlich nicht modifiziert zu werden, wenn die beiden Teilsysteme über eine rein orts-, $V_{\text{WW}}(x_1, x_2)$, oder über eine rein impulsabhängige Funktion, $T_{\text{WW}}(p_1, p_2)$, miteinander wechselwirken.

Für die Begrenzungsfunktionen setzen wir $F_E(x_1, x_2) = |\psi_E(x_1, x_2)|^2$ und $G_E(p_1, p_2) = |\phi_E(p_1, p_2)|^2$. Die Amplituden $\psi_E(x_1, x_2)$ und $\phi_E(p_1, p_2)$ sind zweidimensionale Fourier-Transformierte voneinander:

$$\psi_E(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(x_1p_1+x_2p_2)} \phi_E(p_1, p_2)dp_1dp_2; \quad (5.5)$$

$$\phi_E(p_1, p_2) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(x_1p_1+x_2p_2)} \psi_E(x_1, x_2)dx_1dx_2 \quad (5.6)$$

Wir gelangen auf diese Weise zur stationären Zwei-Teilchen-Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}(x_1, x_2)\psi_E(x_1, x_2) = E\psi_E(x_1, x_2); \quad \hat{H}(p_1, p_2)\phi_E(p_1, p_2) = E\phi_E(p_1, p_2) \quad (5.7)$$

Für von einander isolierte Teilsysteme ist natürlich – analog zu Gleichung (5.1) –

$$\hat{H}(x_1, x_2) = \hat{H}(x_1) + \hat{H}(x_2) \quad (5.8)$$

und die Lösung des Gesamtsystems separiert in die der beiden Einzelsysteme:

$$\psi_E(x_1, x_2) = \psi_{E_1}(x_1)\psi_{E_2}(x_2); \quad E_1 + E_2 = E \quad (5.9)$$

Es war deshalb gerechtfertigt, in die Fourier-Transformation (5.5) sofort \hbar einzutragen.

Die Verallgemeinerung auf mehrdimensionale sowie auf beliebig viele Quantensysteme ist offensichtlich. Insbesondere folgen aus der Fourier-Transformation (5.5) die bereits in den Gleichungen (5.7) verwendeten Beziehungen (f sei die Anzahl der Freiheitsgrade)

$$\begin{aligned} \hat{p}_i \psi_E(x_1 \dots x_f) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \psi_E(x_1 \dots x_f); \\ \hat{x}_i \phi_E(p_1 \dots p_f) &= +i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i} \phi_E(p_1 \dots p_f); \quad i = 1 \dots f \end{aligned}$$

Mithin gelten die Vertauschungsrelationen

$$\hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{p}_j \hat{x}_i = i\hbar \delta_{ij}; \quad i, j = 1 \dots f \quad (5.10)$$

Aufgabe: Beweisen Sie, dass N gleiche lineare und ein isotroper N -dimensionaler Quantenoszillator isospektral sind! Hinweis: Diskutieren Sie die jeweiligen Schrödinger-Gleichungen und deren Lösungen!

5.1.2 Klassische Systeme aus zwei gleichen Körpern

Ein klassisches System möge nun zwei *gleiche* Körper im Sinne Helmholtz¹ enthalten. Wir nennen zwei Körper eines Systems insbesondere dann einander gleich, wenn sich durch ihre Vertauschung die physikalischen Eigenschaften des Systems nicht ändern. Letzteres ist gegeben, wenn die Hamilton-Funktion invariant gegenüber der Transposition ($x_1 \leftrightarrow x_2, p_1 \leftrightarrow p_2$), mithin *symmetrisch* in den Orts- und Impulsvariablen dieser beiden Körper ist:

$$H(x_2, x_1; p_2, p_1) = H(x_1, x_2; p_1, p_2) \quad (5.11)$$

Das gleiche gilt *mutatis mutandis* für den Fall, dass zwei gleiche Systeme zu einem Gesamtsystem gehören.

Diese *Permutationssymmetrie* gilt offenbar auch für den Fall, dass die beiden gleichen Teilsysteme miteinander wechselwirken, denn jede Asymmetrie würde ein Teilsystem vor dem anderen auszeichnen, wofür es wegen deren Gleichheit keinen Grund gibt. Als Beispiel hierfür führen wir zwei gleiche harmonische Oszillatoren mit harmonischer Kopplung an:

$$H(x_1, x_2; p_1, p_2) = \frac{\kappa}{2} (x_1^2 + x_2^2) + \frac{1}{2M} (p_1^2 + p_2^2) + \frac{\kappa_{\text{WW}}}{2} (x_1 - x_2)^2 \quad (5.12)$$

¹ H. von Helmholtz, *Einleitung zu den Vorlesungen über Theoretische Physik*, 1903, §10.

Wenn aber die Erhaltungsgrößen von einem solchen Austausch unberührt bleiben, dann erlaubt die Kenntnis allein ihrer Werte es *nicht*, zwei gleiche Körper beziehungsweise Teilsysteme voneinander zu unterscheiden: *Bezüglich dieser Information sind sie ununterscheidbar.*²

Der physikalisch relevante Konfigurationsraum ist demnach nicht der Euklidische Raum der 6 Ortskoordinaten der zwei Körper (beziehungsweise Teilsysteme): Vielmehr sind alle Punkte als äquivalent zu behandeln, die durch die Vertauschung der beiden Körper auseinander hervorgehen; und diejenigen Punkte, die dem Eulerschen Ausschließungsprinzip (siehe § 3.2.1) widersprechen, müssen ausgeschlossen werden (vgl. Laidlaw & DeWitt, 1971). Das führt zu topologischen Effekten, auf die wir in Kürze zurückkommen werden.

5.1.3 Quantensysteme aus zwei gleichen Teilchen

Da es für einfache Systeme keinen Grund für eine Symmetriebrechung gibt (vgl. Shapere & Wilczek, 1989, Kap.7), erwarten wir, dass diese klassischen Überlegungen *cum grano salis* auch für die entsprechenden nichtklassischen Systeme gelten. Demzufolge sind kraft ihrer Definition (5.3) auch die Begrenzungsfunktionen symmetrisch:

$$F_E(x_2, x_1) = F_E(x_1, x_2); \quad G_E(p_2, p_1) = G_E(p_1, p_2) \quad (5.13)$$

Um dieser Symmetrie ganz allgemein Genüge zu tun, setzen wir³

$$\begin{aligned} F_E(x_1, x_2) &= |\psi_E^{\gamma, m}(x_1, x_2)|^2; \\ \psi_E^{\gamma, m}(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\gamma_E(x_1, x_2)} \left[\tilde{\psi}_E(x_1, x_2) + e^{im_E\pi} \tilde{\psi}_E(x_2, x_1) \right]; \\ G_E(p_1, p_2) &= |\phi_E^{\delta, n}(p_1, p_2)|^2; \\ \phi_E^{\delta, n}(p_1, p_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_E(p_1, p_2)} \left[\tilde{\phi}_E(p_1, p_2) + e^{in_E\pi} \tilde{\phi}_E(p_2, p_1) \right] \end{aligned} \quad (5.14)$$

mit noch zu bestimmenden Phasen $\gamma_E(x_1, x_2)$, $\delta_E(p_1, p_2)$, $m_E\pi$, und $n_E\pi$ (m_E, n_E ganzzahlig). Die Symmetrie der Funktionen $\psi_E(x_1, x_2)$ und $\phi_E(p_1, p_2)$

² Es kommt eben *nicht* auf die Markierbarkeit an (ein eher anthropomorphes Argument, vgl. Bach, *Indistinguishable Classical Particles*, 1997, Kap.1; Enders, *Equality and Identity and (In)distinguishability in Classical and Quantum Mechanics from the Point of View of Newton's Notion of State*, 2004). – Ich danke Prof. J. Schnakenberg für den Hinweis auf die Klassische Statistische Mechanik ununterscheidbarer Körper.

³ Im Ein-Teilchen-Fall hat uns das *konstruktive* Garantieren der Eigenschaften $F_E(x) \geq 0$ und $G_E(p) \geq 0$ zu den Wellenfunktionen $\psi_E(x)$ und $\phi_E(p)$ geführt. Vgl. auch den Kunstgriff $f(k) := g(k) + \bar{g}(-k)$, der die Eigenschaft $f(-k) = \bar{f}(k)$ sichert (Achieser & Berestezki, 1962, S.3). – Die allgemeine, mathematisch strenge Behandlung der Permutations-Symmetrie ist durchaus nicht trivial (siehe z. B. Weyl, *Gruppentheorie und Quantenmechanik*, 1928, Abschn.V.C), wir benötigen hier den allgemeinen Formalismus aber nicht.

gegenüber dem Austausch $x_1 \leftrightarrow x_2$ beziehungsweise $p_1 \leftrightarrow p_2$ spielt nun keine Rolle mehr.

Um diese Phasen näher zu bestimmen, wenden wir das Wignersche Theorem (§ 4.6.1) auf die Permutationssymmetrie der Wellenfunktion $\psi_E^{\gamma,m}(x_1, x_2)$ an. Es ist $\hat{R}\psi_E^{\gamma,m}(x_1, x_2) = e^{i\rho_E^{(1,2)}}\psi_E^{\gamma,m}(x_2, x_1)$, wobei $\rho_E^{(1,2)}$ eine Koordinaten-unabhängige Phase ist. Zu jedem möglichen Zustand E gehören demnach stets mindestens die folgenden zwei Wellenfunktionen (der Zustand E kann entartet sein, das ist für unsere Argumentation aber ohne Belang):

$$(1) \quad \psi_E^{\gamma,m}(x_1, x_2) \quad (5.15)$$

$$(2) \quad \hat{R}\psi_E^{\gamma,m}(x_1, x_2) = e^{i\rho_E^{(1,2)}} e^{im_E\pi} e^{i[\gamma_E(x_2, x_1) - \gamma_E(x_1, x_2)]} \psi_E^{\gamma,m}(x_1, x_2) \quad (5.16)$$

Infolge der Antisymmetrie des Ausdruckes $[\gamma_E(x_2, x_1) - \gamma_E(x_1, x_2)]$ sind die Funktionen (1) und (2) aber nicht zwei linear unabhängige Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung, sondern unterscheiden sich höchstens durch einen ortsunabhängigen Phasenfaktor. Die Differenz $[\gamma_E(x_2, x_1) - \gamma_E(x_1, x_2)]$ kann daher in die Phase $\rho_E^{(1,2)}$ absorbiert werden. Analoges gilt für die Wellenfunktionen im Impulsraum.

Nach zweimaliger Vertauschung der Koordinaten haben wir

$$\begin{aligned} \hat{R}^2\psi_E^m(x_1, x_2) &= \hat{R}e^{i\rho_E^{(1,2)}}\psi_E^m(x_2, x_1) = e^{i\rho_E^{(1,2)}} e^{i\rho_E^{(2,1)}}\psi_E^m(x_1, x_2) \\ \hat{R}^2\phi_E^m(p_1, p_2) &= \hat{R}e^{i\rho_E^{(1,2)}}\phi_E^m(p_2, p_1) = e^{i\rho_E^{(1,2)}} e^{i\rho_E^{(2,1)}}\phi_E^m(p_1, p_2) \end{aligned} \quad (5.17)$$

Zunächst wollen wir annehmen, dass sich hierbei überhaupt nichts ändert: $\hat{R}^2 = \hat{1}$, $\rho_E^{(1,2)} = -\rho_E^{(2,1)}$. Dann erwachsen aus den Gleichungen (5.14) die zwei Möglichkeiten $m_E = 0$ und $m_E = 1$ nebst

$$\begin{aligned} F_E(x_1, x_2) &= |\psi_E^m(x_1, x_2)|^2; \\ \psi_E^m(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\tilde{\psi}_E(x_1, x_2) + e^{im_E\pi} \tilde{\psi}_E(x_2, x_1) \right] \\ G_E(p_1, p_2) &= |\phi_E^m(p_1, p_2)|^2; \\ \phi_E^m(p_1, p_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\tilde{\phi}_E(p_1, p_2) + e^{im_E\pi} \tilde{\phi}_E(p_2, p_1) \right] \end{aligned} \quad (5.18)$$

Da die Funktionen $\psi_E^m(x_1, x_2)$ und $\phi_E^n(p_1, p_2)$ Fourier-Transformierte (5.5) voneinander sind, sind ihre Phasenparameter gleich: $n_E = m_E$.

Nun gilt für beliebige permutationssymmetrische Hamiltonians die Beziehung (Pauli, *Wave Mechanics*, §35)

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}_E^{m_E}(x_1, x_2) \hat{H}(x_1, x_2, t) \psi_{E'}^{m_{E'}}(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\phi}_E^{m_E}(p_1, p_2) \hat{H}(p_1, p_2, t) \phi_{E'}^{m_{E'}}(p_1, p_2) dp_1 dp_2 \sim \delta_{m_E m_{E'}} \end{aligned} \quad (5.19)$$

Deshalb sind die Phasen $m_E\pi$ vom Zustand E unabhängig: Ein System besitzt entweder nur symmetrische: $\psi_E^+(x_1, x_2)$, oder nur antisymmetrische Wellenfunktionen: $\psi_E^-(x_1, x_2)$, mit

$$\psi_E^\pm(x_2, x_1) = \pm\psi_E^\pm(x_1, x_2); \quad \phi_E^\pm(p_2, p_1) = \pm\phi_E^\pm(p_1, p_2) \quad (5.20)$$

Wir werden sehen, dass diese Symmetrieeigenschaft auf das engste mit den statistischen Eigenschaften der jeweiligen Systeme verknüpft sind: Die symmetrischen Wellenfunktionen beschreiben Bosonen, die antisymmetrischen – Fermionen.

Bezieht man den Spin oder andere Quanten-Koordinaten ein, so betrifft die Permutationssymmetrie *alle* Koordinaten. Die für Atome wichtige Einteilung in Para- und Ortho-Zustände (Heisenberg, 1926) spielt in den meisten Festkörpern wegen der Vermischung der atomaren Zustände bei der Bildung der Bänder aber keine Rolle.

Wir kehren noch einmal zu den Beziehungen (5.17) zurück. Eine genauere topologische Analyse (Leinaas & Myrheim, 1977) zeigt nämlich, dass die Phasen der Wellenfunktion durchaus von dem Weg abhängen, entlang dessen ein Teilchen sich bewegt, wenn es topologisch *in*äquivalente Wege gibt.⁴ Topologisch inäquivalent sind Wege, die nicht durch eine kontinuierliche Deformation ineinander überführt werden können. Ein Beispiel hierfür ist ein zweidimensionaler Konfigurationsraum, aus dem die Punkte gleicher Orte der Teilchen herausgeschnitten wurden. Ein solcher Phasenunterschied tritt im Aharonov-Bohm-Effekt (siehe § 8.8.3) messbar zutage. Da die Phase im Prinzip *beliebige* Werte annehmen kann, heißen die entsprechenden (Quasi-)Teilchen *Anyonen*.⁵ Sie sind der Schlüssel zum Verständnis des gebrochen-rationalen Quanten-Hall-Effektes (Laughlin, 1998).

Aufgabe:

- A) Geben Sie den Gesamtimpuls und die Gesamtenergie für zwei gleiche, wechselwirkungsfreie Körper an! *Hinweis:* Siehe Eulers Weltmodelle 3 und 4 im § 3.2.3.
- B) Ändern sich die Eigenschaften des Gesamtsystems, wenn man die beiden Körper gegeneinander austauscht?
- C) Können die beiden Einzelimpulse $p_{1,2}$ und Einzelenergien $E_{1,2}$ jeweils einem der beiden Körper eindeutig zugeordnet werden, wenn nur die Werte des Gesamtimpulses und der Gesamtenergie bekannt sind?

⁴ Eine umfassende Darstellung derartiger *geometrischer Phaseneffekte* findet sich in Bohm, Mostafazadeh, Koizumi, Niu & Zwanziger, *The Geometric Phase in Quantum Systems*, 2003; viele wichtige Originalarbeiten enthält Shapere & Wilczek, *Geometric Phases in Physics*, 1989.

⁵ Wilczek, *Magnetic flux, angular momentum and statistics*, 1982; Ders., *Quantum mechanics of fractional-statistics particles*, 1982. – Bisher wurden alle *freien* Teilchen entweder als Bosonen oder als Fermionen identifiziert.

Aufgabe: Zeigen Sie, dass ein Hamiltonian, der eine äußere Einwirkung auf ein permutationssymmetrisches System beschreibt, das infolge dieser Einwirkung permutationssymmetrisch bleibt, selbst permutationssymmetrisch in den Variablen dieses Systems ist! Hinweis: Benutzen Sie qualitative Argumente!

5.2 Konsequenzen der Permutationssymmetrie der Wellenfunktion

Wir beschränken uns im folgenden auf die Wellenfunktionen (5.20), da wir es in den nachfolgenden Beispielen nur mit Bosonen und Fermionen zu tun haben werden. Wir werden sehen, dass selbst für Systeme aus untereinander nicht wechselwirkenden Teilchen, für die der Unterschied zwischen $\psi_E^+(x_1, x_2)$ und $\psi_E^-(x_1, x_2)$ bzw. $\phi_E^+(p_1, p_2)$ und $\phi_E^-(p_1, p_2)$ keine Auswirkungen auf den Wert der Gesamtenergie (5.4) hat, dieser Unterschied nichtsdestotrotz ganz wesentliche Konsequenzen zeitigt.

Die Notwendigkeit, die Permutationssymmetrie der Wellenfunktion zu berücksichtigen zeigte sich historisch schnell bei der Interpretation der atomaren Spektren und der Streuexperimente.⁶

Aufgabe: Berechnen Sie die Energie (5.4) mit den Wellenfunktionen (5.18)!

5.2.1 Bosonen und Fermionen

Nach dem im vorigen Paragraphen Gesagten gibt es – unter Außerachtlassung der nur unter sehr speziellen Bedingungen als Quasiteilchen auftretenden Anyonen – eine Klasseneinteilung auf der Menge der durch permutationssymmetrische Hamiltonians beschriebenen Systeme⁷:

1. Systeme aus *Bosonen*, mit symmetrischen Wellenfunktionen; die *System-Zustände* werden gemäß der Bose-Einstein-Statistik⁸ besetzt (Systeme wie der Oszillator besitzen *keine Einteilchen-Zustände*);
2. Systeme aus *Fermionen*, mit antisymmetrischen Wellenfunktionen; die *Einteilchen-Zustände* des Systems werden gemäß der Fermi-Dirac-Statistik⁹ besetzt.

⁶ Heisenberg, *Über die Spektren von Atomsystemen mit zwei Elektronen*, 1926; Oppenheimer, *On the quantum theory of electronic impacts*, 1928; Mott, *The exclusion principle and aperiodic systems*, 1929; Ders., *The collision between two electrons*, 1930.

⁷ Vgl. Pauli, *Wave Mechanics*, 2000, §35; Fowler, *Statistical Mechanics*, 1929.

⁸ Satyendra Nath Bose (1894-1974), *Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese*, 1924; Einstein, *Anmerkung zu S. N. Boses Abhandlung «Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese»*, 1924.

⁹ Enrico Fermi (1901-1954, Nobelpreis 1938), *Zur Quantelung des idealen einatomigen Gases*, 1926; Dirac, *On the Theory of Quantum Mechanics*, 1926.

Zu den Bosonen gehören beispielsweise die Anregungen des Quanten-Oszillators und die mit diesem Modell beschreibbaren Teilchen wie Phononen und Photonen – zu den Fermionen die Elektronen und die Quasiteilchen Bloch-Elektron und Loch.

Zu welcher Klasse ein Teilchen gehört, kann letztlich nur experimentell geklärt werden. Hierbei muss der Spin auf analoge Weise einbezogen werden. Bemerkenswerterweise gilt das

Spin-Statistik-Theorem *Teilchen mit ganzzahligem (halbzahligem) Spin sind Bosonen (Fermionen).*¹⁰

Aufgabe: Zeigen Sie, dass diese Einteilung auch für Systeme mit mehr als zwei gleichen Teilchen gilt! Hinweis: Die Physik hängt nicht von der Reihenfolge der Nummerierung ab.

5.2.2 Die Besetzung von Zuständen: Austausch-Loch

Im Falle, dass die beiden Teilchen eines Systems nicht direkt miteinander wechselwirken, haben wir

$$\hat{H}(x_1, x_2) = \hat{H}(x_1) + \hat{H}(x_2); \quad \hat{H}(p_1, p_2) = \hat{H}(p_1) + \hat{H}(p_2); \quad (5.21)$$

$$\psi_E^\pm(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\tilde{\psi}_{E_1}(x_1) \tilde{\psi}_{E_2}(x_2) \pm \tilde{\psi}_{E_1}(x_2) \tilde{\psi}_{E_2}(x_1) \right]; \quad (5.22)$$

$$\phi_E^\pm(p_1, p_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\tilde{\phi}_{E_1}(p_1) \tilde{\phi}_{E_2}(p_2) \pm \tilde{\phi}_{E_1}(p_2) \tilde{\phi}_{E_2}(p_1) \right]; \quad (5.23)$$

$$E_1 + E_2 = E \quad (5.24)$$

Für $x_1 = x_2$ und $p_1 = p_2$ verschwinden die Funktion $\psi_E^-(x_1, x_2)$ beziehungsweise $\phi_E^-(p_1, p_2)$ identisch, und zwar unabhängig davon, in welchen Zuständen (E_1, E_2) sich die beiden Teilchen befinden. Es entsteht dadurch das Bestreben zweier Fermionen, „geometrisch auseinander zu rücken“: das sogenannte Austausch-Loch, und zwar im Orts- und im Impuls-Konfigurationsraum.

Diese indirekte Wechselwirkung ist ein reiner Quanteneffekt. Das Verhalten im Ortsraum erinnert zwar an das Euler-Verbot (siehe § 3.2.1), es hat aber nichts mit Undurchdringlichkeit zu tun. Denn die stationären Wellenfunktionen überlappen sich im gesamten Konfigurationsraum, und der Eulersche Ortsbegriff ist gar nicht ohne weiteres anwendbar.¹¹

5.2.3 Die Besetzung von Zuständen:

Pauli-Verbot und Aufbau-Prinzip

Die Funktionen $\psi_E^+(x_1, x_2)$ und $\psi_E^-(x_1, x_2)$ bzw. $\phi_E^+(p_1, p_2)$ und $\phi_E^-(p_1, p_2)$ unterscheiden sich nicht nur für gleiche Argumente drastisch voneinander, sondern auch dann, wenn sich die beiden Teilchen (Subsysteme) in dem gleichen

¹⁰ Pauli, *The Connection between Spin and Statistics*, 1940.

¹¹ Siehe auch Mehra & Rechenberg, 2001, Bd. 6, Teil I, Abschn. II.7 (b) *Are Elementary Particle Impenetrable?*

Zustand befinden ($E_2 = E_1$):

$$\begin{aligned}\psi_{E_1, E_1}^{\pm}(x_1, x_2) &= \begin{Bmatrix} \sqrt{2}\psi_{E_1}(x_1)\psi_{E_1}(x_2) \\ 0 \end{Bmatrix}; \\ \phi_{E_1, E_1}^{\pm}(p_1, p_2) &= \begin{Bmatrix} \sqrt{2}\phi_{E_1}(p_1)\phi_{E_1}(p_2) \\ 0 \end{Bmatrix}\end{aligned}\quad (5.25)$$

Das identische Verschwinden der Funktionen $\psi_{E_1, E_1}^{-}(x_1, x_2)$ und $\phi_{E_1, E_1}^{-}(p_1, p_2)$ bedeutet, dass zwei Fermionen nicht denselben Ein-Teilchen-Zustand E_1 einnehmen können. Das ist im wesentlichen der Inhalt des Pauli-Verbots¹².

Das Pauli-Verbot impliziert das Aufbau-Prinzip für fermionische Systeme: Wenn sich ein Teilsystem im Grundzustand befindet, muss sich das zweite Teilsystem in einem Zustand mit *größerer* Energie befinden. Wenn der Grundzustand zweifach entartet ist, gilt dies entsprechend für das dritte Teilsystem u.s.w. Da sich die elektronischen Zustände der Atomhülle mit verschiedener Energie qualitativ voneinander unterscheiden, ist die schier unerschöpfliche Vielfalt der Natur letztlich durch das Aufbau-Prinzip bedingt.

Wie das Austausch-Loch ist auch das Pauli-Verbot kein quantenmechanisches Analogon des Euler-Verbots. Denn es können sich beliebig viele klassische Körper in dem gleichen stationären Zustand $\mathbf{v} = \text{const}$ (nebst $E = \text{const}$) befinden, solange sie dabei verschiedene Orte einnehmen (vgl. Eulers Welt-Modelle Nr. 3 und 4 im § 3.2.3).

5.2.4 Austausch-Wechselwirkung

Wenn die beiden Teilchen direkt miteinander wechselwirken – wie zwei Elektronen vermittelt der Coulomb-Wechselwirkung –, gibt es neben einer klassisch interpretierbaren auch eine klassisch nicht interpretierbare Wechselwirkung, die sogenannte Austausch-Wechselwirkung.

Die Funktionen (5.18) führen nämlich zu Ausdrücken der Form

$$\begin{aligned}& \int \bar{\psi}_E^{\pm}(x_1, x_2)V(x_1, x_2)\psi_E^{\pm}(x_1, x_2)dx_1dx_2 \\ &= \int \bar{\tilde{\psi}}_E(x_1, x_2)V(x_1, x_2)\tilde{\psi}_E(x_1, x_2)dx_1dx_2 \\ &\quad \pm \int \bar{\tilde{\psi}}_E(x_1, x_2)V(x_1, x_2)\tilde{\psi}_E(x_2, x_1)dx_1dx_2\end{aligned}\quad (5.26)$$

Zur Veranschaulichung der rechten Seite dieser Gleichung nehmen wir in erster Näherung an, dass das Wechselwirkungspotenzial $V_{\text{WW}}(x_1, x_2)$ so schwach ist, dass die Separation (5.21) näherungsweise gültig ist. Dann vereinfacht sich dieser Ausdruck zu ($E_1 \neq E_2$)¹³

¹² Pauli, *Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur der Spektren*, 1925. – Pauli bezeichnete sein Ausschlussprinzip auch als „Wohnungsamt für äquivalente Bahnen“ (Brief an W. Wentzel v. 8. Mai 1925; zit. nach Mehra & Rechenberg, 2001, Bd.3, S.286, Fn.383). – Das Pauli-Verbot gilt nach Dirac (1933, S.324) für „beliebige Bewegungszustände“.

¹³ Heisenberg, *Über die Spektren von Atomsystemen mit zwei Elektronen*, 1926.

$$\begin{aligned}
& \int \bar{\psi}_{E_1+E_2}(x_1, x_2) [V(x_1) + V(x_2) + V_{\text{WW}}(x_1, x_2)] \tilde{\psi}_{E_1+E_2}(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \\
& \approx \int |\psi_{E_1}(x_1)|^2 V(x_1) dx_1 \int |\psi_{E_2}(x_2)|^2 dx_2 \\
& \quad + \int |\psi_{E_1}(x_1)|^2 dx_1 \int |\psi_{E_2}(x_2)|^2 V(x_2) dx_2 \\
& \quad + \int |\psi_{E_1}(x_1)|^2 V_{\text{WW}}(x_1, x_2) |\psi_{E_2}(x_2)|^2 dx_1 dx_2 \\
& \quad \pm \int \bar{\psi}_{E_1}(x_1) \bar{\psi}_{E_2}(x_2) V_{\text{WW}}(x_1, x_2) \psi_{E_2}(x_1) \psi_{E_1}(x_2) dx_1 dx_2
\end{aligned} \tag{5.27}$$

Eingesetzt in die Formel (5.4) ergeben die beiden Wechselwirkungsglieder charakteristische Korrekturen zu den Energien $E_{1,2}^{(0)}$ der nicht-wechselwirkenden Teilchen:

$$\begin{aligned}
E_1 + E_2 = E_1^{(0)} + E_2^{(0)} + & \frac{\int |\psi_{E_1}(x_1)|^2 V_{\text{WW}}(x_1, x_2) |\psi_{E_2}(x_2)|^2 dx_1 dx_2}{2 \int |\psi_{E_1}(x_1)|^2 |\psi_{E_2}(x_2)|^2 dx_1 dx_2} \\
& \pm \frac{\int \bar{\psi}_{E_1}(x_1) \bar{\psi}_{E_2}(x_2) V_{\text{WW}}(x_1, x_2) \psi_{E_2}(x_1) \psi_{E_1}(x_2) dx_1 dx_2}{2 \int |\psi_{E_1}(x_1)|^2 |\psi_{E_2}(x_2)|^2 dx_1 dx_2}
\end{aligned} \tag{5.28}$$

Interpretiert man hier nämlich $|\psi_E|^2$ als eine Dichte im Zustand E , dann ist der erste Wechselwirkungsterm analog zu der Wechselwirkungsenergie in einer klassischen Kontinuums(Feld)theorie.¹⁴ Im zweiten Wechselwirkungsterm treten die Produkte $\bar{\psi}_{E_1}(x_1)\psi_{E_2}(x_1)$ und $\bar{\psi}_{E_2}(x_2)\psi_{E_1}(x_2)$ auf, die zu Übergängen zwischen den Zuständen E_1 und E_2 gehören (Heisenberg, 1925; Born & Jordan, 1925; Schrödinger, *Dritte Mitteilung*): die beiden Teilchen „tauschen“ ihre Zustände, und daher rührt der Name Austausch-Wechselwirkung für diesen Term.

Die Austausch-Wechselwirkung führt bei Fermionen wegen des Vorzeichenwechsels gegenüber der „direkten“ Wechselwirkung zu markanteren Effekten als bei Bosonen, zum Beispiel zur kovalenten chemischen Bindung (Heitler & London, 1927). Wir werden uns im § 8.5.2 näher mit ihr befassen.

Aufgabe: Diskutieren Sie in Gleichung (5.27) (a) den Fall $E_1 = E_2$ und (b) die Reellwertigkeit des letzten Gliedes!

¹⁴ Diese Interpretation (Schrödinger, *Dritte Mitteilung*, §4) führt bekanntlich zu Widersprüchen, doch ergibt die Interpretation als Ladungsdichte (nach Multiplikation mit der Ladung des analogen klassischen Körpers, Schrödinger, *Vierte Mitteilung*, §7), als Gewichtsfunktion (*Ebda.*) oder als Wahrscheinlichkeitsdichte (Born, *Quantenmechanik der Stoßprozesse*, 1926) die gleiche Analogie zur Klassischen Physik.

5.2.5 Verschränktheit *

... hier [bei den nichtstationären Abläufen] muß sich zeigen, ob die Interferenz gedämpfter „Wahrscheinlichkeitswellen“ hinreicht, diejenigen Erscheinungen zu erklären, die anscheinend auf eine raumzeitlose Kopplung hindeuten.

(M. Born, 1926a, Einleitung)

Ein weiterer Quanteneffekt tritt immer dann auf, wenn die Wellenfunktion eines Systems aus *scheinbar* räumlich separierten Teilsystemen nicht in ein Produkt von Subsystem-Wellenfunktionen separiert. Man nennt eine solche, durch Erhaltungssätze des Gesamtsystems bedingte Beziehung die Verschränkung der Wellenfunktionen der Teilsysteme¹⁵. Die Interpretation dieser, vor allem als EPR-Paradoxon (Einstein, Podolsky & Rosen, 1935) bekannt gewordenen Tatsache gehört zu den Kernthemen der Quantenphysik, deren Diskussion nach wie vor anhält.¹⁶ Die erfolgreichen Labor-Demonstrationen der letzten Jahre lassen auf vielversprechende Anwendungen in der Informationsübertragung hoffen.¹⁷

Die Verschränkung impliziert keine Fern-Wechselwirkung á la Newtonsches Gravitationsgesetz (vgl. Abschn. 3.2), denn letzteres bezieht sich auf separierbare Teilsysteme. Zwischen nichtverschränkten Teilsystemen besteht eine Wechselwirkung nur, wenn sich ihre Wellenfunktionen überlappen (Pauli, *Wave Mechanics*, 2000, Sec.36).

5.2.6 Ununterscheidbarkeit – Identität gleicher Teilchen *

Wir haben im § 5.1.2 gesehen, dass die Kenntnis allein der Werte der Erhaltungsgrößen eines klassischen Systems im Zustand E es nicht gestattet, die jeweils gleichen Körper beziehungsweise Teilsysteme voneinander zu unterscheiden, d. h. jedem einen bestimmten Ort und Impuls zuzuweisen. Ein Quantensystem besitzt außer dem Hamiltonian die Wellenfunktion als Bestimmungsstück. Wir haben uns deshalb zu fragen, ob sie Informationen enthält, die eine solche Unterscheidung erlauben.

Definitionsgemäß enthalten die Absolutquadrate

$$|\psi_E^\pm(x_1, x_2)|^2 \equiv F_E^\pm(x_1, x_2) = F_E^\pm(x_2, x_1)$$

und

$$|\phi_E^\pm(p_1, p_2)|^2 \equiv G_E^\pm(p_1, p_2) = G_E^\pm(p_2, p_1)$$

keine derartigen Informationen.

¹⁵ Schrödinger, *Discussion of Probability Relations between Separated Systems*, 1935.

¹⁶ Mandel & Wolf, *Optical Coherence and quantum optics*, 1995, Abschn. 12.14; Silverman, *More Than One Mystery. Explorations in Quantum Interference*, 1995, §§ 3.1, 4.4; Paul, *Photonen*, 1999; Audretsch, *Verschränkte Welt*, 2002.

¹⁷ Siehe z. B. Bruß, *Quanteninformaton*, 2003; Morsch, *Licht und Materie*, 2003, Kap.11; Zeilinger, *Einsteins Schleier*, 2003.

Die (anti)symmetrischen Wellenfunktionen

$$\psi_{E_1+E_2}^{\pm}(x_1, x_2) = \psi_{E_1}(x_1)\psi_{E_2}(x_2) \pm \psi_{E_1}(x_2)\psi_{E_2}(x_1) \quad (5.29)$$

erlauben keine eindeutige Zuordnung zwischen den beiden Teilchen, den Energien der beiden Einteilchen-Zustände (E_1, E_2) und den beiden Konfigurationen (x_1, x_2). Es kann nicht entschieden werden, ob sich das Teilchen mit der Energie $E_{1(2)}$ in der Konfiguration $x_{1(2)}$ oder in der Konfiguration $x_{2(1)}$ befindet. Umgekehrt kann nicht entschieden werden, ob das Teilchen in der Konfiguration $x_{1(2)}$ die Energie $E_{1(2)}$ oder die Energie $E_{2(1)}$ besitzt.

Mit anderen Worten, zwei gleichen Teilchen können keine Eigenschaften zugeordnet werden, anhand derer sie voneinander unterschieden werden können.

Betrachten wir nun zwei klassische Oszillatoren, jeder im Zustand E , mit den Schwingungsmittelpunkten $x_{1,0} = 0$ und $x_{2,0} = \Delta x$. Ohne Bezugnahme auf die Lagrangeschen verallgemeinerten Koordinaten lauten die entsprechenden Wellenfunktionen

$$\psi_E(x_1); \quad \psi_E(x_2 - \Delta x) \quad (5.30)$$

für die einzelnen Oszillatoren und

$$\psi_{E,E}^+(x_1, x_2) = \psi_E(x_1)\psi_E(x_2 - \Delta x) + \psi_E(x_2)\psi_E(x_1 - \Delta x) \quad (5.31)$$

für das Gesamtsystem. Der erste Summand entspricht der ursprünglichen klassischen Situation, in der der Schwingungsmittelpunkt des Oszillators 2 nicht im Koordinatenursprung liegt, während der zweite Summand der klassischen Situation entspricht, dass der Schwingungsmittelpunkt des Oszillators 1 nicht im Koordinatenursprung liegt. Dieser Widerspruch lässt sich nur dadurch auflösen, dass verallgemeinerte Lagrangesche Koordinaten verwendet werden und dass die beiden Oszillatoren als ununterscheidbar angesehen werden.

Damit gewinnt das Leibnizsche *principium identitatis indiscernibilium* (Prinzip der Identität des Ununterscheidbaren)¹⁸ eine neue Bedeutung. Leibniz' (zugegebenermaßen ontologischer, nicht physikalischer) Identitätsbegriff gründet sich auf die Überlegung, dass es ohne Unterschied zwischen zwei Objekten keinen hinreichenden Grund für ihre unterschiedliche Lage gibt. Mit dem Verlust der Bahn(kurve) $x(t)$ geht der Verlust der Lokalisierung einher und damit das letzte Unterscheidungsmerkmal zweier physikalisch ansonsten gleicher Körper/Teilchen. Sie sind in diesem Sinne identisch. In der Quantenmechanik fällt Leibniz' ontologische Ununterscheidbarkeit mit der physikalischen Ununterscheidbarkeit zusammen. - Für weiter gehende Analysen siehe die oben zitierten Arbeiten von Bach (1997) und Enders (2004).

¹⁸ Leibniz, *Nouveaux essais sur l'entendement humain*, 1704, Buch II, Kap. 27, Abschn. 1 (nach Jammer, *The conceptual development of quantum mechanics*, 1967, §7.1, Fn.78).

6. Die Besetzungszahl-Darstellung für Bosonen

Wir haben gesehen, dass die Einteilung in symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen: $\psi_E^{+(-)}(x_1, \dots, x_n)$, erhebliche Konsequenzen für die Verteilung der Teilchen auf die Systemzustände zeitigt und wollen dem genauer nachgehen. Als empirische Indizien stehen uns hierfür die Plancksche Quantenhypothese und das Pauli-Verbot zur Verfügung. Wir beginnen mit erstgenannter.

6.1 Begründung der Besetzungszahl-Darstellung für Bosonen

6.1.1 Das Besetzungsproblem in der Planckschen Quantenhypothese. Die sukzessive Besetzung eines Oszillators mit Energiequanten

Die Plancksche Quantenhypothese (1900) besteht bekanntlich darin, dass die Energie eines monochromatischen „Resonators“ der Frequenz ν nicht beliebige Werte annimmt, sondern nur ganzzahlige Vielfache des „Energieelementes“ $h\nu$. Diese Energieelemente teilt Planck auf die Resonatoren wie folgt auf. Es möge N Resonatoren mit der Frequenz ν geben, in denen sich insgesamt P Energieelemente mit der Gesamtenergie $\mathcal{E} = P \cdot h\nu$ befinden. p_i mit $\sum_{i=1}^N p_i = P$ ist die Anzahl der Energieelemente und $\mathcal{E}_i = p_i \cdot h\nu$ mit $\sum_{i=1}^N \mathcal{E}_i = \mathcal{E}$ die für den Energieaustausch mit dem Strahlungsfeld *disponible* Energie im i -ten Resonator ($i = 1 \dots N$).¹

Übertragen auf unser Modellsystem heißt das:

- Im Zustand E_n ist das *System* harmonischer Oszillator mit n „Energieelementen“ („Schwingungs-Teilchen“) $h\nu$ besetzt ($n = 0, 1, 2, \dots$).
- Die Zustände E_1, E_2, \dots, E_n werden *sukzessive* besetzt.

¹ Da Planck *ohne* Berücksichtigung der Nullpunktsenergie $\frac{1}{2}h\nu$ zur richtigen Verteilung gelangt, spielt diese für das Besetzungsproblem offenbar keine Rolle. Später hat er auch sie aus thermodynamischen Überlegungen abgeleitet (Planck, 1914). Ihre Existenz sei durch das Attribut „disponibel“ angedeutet.

- Den n Teilchen lässt sich kein individueller eigener Zustand zuordnen – andererseits sind die Zustände E_1, E_2, \dots, E_{n-1} nicht etwa unbesetzt.

Diese Situation ist mit einem Omnibus mit abgedunkelten Scheiben vergleichbar, bei dem man zwar weiß, wie viele Fahrgäste ein- und aussteigen, nicht aber, wo sie Platz nehmen.

Das Plancksche Abzählverfahren für die stationären Zustände wurde von Natanson² als Abzählverfahren für *ununterscheidbare* Teilchen interpretiert. Es kommt allerdings nicht auf die (Un)unterscheidbarkeit der Teilchen an (diese ist zustandsbezogen), sondern auf die der Zustände selbst.

Diese sukzessive Besetzung mit Energieelementen, die wir dem heutigen Sprachgebrauch entsprechend *Energiequanten* nennen werden, wird nun zweckmäßigerweise mit Hilfe der Rekursionsformeln (4.63) ff. beschrieben. Diese besagen nämlich, dass die Wellenfunktion ψ_n mit den Wellenfunktionen $\psi_{n\pm 1}$ durch die Leiteroperatoren

$$\hat{b}^+ \equiv -\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\kappa}} \frac{d}{dx} + \sqrt{\frac{\kappa}{2\hbar\omega}} x; \quad \hat{b} \equiv \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\kappa}} \frac{d}{dx} + \sqrt{\frac{\kappa}{2\hbar\omega}} x \quad (6.1)$$

verbunden ist. Tatsächlich gelten

$$\hat{H}(x)\hat{b}^+\psi_n(x) = (E_n + \hbar\omega) \cdot \hat{b}^+\psi_n(x) \quad \text{und} \\ \hat{H}(x)\hat{b}\psi_n(x) = (E_n - \hbar\omega) \cdot \hat{b}\psi_n(x) \quad (6.2)$$

Es ist daher naheliegend, diesen Operatoren die Aufnahme aus der bzw. Abgabe an die Umgebung genau eines Energiequant(um)s zuzuordnen.

Außerdem gilt³

$$\hat{b}^+\hat{b}\psi_n(x) = n\psi_n(x) \quad (6.3)$$

Die Zahl n bedeutet nach dem oben Gesagten die Anzahl von Quanten(teilchen) der Energie $\hbar\omega$ in dem *System Oszillator*, wenn dieser sich im Zustand E_n befindet. Man kann also weder davon sprechen, dass je ein Teilchen die Zustände E_1, E_2, \dots, E_n besetzt, noch davon, dass alle n Teilchen den Ein-Teilchen-Zustand E_n besetzen, denn dann wäre ihre Gesamtenergie gleich $n(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$.

Folglich ist beim Oszillator $\psi_n(x)$ keine Ein-Teilchen- sondern eine Ein-System-Wellenfunktion. Den n Teilchen im Zustand E_n sind keine individuellen Wellenfunktionen zugeordnet – schließlich besitzt das System auch

² Władisław Natanson (1864-1937), *Über die statistische Theorie der Strahlung*, 1911 (nach Hund, *Geschichte der Quantentheorie*, 1975, S.143, und Mehra & Rechenberg, *The Historical Development of Quantum Theory*, 2001, Bd.1, Teil 2, S.559). Die drei Abzählverfahren bosonisch, fermionisch und klassisch werden in Bach, *Indistinguishable Classical Particles*, 1997, kritisch diskutiert.

³ Dies entspricht der „Faktorisierung“ des Hamiltonians nach Schrödinger, *The Factorization of the Hypergeometric Equation*, 1941, und hier zit. Lit.

dann noch eine Wellenfunktion, ist es nicht „verschwunden“, wenn es gar nicht mehr mit (abgebbaren) Energiequanten besetzt ist. Die Nullpunktenergie scheint die Existenz des Quantensystems im Grundzustand zu sichern.

6.1.2 Besetzungszahl-Darstellung – Fock-Raum

Es ist nun naheliegend, Operatoren b und b^+ nebst $\hat{n} = b^+b = \hat{n}^+$ sowie Funktionen $|n\rangle$ so zu definieren, dass diese Operatoren in der oben beschriebenen Weise wirken, *ohne* auf das System harmonischer Oszillator Bezug zu nehmen. (Wir lassen wieder das Operator-Symbol weg, wo dies nicht zu Missverständnissen führt.)

Die Durchführung dieses Vorhabens geschieht im sogenannten Fock-Raum⁴. Der Fock-Raum ist ein spezieller Hilbert-Raum⁵. Er wird von den Diracschen Bra-, $\langle n|$, und Ket-Vektoren, $|n\rangle = \langle n|^+$, $n = 0, 1, 2, \dots$, aufgespannt. Man *postuliert* die Gültigkeit der Beziehungen

$$b|0\rangle = 0; \quad b^+|0\rangle = |1\rangle; \quad \hat{n}|n\rangle \equiv b^+b|n\rangle = n|n\rangle; \quad (6.4)$$

$$\langle 0|b^+ = 0; \quad \langle 0|b = \langle 1|; \quad \langle n|\hat{n} \equiv \langle n|b^+b = n\langle n| \quad (6.5)$$

und der Vertauschungsrelation

$$bb^+ - b^+b = 1 \quad (6.6)$$

Als Eigenvektoren des halbbeschränkten ($n \geq 0$) Hermiteschen Operators $\hat{n} = b^+b = \hat{n}^+$ sind die Vektoren $\langle n|$ und $|n\rangle$ orthonormierbar:

$$\langle n'|n\rangle = \delta_{n'n}$$

Es wäre jedoch eher zufällig, wenn die Vektoren $(b^+)^n|0\rangle$ „automatisch“ normiert wären. Tatsächlich erhält man für die normierten Besetzungszahl-Vektoren die Formeln

$$|n\rangle = \frac{(b^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle; \quad \langle n| = \langle 0|\frac{(b)^n}{\sqrt{n!}} \quad (6.7)$$

⁴ Wladimir Alexandrowitsch Fock (1898-1975), *Konfigurationsraum und zweite Quantelung*, 1932. – Mathematisch strenge Darstellungen finden sich z.B. in Cook, *The Mathematics of Second Quantization*, 1953; Berezin, *The Method of Second Quantization*, 1965. – Wir behandeln hier nur die n -fache Besetzung eines Systems; vgl. die wesentlich umfassendere Darstellung in Nolting, *Viel-Teilchen-Theorie*, 2001, Kap.1.

⁵ David Hilbert (1862-1943), *Grundzüge einer allgemeinen Theorie der linearen Integralgleichungen*, 1912. – Siehe auch v. Neumann, *Allgemeine Eigenwerttheorie Hermitescher Funktionaloperatoren*, 1929; Ders., *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, 1932, §§ 1.4, 2.1. – Ein Hilbert-Raum ist ein vollständiger unitärer Raum (mitunter wird auch die Separabilität gefordert, vgl. Fick, 1988, § 2.1.2).

b und b^+ werden als Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren von Energiequanten benutzt, denn es gelten die Beziehungen

$$|n\rangle = \frac{b^+}{\sqrt{n}} \frac{(b^+)^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}} |0\rangle = \frac{b^+}{\sqrt{n}} |n-1\rangle; \quad b^+ |n-1\rangle = \sqrt{n} |n\rangle \quad (6.8)$$

und

$$|n-1\rangle = \frac{b}{\sqrt{n}} \frac{(b^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle = \frac{b}{\sqrt{n}} |n\rangle; \quad b |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (6.9)$$

Aufgabe: Begründen Sie die Forderung (6.6)! Hinweis: Vertauschungsrelation der Operatoren (6.1)

Aufgabe: Leiten Sie die Formeln (6.7) her! Hinweis: Berechnen Sie $b(b^+)^n|0\rangle = n(b^+)^{n-1}|0\rangle \dots (b^+)^n(b^+)^n|0\rangle = n!|0\rangle$!

6.1.3 Wichtige Eigenschaften der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Neben den grundlegenden Vertauschungsrelationen (6.6) gelten folgende allgemeinere Vertauschungsrelationen:

Erstens,

$$\begin{aligned} b \cdot (b^+)^n &= bb^+ \cdot (b^+)^{n-1} = (b^+b + 1) \cdot (b^+)^{n-1} = (b^+)^2b(b^+)^{n-2} + 2(b^+)^{n-1} \\ &= \dots = (b^+)^n \cdot b + n(b^+)^{n-1} \end{aligned} \quad (6.10)$$

mithin

$$b \cdot (b^+)^n - (b^+)^n \cdot b = n(b^+)^{n-1} = \frac{d}{db^+}(b^+)^n$$

Daraus folgt für beliebige ganzrationale Funktionen $f(x)$ die Vertauschungsrelation

$$b \cdot f(b^+) - f(b^+) \cdot b = \frac{d}{db^+}f(b^+) \quad (6.11)$$

Zweitens,

$$(b)^n \cdot b^+ - b^+ \cdot (b)^n = n(b)^{n-1} = \frac{d}{db}(b)^n \quad (6.12)$$

Auf zu Erstens analoge Weise ergibt sich die Vertauschungsrelation

$$f(b) \cdot b^+ - b^+ \cdot f(b) = \frac{d}{db}f(b) \quad (6.13)$$

Die Vertauschungsrelationen (6.11) und (6.13) hängen eng mit den Formeln

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial f(\hat{p}, \hat{q})}{\partial \hat{p}} = f(\hat{p}, \hat{q})\hat{q} - \hat{q}f(\hat{p}, \hat{q}); \quad -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial f(\hat{p}, \hat{q})}{\partial \hat{q}} = f(\hat{p}, \hat{q})\hat{p} - \hat{p}f(\hat{p}, \hat{q}) \quad (6.14)$$

zusammen. Letztere müssen insbesondere für den Hamiltonian gelten: $f(\hat{p}, \hat{q}) = H(\hat{q}, \hat{p})$, damit die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen in der Form der klassischen Hamiltonschen Bewegungsgleichungen geschrieben werden können.⁶

Eine wichtige Anwendung der Vertauschungsrelationen (6.11) und (6.13) sind die Formeln

$$be^{\alpha b^+} - e^{\alpha b^+}b = \alpha e^{\alpha b^+}, \quad e^{\alpha b}b^+ - b^+e^{\alpha b} = \alpha e^{\alpha b} \quad (6.15)$$

Wir werden sie bei der Konstruktion der kohärenten Zustände im § 6.2.2 benutzen.

Aufgabe: Zeigen Sie, dass beim harmonischen Oszillator die Forderung der Hermitesierung zum Ziel führt! Hinweis: Faktorisieren Sie zuerst die klassische Hamiltonfunktion wie im § 3.4.3!

Aufgabe: Wenden Sie die Operator-Gleichungen (6.15) auf die Zustände $|0\rangle$ bzw. $\langle 0|$ an und diskutieren Sie die Ergebnisse!

6.1.4 Der abstrakte harmonische Oszillator

Wir kehren zu unserem Ausgangspunkt zurück und fassen die obigen Ergebnisse zusammen.

Die Leiteroperatoren (6.1) erlauben eine neue Darstellung des Hamiltonians für den harmonischen Oszillator⁷:

⁶ Weyl (*Gruppentheorie und Quantenmechanik*, 1928, § IV.14) betrachtet die Gln.(6.14) als Vorschrift dafür, wie man auf *eindeutige* Weise aus der klassischen Funktion $f^{kl}(p, q)$ die quantenmechanische Operator-Funktion $f^{qu}(\hat{p}, \hat{q})$ konstruiert. Born & Jordan (*Zur Quantenmechanik*, 1925) sowie Born, Heisenberg & Jordan (*Über Quantenmechanik II*, 1926) fordern die Hermitesierung bzw. Symmetrisierung (die Weyl-Ordnung von Operatoren) als eindeutige Vorschrift. Greiner & Reinhardt (*Feldquantisierung*, 1993, Beispiel 11.2) bezeichnen die Weyl-Ordnung als „die ‚natürlichste‘, zumindest am wenigsten willkürliche Quantisierungsvorschrift“. Schrödinger (*Über das Verhältnis . . .*, 1926, S.744ff.) schlussfolgert, dass es eine eindeutige Vorschrift nicht gibt. Nach Heisenberg (*Die physikalischen Prinzipien . . .*, 1929, S.107) muss letztlich die Erfahrung entscheiden, welche Reihenfolge der Operatoren die korrekte ist.

⁷ Überraschend hieran ist eigentlich „nur“, dass die Leiteroperatoren mit den faktorisierenden Operatoren übereinstimmen – weitergehende Untersuchungen in dieser Richtung führen zur sogenannten supersymmetrischen Quantenmechanik, auf die wir hier aber nur hinweisen können, siehe z. B. Schwabl, *QM I*, Kap.19.

$$\hat{H} = H(\hat{q}, \hat{p}) = \tilde{H}(\hat{b}, \hat{b}^+) = \hbar\omega \left(\hat{b}^+ \hat{b} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) \quad (6.16)$$

Die stationären Wellenfunktionen lauten in dieser Darstellung

$$|n\rangle; \quad \psi_n(x) = \langle x|n\rangle; \quad \phi_n(p) = \langle p|n\rangle; \quad n = 0, 1, \dots \quad (6.17)$$

Sie sind offensichtlich zugleich Eigenfunktionen des Besetzungszahloperators \hat{n} :

$$\hat{n} |n\rangle \equiv \hat{b}^+ \hat{b} |n\rangle = n |n\rangle; \quad n = 0, 1, \dots \quad (6.18)$$

Die Besetzungszahl n bedeutet die *Besetzung des Systems* Oszillator mit n Energiequanten $\hbar\omega$.

Damit haben wir die *Besetzungszahldarstellung* des harmonischen Oszillators entwickelt. Sie ist *unabhängig* davon, ob für die Operatoren \hat{x} und \hat{p} die Orts- oder die Impulsdarstellung verwendet wird, sie bildet deshalb eine *eigenständige* Darstellung. Gleichzeitig ist diese Darstellung eine anschauliche Bestätigung der Heisenbergschen (1929) Auffassung, dass es nicht um „Welle ODER Teilchen“, sondern um „Welle UND Teilchen“ geht, bzw., um mit de Broglie (1966) zu sprechen, um die *Synthese* von Wellen- und Teilchenbild.

Diese Einheit zeigt sich auch im Schwankungsquadrat der Strahlungsenergie als Summe von „Wellen-“ und „Teilchen-Beitrag“ (vgl. Einstein, 1909). Diese Darstellung bedeutet deshalb auch nicht, dass ein Teilchen zuerst in dem einen Zustand vernichtet und danach in dem anderen Zustand erzeugt wird [dies würde an die Transkreation in der Bewegungsauffassung erinnern, die Leibniz (*Pacidius Philalethi*) entwickelt hat, um der Kontinuität (!) Genüge zu tun]. Vielmehr garantiert die Überlappung der Wellenfunktionen in dem dazugehörigen Übergangs-Matrixelement die Kontinuität dieses Überganges (Schrödinger, *Dritte Mitteilung*, S.465).

*Aufgabe**: Finden Sie eine (heuristische) Regel, um klassische Produkte wie in Gl. (4.137) zu quantisieren!

6.1.5 Die Bra-Ket-Darstellung

Eine wichtige Variante der Besetzungszahldarstellung besteht in der Darstellung nicht nur der Zustände, sondern auch der Operatoren mit Hilfe der Bra- und Ket-Vektoren. Dazu schreiben wir den Einheitsoperator im Fock-Raum (das ist derjenige Operator \hat{I} , für den für alle n $\hat{I} |n\rangle = |n\rangle$ gilt) als

$$\hat{I} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|$$

Jeder Operator im Fock-Raum besitzt dann die Darstellung

$$O(b, b^+) = \bar{O} \equiv \hat{I} \cdot O(b, b^+) \cdot \hat{I} = \sum_{m,n=0}^{\infty} |m\rangle O_{mn} \langle n|;$$

$$O_{mn} \equiv \langle m | O(b, b^+) | n \rangle$$

Die Matrixelemente mit den allgemeinen Zuständen

$$|\Phi_i\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^{(i)} |n\rangle; \quad i = 1, 2, \dots$$

schreiben sich einfach (wir empfehlen das Nachrechnen als Übung)

$$\langle \Phi_1 | O(b, b^+) | \Phi_2 \rangle = \sum_{m,n=0}^{\infty} \bar{c}_m^{(1)} O_{mn} c_n^{(2)}$$

Für den Hamiltonian des harmonischen Oszillators erhalten wir den Ausdruck

$$\tilde{H} \equiv \hat{I} \cdot \tilde{H}(b, b^+) \cdot \hat{I} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle E_n \langle n|;$$

$$E_n = H_{nn} \equiv \left\langle n \left| \tilde{H}(b, b^+) \right| n \right\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (6.19)$$

Wir werden dies die Bra-Ket-Darstellung nennen. Sie bildet die einheitliche Form, in der auch Fermionen dargestellt werden können.

6.1.6 Gleiche Oszillatoren in Besetzungszahl-Darstellung

Gemäß den Vertauschungsrelationen (5.10) sind alle zu *verschiedenen* Teilsystemen oder Freiheitsgraden gehörenden dynamischen Variablen vertauschbar:

$$\hat{q}_1 \hat{q}_2 - \hat{q}_2 \hat{q}_1 = \hat{q}_1 \hat{p}_2 - \hat{p}_2 \hat{q}_1 = \hat{p}_1 \hat{p}_2 - \hat{p}_2 \hat{p}_1 = \hat{p}_1 \hat{q}_2 - \hat{q}_2 \hat{p}_1 = 0 \quad (6.20)$$

Dem entspricht die Vertauschbarkeit der zu verschiedenen Teilsystemen oder Freiheitsgraden gehörenden Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren:

$$b_i b_j^+ - b_j^+ b_i = b_i b_j - b_j b_i = b_i^+ b_j^+ - b_i^+ b_i = 0; \quad i \neq j \quad (6.21)$$

Aus Kontinuitätsgründen gilt dies unabhängig davon, ob die Teilsysteme miteinander wechselwirken oder nicht.

Im Rahmen der Matrizenmechanik ist es übrigens durchaus nicht trivial, derartige Beziehungen abzuleiten.

Wenn wir die Wellenfunktion (5.18) in der Form

$$\psi_E^+ = \sum_{w_1, w_2} \sum_{n_1, n_2=0}^{\infty} c_{w_1, w_2}^{(n_1, n_2)} (b_{w_1}^+)^{n_1} (b_{w_2}^+)^{n_2} |0, 0\rangle; \quad c_{w_2, w_1}^{(n_2, n_1)} = c_{w_1, w_2}^{(n_1, n_2)} \quad (6.22)$$

schreiben (der Vektor $|n_1, n_2\rangle$ beschreibt die Besetzung der beiden Subsysteme), besitzt sie kraft der Vertauschungsrelation (6.21) *automatisch* die korrekte Permutations-Symmetrie (Jordan & Klein, *Zum Mehrkörperproblem der Quantentheorie*, 1927). Im Rahmen der 1. Quantisierung muss diese Eigenschaft konstruktiv hergestellt werden (siehe § 5.1.3) und führt zu formal viel komplexeren Rechenwegen (vgl. Born & Jordan, *Zur Quantenmechanik*, 1925).

6.2 Kohärente Zustände I

Als erste Anwendung des Apparates der Besetzungszahl-Darstellung betrachten wir spezielle Überlagerungen von Teilchenzahl-Zuständen $|n\rangle$, die in hoch aktuellen Gebieten nicht nur der Festkörpertheorie, sondern auch der Quantenoptik benutzt werden.

6.2.1 Die kohärente Überlagerung von Besetzungszahl-Zuständen

Im allgemeinen ist der Hamiltonian $\tilde{H}(b^+, b)$ *nicht*-diagonal in der Besetzungszahl-Darstellung. Seine Eigenfunktionen⁸ $|\psi\rangle$ sind deshalb keine Eigenfunktionen $(|n\rangle)$ des Besetzungszahloperators \hat{n} . Sie lassen sich aber stets als Linearkombination derselben schreiben:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} A_n e^{i\varphi_n} |n\rangle; \quad \sum_{n=0}^{\infty} A_n^2 = 1 \quad (6.23)$$

Die Amplituden A_n und Phasen φ_n werden aus der Schrödinger-Gleichung berechnet. Ein solcher Zustand besitzt offenbar keine bestimmte (ganzzahlige)

Besetzungszahl: $\langle\psi|\hat{n}|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n A_n^2$.

Wenn die Phasen φ_n unabhängig voneinander sind, spricht man von einer *inkohärenten* Überlagerung der einzelnen Funktionen (Zustände) $|n\rangle$, und die Phase der Funktion $|\psi\rangle$ ist in demselben Sinne unbestimmt wie die Besetzungszahl. Infolge der Zufälligkeit der Phasen verschwindet das Diagonalmatrixelement des Ortsoperators:

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\kappa}} \sum_{n=0}^{\infty} A_n A_{n+1} \sqrt{n+1} \cos(\varphi_{n+1} - \varphi_n) = 0 \quad (6.24)$$

Von besonderer Bedeutung sind nun diejenigen Zustände, bei denen die einzelnen Phasen φ_n nicht unabhängig voneinander sind, sondern in einer festen Beziehung zueinander stehen; sie werden kohärente Zustände genannt.

⁸ Nach den Ausführungen im Abschn. 4.3 können wir die bequemen Begriffe Eigenfunktion und Eigenwerte benutzen, ohne die dort erörterten Vorbehalte gegen sie außer Kraft zu setzen. Wir werden außerdem die verbreitete verkürzte Bezeichnung „Zustand $|\psi\rangle$ “ für die Wellenfunktion ψ dieses Zustandes verwenden.

Derartige Zustände treten unter anderem in der Quantenoptik und bei strukturellen Phasenübergängen von Kristallen auf (siehe § 6.3.3). Sie sind durch die experimentelle Verwirklichung der Bose-Einstein-Kondensation von atomaren Gasen (siehe § 6.3.3) vor kurzem wieder spektakulär in Erscheinung getreten.

Als elementares Beispiel nehmen wir an, dass die Phasen der Beziehung

$$\varphi_n = n\varphi \quad (6.25)$$

unterliegen. Das ergibt den kohärenten Zustand

$$|\Phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} A_n e^{in\varphi} |n\rangle; \quad \sum_{n=0}^{\infty} A_n^2 = 1 \quad (6.26)$$

In einem kohärenten Zustand ist das Diagonal-Matrixelement des Ortoperators *endlich*; im Zustand (6.26) ist

$$\langle\Phi|\hat{x}|\Phi\rangle = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\kappa}} \cos(\varphi) \sum_{n=0}^{\infty} A_n A_{n+1} \sqrt{n+1} \neq 0 \quad (6.27)$$

Dieser Wert lässt sich zum Beispiel als kollektive Verschiebung kristalliner Untergitter gegeneinander interpretieren.

*Aufgabe**: Wo stecken die Randbedingungen in der Bra-Ket-Darstellung?

*Aufgabe**: Begründen Sie die Bezeichnung „optische Trompete“ (Scharf, 1994, §5.5) für den Laser!

6.2.2 Die Eigenzustände der Operatoren b und b^+

Von grundlegender Bedeutung für die Theorie der kohärenten Zustände sind die *Schrödinger-Glauber-Zustände*⁹. Ihre Bedeutung erwächst aus ihrer Eigenschaft, der Ket-Eigenzustand des Operators b zu sein. Denn es gilt für die Symmetrieeigenschaften von Systemen und Darstellungen die

⁹ Schrödinger, *Der stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik*, 1926; Roy J. Glauber (*1925, Nobelpreis 2005), *The Quantum Theory of Optical Coherence*, 1963; *Coherent and Incoherent States of the Radiation Field*, 1963. - S. auch Kennard, *Zur Quantenmechanik einfacher Bewegungstypen*, 1927; Klauder, *The action option and a Feynman quantization of spinor fields in terms of ordinary c-numbers*, 1960; Carruthers & Nieto, *Coherent States and the Forced Quantum Oscillator*, 1965; Klauder & Sudarshan, *Fundamentals of Quantum Optics*, 1968; Perelomov, *Generalized Coherent States and Their Applications*, 1986. – Zur analogen Entwicklung durch V. Bargmann und I. Segal auf der Grundlage der Operatoren z und d/dz , die die gleichen Vertauschungsrelationen erfüllen wie b und b^+ (Fock, 1928), siehe Hall, *Holomorphic methods in analysis and mathematical physics*, 1999.

Regel: Eine bestimmte Darstellung ist für die Beschreibung derjenigen Zustände besonders geeignet, die deren oder eine ähnliche Symmetrie besitzen.

Aus den Vertauschungsrelationen (6.15) folgen die Formeln

$$be^{\bar{\alpha}b^+}|0\rangle = \bar{\alpha}e^{\bar{\alpha}b^+}|0\rangle; \quad \langle 0|e^{\alpha b}b^+ = \langle 0|e^{\alpha b}\alpha \quad (6.28)$$

Daraus ergeben sich die normierten Ket-(Bra-)Eigenzustände von b bzw. b^+ zu

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}e^{\alpha b^+}|0\rangle; \quad \langle\alpha| = \langle 0|e^{\alpha b}e^{-|\alpha|^2/2}; \quad \langle\alpha|\alpha\rangle = 1 \quad (6.29)$$

Der zunächst freie Parameter α wird sich sogleich als Maß für die Verschiebung von Schwingungsmittelpunkt und Nullpunkts-Energie eines Oszillators unter dem Einfluss eines linearen externen Potenzials erweisen.

Aufgabe:

- A) Geben Sie Beispiele für ein solches Potenzial an! Hinweis: Was für eine Kraft bzw. Feldstärke gehört zu einem konstanten klassischen Potenzial?
- B) Betrachten Sie den harmonischen Oszillator unter dem Einfluss einer solchen Kraft! Wie hängt α von den Parametern dieser Kraft ab? Hinweis: Greiner & Reinhardt, *Feldquantisierung*, 1993, S.24ff.

Aufgabe: Berechnen Sie den Normierungsfaktor, $\exp\{-\frac{1}{2}\alpha^2\}$!

Aufgabe: Diskutieren Sie die Planeten-Bahnen nach Kepler als Beispiel für die obige Regel! Hinweis: Vergleichen Sie sie mit den ptolemäischen und den kopernikanischen Darstellungen der Planeten-Bewegung!

6.2.3 Der verschobene harmonische Oszillator als Prototyp für Elementaranregungen

Aus den Vertauschungsrelationen (6.15) erhalten wir außerdem sogenannte *Verschiebungsoperatoren*:

$$e^{-\alpha b^+}be^{\alpha b^+} = b + \alpha; \quad e^{\alpha b}b^+e^{-\alpha b} = b^+ + \alpha \quad (6.30)$$

Für die weiteren Rechnungen ist es vorteilhaft, die linken Seiten als unitäre und kanonische Transformation¹⁰ zu schreiben:

$$\hat{U}_\alpha = e^{-|\alpha|^2}e^{\bar{\alpha}b^+}e^{-\alpha b} = e^{\bar{\alpha}b^+ - \alpha b}; \quad \hat{U}_\alpha^{\pm 1}b^+\hat{U}_\alpha^{\mp 1} = b_{\pm\alpha}^\pm = b^\pm \mp \alpha \quad (6.31)$$

¹⁰ Eine unitäre Transformation U lässt die Norm unverändert: $\langle U\psi|U\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$, eine kanonische Transformation K lässt die Vertauschungsrelation unverändert: $[KbK^{-1}, Kb^+K^{-1}] = [b, b^+]$; für den allgemeinen Fall siehe Tjablikow, *Quantentheorie des Magnetismus*, 1968, §13, und dort zitierte Literatur.

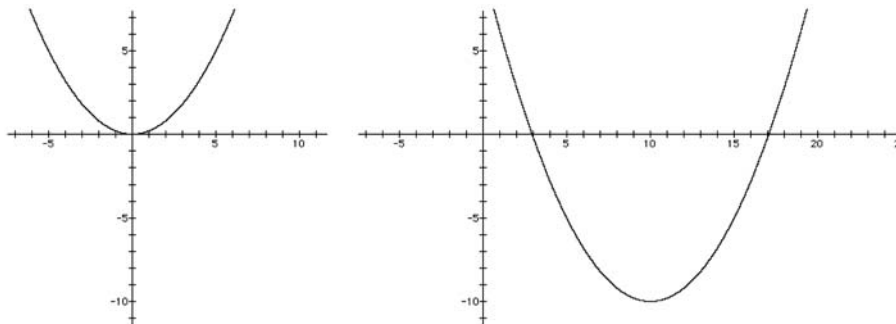


Abb. 6.1. „Unverschobenes“ (*links*) und „verschobenes“ (*rechts*) Oszillatorpotential (s. Text)

Mit ihrer Hilfe sieht man sofort, dass zu den kohärenten Zuständen ein nicht-verschwindendes Diagonal-Matrixelement des Ortsoperators gehört [vergleiche Formel (6.27) und Abb. 6.1]:

$$\langle \alpha | \xi | \alpha \rangle = \left\langle 0 \left| U_{\alpha}^{\dagger} \frac{b + b^{\dagger}}{\sqrt{2}} U_{\alpha} \right| 0 \right\rangle = \left\langle 0 \left| \frac{b + \alpha + b^{\dagger} + \alpha}{\sqrt{2}} \right| 0 \right\rangle = \sqrt{2} \alpha \quad (6.32)$$

Das Diagonal-Matrixelement des Impulsoperators verschwindet dagegen nach wie vor:

$$\langle \alpha | \hat{p}_{\xi} | \alpha \rangle = \left\langle 0 \left| U_{\alpha}^{\dagger} \frac{b - b^{\dagger}}{\sqrt{2}} U_{\alpha} \right| 0 \right\rangle = \left\langle 0 \left| \frac{b + \alpha - b^{\dagger} - \alpha}{\sqrt{2}} \right| 0 \right\rangle = 0 \quad (6.33)$$

Das Diagonal-Matrixelement des Anzahloperators von Schwingungsquanten ist

$$\langle \alpha | \hat{n} | \alpha \rangle = \langle \alpha | b^{\dagger} b | \alpha \rangle = \alpha^2 \quad (6.34)$$

Daraus folgt die Energie im kohärenten Zustand α zu

$$E_{\alpha} = \langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle = \left(\langle \alpha | \hat{n} | \alpha \rangle + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega = \left(\alpha^2 + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (6.35)$$

Sie ist gegenüber dem Grundzustand E_0 um $\alpha^2 \hbar \omega$ angehoben – der Energienullpunkt ist um diesen Betrag abgesenkt (vergleiche Abb. 6.1).

Für das Quadrat des Ortsoperators ergibt sich der Wert

$$\langle \alpha | \xi^2 | \alpha \rangle = \frac{1}{2} \langle 0 | U_{\alpha}^{\dagger} (b^2 + 1 + 2b^{\dagger} b + b^{\dagger 2}) U_{\alpha} | 0 \rangle = \frac{1}{2} + 2\alpha^2 \quad (6.36)$$

Demzufolge gilt für sein Schwankungsquadrat¹¹

¹¹ Die Größe $\langle \alpha | \Delta \xi^2 | \alpha \rangle^{1/2}$ wird im Rahmen der statistischen Interpretation der Quantenmechanik (Heisenberg, *Über den anschaulichen Inhalt der quantentheo-*

$$\langle \alpha | \Delta \xi^2 | \alpha \rangle \equiv \langle \alpha | (\xi - \langle \alpha | \xi | \alpha \rangle)^2 | \alpha \rangle = \langle \alpha | \xi^2 | \alpha \rangle - \langle \alpha | \xi | \alpha \rangle^2 = \frac{1}{2} \quad (6.37)$$

Auf analoge Weise erhält man für das Impulsquadrat

$$\langle \alpha | p_\xi^2 | \alpha \rangle = -\frac{1}{2} \langle \alpha | b^2 - 1 - 2b^+ b + b^{+2} | \alpha \rangle = -\frac{1}{2} (\alpha^2 - 1 - 2\alpha^2 + \alpha^2) = \frac{1}{2} \quad (6.38)$$

und für dessen Schwankungsquadrat

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \Delta p_\xi^2 | \alpha \rangle &\equiv \langle \alpha | (p_\xi - \langle \alpha | p_\xi | \alpha \rangle)^2 | \alpha \rangle \\ &= \langle \alpha | p_\xi^2 | \alpha \rangle - \langle \alpha | p_\xi | \alpha \rangle^2 = \frac{1}{2} = \langle \alpha | \Delta \xi^2 | \alpha \rangle \end{aligned} \quad (6.39)$$

Die Formeln (6.37) und (6.39) beschreiben eine minimale Unschärfe, das heißt maximale Kompaktheit des Wellenpaketes des kohärenten Zustandes. Mithin besitzt dieser die größte Nähe zum klassischen Fall, und dies unabhängig vom Wert von α !

Das bedeutet, dass auch im nichtstationären Fall, wenn $\alpha = \alpha(t)$ zeitabhängig ist (siehe § 6.2.4), die Wellenfunktion nicht „auseinander läuft“ – die Konstruktion genau dieser Eigenschaft war Schrödingers Ziel gewesen.

Die Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren für den verschobenen harmonischen Oszillator lauten also

$$b_\alpha = b - \alpha; \quad b_\alpha^+ = b^+ - \alpha^*; \quad b_\alpha \cdot b_\alpha^+ - b_\alpha^+ \cdot b_\alpha = 1 \quad (6.40)$$

$$b_\alpha | \alpha \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad | \alpha \rangle \equiv | 0_\alpha \rangle \quad (6.41)$$

$| 0_\alpha \rangle$ ist der Grundzustand des verschobenen harmonischen Oszillators.

In der Ortsdarstellung erhalten wir den verschobenen Grundzustand zu

$$\begin{aligned} (b - \alpha) | \alpha \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{d\xi} + \xi - \sqrt{2}\alpha \right) \psi_\alpha(\xi) = 0; \\ \psi_\alpha(\xi) &= \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}(\xi - \langle \alpha | \xi | \alpha \rangle)^2} \end{aligned} \quad (6.42)$$

Und auch die angeregten Zustände ergeben sich analog zum unverschobenen Oszillator:

$$| n_\alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (b_\alpha^+)^n | 0_\alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (b^+ - \alpha)^n | \alpha \rangle \quad (6.43)$$

retischen Kinematik und Mechanik, 1927; Dirac, *The physical interpretation of the quantum mechanics*, 1927; Jordan, *Über eine neue Begründung der Quantenmechanik*, 1927; Bohr, *Das Quantenpostulat und die neuere Entwicklung der Atomistik*, 1928) als Schwankung der Größe ξ um ihren Erwartungswert $\langle \alpha | \xi | \alpha \rangle$ betrachtet.

Der verschobene harmonische Oszillator erweist sich als ein einfaches, doch aussagekräftiges Modell für elementare Anregungen in Festkörpern, z. B. Farbzentren (Haken, 1973, Fig.15) und strukturelle Phasenübergänge (siehe § 6.6.3 unten).

6.2.4 Dynamik des verschobenen harmonischen Oszillators *

Wir wollen nun zwei Beispiele zur Dynamik des verschobenen harmonischen Oszillators anhand der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hbar\omega_i (b^+b - \gamma(t) \cdot b - \gamma(t)^* \cdot b^+) |\psi\rangle \quad (6.44)$$

betrachten. Die skalare Funktion $\gamma(t)$ möge eine äußere Einwirkung auf die Oszillatorkoordinate beschreiben [vergleiche die Hamilton-Funktion (3.25)]; diese Einwirkung wird hier *halbklassisch* behandelt.

Für die Anregung aus dem Grundzustand $|\psi(t=0)\rangle = |n=0\rangle$ lautet die normierte (!) Lösung dieser Gleichung (vgl. Haken, 1973, Aufgabe 4.6)

$$|\psi(t)\rangle = e^{i f(t)} e^{-\frac{1}{2}|g(t)|^2 + g(t)b^+} |0\rangle; \quad t \geq 0 \quad (6.45)$$

mit

$$g(t) = e^{-i\omega_i t} \int_0^t e^{i\omega_i t'} i\omega_i \bar{\gamma}(t') dt'; \quad f(t) = \omega_i \int_0^t \text{Re} \{ \gamma(t') g(t') \} dt' \quad (6.46)$$

Der Schwingungsmittelpunkt bewegt sich gemäß Gleichung (6.32) wie

$$\langle \xi \rangle(t) \equiv \langle \psi(t) | \xi | \psi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{Re} \{ g(t) \} \quad (6.47)$$

Hieraus folgt, dass ein Quantenoszillator ganz anders als ein klassischer Oszillator reagiert, wenn γ von Null auf $\gamma_0 = \text{const}$ springt. Während dieser lediglich seinen Schwingungsmittelpunktes verschiebt (siehe § 3.1.3), reagiert jener oszillierend:

$$g(t) = \gamma_0 (1 - e^{-i\omega_i t}); \quad \langle \xi \rangle(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \gamma_0 [1 - \cos(\omega_i t)] \quad (6.48)$$

Ist die äußere Einwirkung oszillierend: $\gamma(t) = \gamma_0 \sin(\omega_e t)$, zeigt der Quantenoszillator *Resonanz & Schwebung* wie ein klassischer Oszillator¹²

$$\langle \xi \rangle(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\gamma_0 \omega_i^2}{\omega_i^2 - \omega_e^2} \left[\sin(\omega_e t) - \frac{\omega_e}{\omega_i} \sin(\omega_i t) \right] \quad (6.49)$$

¹² Vgl. Husimi, 1953 (zit. nach Kuhn & Strnad, *Quantenfeldtheorie*, 1995, S.66).

Für die Anregung aus dem Grundzustand $E = 0$ erhalten wir nämlich für den klassischen Oszillator aus der allgemeinen Lösung (3.24) die ganz analoge Reaktion

$$x(t) = \frac{K_e/m}{\omega_i^2 - \omega_e^2} \left[\sin(\omega_e t) - \frac{\omega_e}{\omega_i} \sin(\omega_i t) \right] \quad (6.50)$$

Diese Ähnlichkeit suggeriert, dass der Quantenoszillator im Grundzustand $E = \frac{1}{2} \hbar \omega_{(i)} > 0$ Schwingungen mit der Frequenz ω_i ausführt, die aber erst bei äußerer Anregung zutage treten.

Die Schrödinger-Glauber-Zustände lassen sich zu den sogenannten gequetschten Zuständen verallgemeinern.¹³ In ihnen ist zwar das Produkt aus den Schwankungsquadraten (6.37) und (6.39) ebenfalls minimal, doch sind die Einzelwerte nicht mehr gleich und möglicherweise zeitabhängig. Für diese Zustände gibt es kein klassisches Analogon, bei Photonen spricht man deshalb von nichtklassischem Licht.

6.3 Beispiel: Gekoppelte gleichartige quantenmechanische Pendel – Phononen

Der Erfolg des Einsteinschen Modells der Gitterschwingungen zeigt, dass man diese als gekoppelte Quantenoszillatoren betrachten kann. Für eine quantitative Theorie reicht es jedoch nicht, die Gesamtheit der Gitterschwingungen in einer räumlich gemittelten Zustandsdichte zu erfassen, sondern man muss die mikroskopische Gitterstruktur einbeziehen und jede Schwingung einzeln berücksichtigen. Die Gesamtheit der quantisierten Normalschwingungen verhält sich thermodynamisch wie ein ideales Bose-Gas von Phononen („Schallteilchen“).¹⁴

6.3.1 Quantisierung der Gitterschwingungen

Durch die Normalmoden-Entwicklung (3.32) werden die Gitterschwingungen entkoppelt. Jede Normalmode stellt einen einzelnen harmonischen Oszillator dar, auf den wir die quantenmechanische Beschreibung des Kapitels 4 sofort anwenden können. Die Operatoren der 1. Quantisierung werden nach dem oben Gesagten aber nicht den Variablen $\{q_l\}$ und $\{p_l\}$ der Gitterbausteine, sondern den Normalmoden-Variablen $\{Q_j\}$ und $\{P_j\}$ zugeordnet:

¹³ Stoler, *Equivalence classes of minimum uncertainty packets*, 1970 (nach Kuhn & Strnad, 1995, S.66).

¹⁴ Siehe z. B. Schnakenberg, *Thermodynamik und Statistische Physik*, 2002, Abschn. 17.3. – Zur allgemeinen Theorie des Bose-Gases und seiner Elementaranregungen siehe die Pionierarbeit von Bogoljubow, *On the theory of superfluidity*, 1947, sowie z. B. Schwabl, *QM II*, Abschn. 3.2.

$Q_j \rightarrow \hat{Q}_j :$

$$\hat{Q}_j \psi_j(Q_j) = Q_j \psi_j(Q_j); \quad \hat{Q}_j \phi_j(P_j) = i\hbar \frac{\partial \phi_j(P_j)}{\partial P_j} \quad (6.51)$$

$P_j \rightarrow \hat{P}_j :$

$$\hat{P}_j \psi_j(Q_j) = -i\hbar \frac{\partial \psi_j(Q_j)}{\partial Q_j}; \quad \hat{P}_j \phi_j(P_j) = P_j \phi_j(P_j) \quad (6.52)$$

Die Hamilton-Funktionen (3.33) werden durch Hamilton-Operatoren ersetzt, und in der Ortsdarstellung lauten die N Schrödinger-Gleichungen

$$\hat{H}_j(Q_j) \psi_j(Q_j) = -\frac{1}{2M} \frac{\partial^2 \psi_j(Q_j)}{\partial Q_j^2} + \frac{\kappa_j}{2M} Q_j^2 \psi_j(Q_j) = E_j \psi_j(Q_j);$$

$$j = 0, \dots, N-1 \quad (6.53)$$

Für das Gesamtsystem erhalten wir die Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}(\{Q_j\}) \psi(\{Q_j\}) = E \psi(\{Q_j\}) \quad (6.54)$$

mit

$$\hat{H}(\{Q_j\}) = \sum_{j=0}^{N-1} \hat{H}_j(Q_j); \quad \psi(\{Q_j\}) = \prod_{j=0}^{N-1} \psi_j(Q_j); \quad (6.55)$$

$$E = \sum_{j=0}^{N-1} E_j; \quad E_j = E_{j;n_j} = \left(n_j + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_j \quad (6.56)$$

Die Energiequanten $\hbar \omega_j$ werden *Phononen* („Schall-Teilchen“) genannt.

Wir vernachlässigen hier die Permutationssymmetrie der Wellenfunktion, da wir sie gleich durch die Vertauschungsrelationen der Operatoren herstellen werden.

Schließlich ordnen wir den Orts- und Impulsoperatoren Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren zu:

$$\hat{Q}_j = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_j}} (b_j^+ + b_j);$$

$$\hat{P}_j = i\sqrt{\frac{\hbar M\omega_j}{2}} (b_j^+ - b_j); \quad b_j b_{j'}^+ - b_{j'}^+ b_j = \delta_{jj'} \quad (6.57)$$

Mit ihnen lautet der Gesamt-Hamilton-Operator in der *Besetzungszahldarstellung*

$$\hat{H} = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\hbar \omega_j}{2} (b_j b_j^+ + b_j^+ b_j) = \sum_{j=0}^{N-1} \hbar \omega_j \left(b_j^+ b_j + \frac{1}{2}\right) \quad (6.58)$$

Es ist nun üblich, weil zweckmäßig, die Moden nicht mit ihren nicht ganz eindeutigen Nummern j , sondern mit ihren eindeutigen Wellenzahlen w zu nummerieren:

$$\hat{H} = \sum_{w=w_1}^{w_N} \hbar \omega_w \left(b_w^\dagger b_w + \frac{1}{2} \right); \quad \omega_w = \sqrt{\frac{4\kappa}{M}} \left| \sin \left(\frac{wa}{2} \right) \right| \quad (6.59)$$

Die hierzu gehörenden N -Oszillator-Wellenfunktionen sind – wie in Gleichung (6.55) – Produkte von N Ein-Oszillator-Wellenfunktionen:

$$|\{n_w\}\rangle = |n_{w_1}\rangle |n_{w_2}\rangle \cdots |n_{w_N}\rangle \quad (6.60)$$

Damit sind die Grundlagen der quantenfeldtheoretischen Behandlung der Gitterschwingungen gelegt. Im dreidimensionalen Fall werden alle geometrischen Variablen (Auslenkung, Impuls, Wellenzahl) zu Vektoren; bei $r > 1$ Atomen pro Einheitszelle treten neben den oben behandelten akustischen noch $r - 1$ optische Schwingungszweige auf. Jede weitere Normalmode ist unabhängig von den übrigen und wird einfach zum Hamiltonian hinzugefügt. Erweiterungen dieses Formalismus betreffen insbesondere nichtlineare Effekte, d. h. die Wechselwirkung der Phononen untereinander und mit anderen Quasiteilchen. Hier kommt die Leistungsfähigkeit der Quantenfeldtheorie erst voll zum Tragen, wie wir an einer Reihe von Beispielen sehen werden.

Aufgabe: Zeigen Sie, dass man zu (6.51) auch durch eine kanonische und eine unitäre Transformation der Operatoren \hat{q}_l und \hat{p}_l gelangen kann (Harrison, 1980, S.407ff.)!

6.3.2 Phononen als einfachste Quasiteilchen

It is not possible to deduce the existence of quasiparticles from first principles.

(R. B. Laughlin, 1998¹⁵)

Ein makroskopischer Kristall besteht aus größenordnungsmäßig $N_A \approx 6 \times 10^{23}$ Atomkernen plus Elektronen (N_A ist die Avogadrosche Zahl¹⁶, die Anzahl der Moleküle in einem Mol). Die Berechnung seiner Eigenschaften im Rahmen einer atomistischen Quantentheorie müsste die Schrödinger-Gleichung für etwa 10^{24} „Teilchen“ lösen, was auf absehbare Zeit undurchführbar ist. Die Quantenfeldtheorie des Festkörpers beschreitet einen Mittelweg zwischen der (nicht verfügbaren) exakten Lösung und stark vereinfachten, exakt lösbaeren Modellen: Der Grundzustand wird als bekannt vorausgesetzt, so dass man sich auf die *relativen* Zustandsänderungen zu den sogenannten *Anregungszuständen*

¹⁵ Robert B. Laughlin (*1950, Nobelpreis 1998), *Fractional Quantization*, 1998, S.265.

¹⁶ Lorenzo Romano Amadeo Carlo Avogadro [Conte] di Quaregna e Ceretto (1776–1856), *Essai d'une manière de déterminer les masses relatives des molécules élémentaires des corps*, 1811.

konzentrieren kann. Die grundlegenden Anregungen eines Systems heißen *Elementaranregungen* – die diesen zugeordneten Teilchen *Quasiteilchen*. Zu ihnen gehören das im Abschnitt 4.6 behandelte Bloch-Elektron und die Phononen. Die Wechselwirkung zwischen ihnen führt zu neuen Elementaranregungen mit *qualitativ neuen* Eigenschaften, wie das Exciton (siehe §§ 8.5.5 und 8.5.7) und das Polaron (vgl. § 8.7.4). Bei der Behandlung derartiger Wechselwirkungen kommt die Leistungsfähigkeit der Quantenfeldtheorie – und mit ihr die Besetzungszahldarstellung – erst richtig zum Tragen, wie wir nicht zuletzt am Beispiel des excitonischen Polaritons im § 8.8.5 sehen werden.

In diesem Sinne mag man das Photon als elementare Anregung des „Vakuums“ ansehen.

Quasiteilchen sind also keine Teilchen, die – wie etwa Elektronen und Photonen – auch in freier Form vorkommen, sondern elementare (weil nicht weiter zerlegbare) Anregungen eines Systems aus vielen miteinander wechselwirkenden Teilchen (Kaganow, *Was sind Quasiteilchen?*, 1973). Ihr Name stammt daher, dass sie in gewissem Grade wie einzelne Teilchen behandelt werden können. Sie repräsentieren jedoch *kollektive* Eigenschaften des Gesamtsystems. Wir wollen dieses außerordentlich fruchtbare Konzept am Beispiel der Phononen illustrieren, weil sich hier die Theorie – in harmonischer Näherung – geschlossen exakt durchführen lässt.

Die Idee des Quasiteilchens kann klassisch durch die Debyesche Wolke¹⁷ um ein geladenes Teilchen in einem starken Elektrolyten veranschaulicht werden. Eine solche Polarisationswolke gibt es auch beim Polaron und – in verallgemeinerter Form – im Modell der „angezogenen Zustände“ (*dressed states*¹⁸).

Das Ziel besteht also darin, den Hamiltonian des untersuchten Systems wechselwirkender Teilchen auf den eines einfacheren Systems nicht- oder nur schwach wechselwirkender Teilchen zurückzuführen. Oft gelingt dies, indem man die ursprünglichen Operatoren durch eine Operator-Transformation in neue Operatoren überführt, in denen der – ebenfalls transformierte – Hamiltonian (fast) diagonal ist. Für die Gitterschwingungen ist diese Transformation gerade die auf die Normalkoordinaten.

Die klassische Hamilton-Funktion in kartesischen Koordinaten war (siehe § 3.1.5)

$$H(\{q_l\}, \{p_l\}) = \sum_{l=1}^{N-1} \frac{\kappa}{2} (q_{l+1} - q_l)^2 + \sum_{l=1}^N \frac{1}{2M} p_l^2 \quad (6.61)$$

Der entsprechende Hamilton-Operator in Besetzungszahldarstellung lautet

¹⁷ Peter Joseph Wilhelm Debye, (1884-1966, Nobelpreis 1936), *Polare Molekeln*, 1929. – Vgl. Greiner, *Quantentheorie. Spezielle Kapitel*, 1989, S.247.

¹⁸ Siehe z. B. Cohen-Tannoudji, Dupont-Roc & Grynberg, *Atom-Photon Interactions*, 1992, Kap. IV. – Stefanovich (*Relativistic Quantum Dynamics*, 2004/2005, Abschn. 12.1, 12.3.1) beschreibt hiermit eine weitgehende Beseitigung der Divergenzen der QFT.

$$\hat{H}(\{b_l\}, \{b_l^+\}) = \frac{\hbar}{4} \sqrt{\frac{\kappa}{M}} \sum_{l=1}^{N-1} (b_{l+1}^+ + b_{l+1} - b_l^+ - b_l)^2 - \frac{\hbar}{4} \sqrt{\frac{\kappa}{M}} \sum_{l=1}^N (b_l^+ - b_l)^2 \quad (6.62)$$

Er ist *nicht*diagonal in den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren (b_l^+ , b_l) und beschreibt daher – wie die klassische Hamilton-Funktion (6.61) – ein System aus *wechselwirkenden* Teilchen (Schwingungs-Quanten).

Analog zu den Transformationen (3.32) bringen die Transformationen

$$b_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} b_j \cdot \sin(w_j a l);$$

$$b_l^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} b_j^+ \cdot \sin(w_j a l); \quad l = 1, \dots, N \quad (6.63)$$

den Hamiltonian (6.62) in die *Diagonal*form (6.58). (Die Umkehrung dieser Transformation rechtfertigt die Benutzung der Besetzungszahloperatoren für die *gekoppelten* Gitterschwingungen.) Der Normalmoden-Hamiltonian (6.58) beschreibt daher ein System aus *wechselwirkungsfreien* Quasiteilchen – den Phononen. Deren charakteristische Dispersionsrelation lautet

$$\hbar\omega(w) = \hbar \sqrt{\frac{\kappa}{M}} \left| 2 \sin\left(\frac{1}{2} w a\right) \right|$$

siehe Gleichung (3.34).

6.3.3 Strukturelle Phasenübergänge als Bose-Einstein-Kondensation *

Der experimentelle Nachweis der Bose-Einstein-Kondensation¹⁹ von atomaren Gasen hat in jüngster Vergangenheit zu beträchtlichem Aufsehen in der Fach-

¹⁹ Einstein, *Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. Zweite Abhandlung*, 1925; London, *On the Bose-Einstein condensation*, 1938; Griffin, Snoke & Stringari, *Bose-Einstein condensation*, 1995; Schnakenberg, *Thermodynamik und Statistische Physik*, 2002, Abschn. 17.1. Für neuere experimentelle Ergebnisse siehe z. B. Wieman, *The creation and study of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapour*, 1997; Ketterle, *Experimental studies of Bose-Einstein condensation*, 1999; Donley, Anderson & Wieman, *New Twists in Bose-Einstein Condensation*, 2001; Cornell & Wieman, *Bose-Einstein Condensation in a Dilute Gas; The First 70 Years and Some Recent Experiments*, 2001; Ketterle, *When Atoms Behave as Waves: Bose-Einstein Condensation and the Atom Laser*, 2001; Cornell & Wieman, *Die Bose-Einstein-Kondensation*, 2003; Morsch, *Licht und Materie*, 2003; Collins, *Das kälteste Gas im Universum*, 2003.

welt geführt²⁰. Denn wegen der interatomaren Wechselwirkung müssen hierfür die Atome extrem tief gekühlt und dazu auch von der Außenwelt hinreichend stark abgeschirmt werden; der experimentelle Aufwand ist also beträchtlich. Dagegen ist es nur wenig bekannt, dass sich wichtige Züge der Bose-Einstein-Kondensation an recht elementaren Modellen demonstrieren lassen.²¹ In Analogie zu den Übergängen zwischen den klassischen Aggregatzuständen fest – flüssig – gasförmig spricht man auch hier von Phasenübergängen; im Unterschied zu jenen erfolgt die Kondensation aber nicht im Orts-, sondern im Impuls- beziehungsweise Zustandsraum.

Die Bose-Einstein-Kondensation ist also ein *makroskopischer* Quanteneffekt, nämlich die Besetzung einzelner Quantenzustände durch eine makroskopische Anzahl von Teilchen. Offenbar können dies nur bosonische Zustände sein, denn Fermionen besetzen Zustände, in denen nur für *ein* Teilchen Platz ist. Die mittlere Besetzung gemäß der Bose-Einstein-Statistik [sie unterscheidet sich von der Planckschen Verteilung (7.15) nur durch das chemische Potenzial μ],

$$f_B(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} - 1} \quad (6.64)$$

ist dagegen nach oben unbeschränkt: sie steigt über alle Grenzen, wenn sich die Energie E dem chemischen Potenzial μ nähert. Dem dient die oben erwähnte starke Kühlung. Wenn das chemische Potenzial größer als (gleich) Null ist, ist in oszillatorischen Systemen auch die Energie der Schwingungsmode, die makroskopisch besetzt wird, größer als (gleich) Null, und man nennt diese Schwingungsmode hart (weich). Bekannte Beispiele sind der Laser²² und gewisse strukturelle Phasenübergänge in Kristallen²³.

Dies ist aber nur die *quantenstatistische* Seite der Medaille. Die *quantenmechanische* besteht darin, dass die Wellenfunktionen der Teilchen im Bose-Einstein-Kondensat *kohärent* zueinander sind. Wir zeigen das Grundprinzip anhand des kohärenten Zustandes (6.26), wobei wir annehmen, dass die Phase eine gitterperiodische Welle beschreibt (vgl. Harrison, *Solid State Theory*, 1980, S.412f.):

$$|w\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} A_n e^{inwa} |n\rangle; \quad \sum_{n=0}^{\infty} A_n^2 = 1 \quad (6.65)$$

(a ist wieder die Gitterkonstante, w die Wellenzahl). Die Energie dieser Mode beträgt

²⁰ Er wurde mit der Verleihung des Nobelpreises für Physik für das Jahr 2001 an Eric A. Cornell (*1961), Carl E. Wieman (*1951) und Wolfgang Ketterle (*1957) gewürdigt (siehe www.nobelprize.com).

²¹ Kohn & Sherrington, *Two kinds of bosons and Bose condensation*, 1970.

²² Haken, *Laserstrahlung – ein neues Beispiel für einen Phasenübergang*, 1970.

²³ Cowley, *Structural Phase Transitions. I*, 1980; Cochran, *Soft Modes, A Personal Perspective*, 1981.

$$E_w = \langle w | \hat{H}(\{Q\}) | w \rangle = \hbar\omega \sum_{n=0}^{\infty} A_n^2 \left(n + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \langle w | \hat{n} | w \rangle + \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (6.66)$$

Für große Besetzungszahlen erhält man das gleiche Ergebnis wie im klassischen Fall, in dem Amplitude *und* Phase einer Welle wohldefiniert sind.

Das Diagonal-Matrixelement des Operators der Normalmoden-Amplitude ist in diesem Zustand gemäß Gleichung (6.57) von Null verschieden [siehe auch Gl. (6.27)]:

$$\langle w | \hat{Q}_w | w \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_w}} \langle w | b_w^+ + b_w | w \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{M\omega_w}} \cos(wa) \sum_{n=1}^{\infty} A_{n-1} A_n \sqrt{n} \quad (6.67)$$

Die Beiträge aller Zustände $|n\rangle$ interferieren konstruktiv, so dass sich makroskopische Werte für $\langle w | \hat{Q}_w | w \rangle$ ergeben können. Für ein Gitter heißt dies, dass seine Gitterpunkte l um den Wert $\langle \delta q_l(t) \rangle \sim \delta q(t) \cos(wal)$ verschoben sind. $w = 0$ bedeutet eine Verschiebung des Gitters als Ganzes (das kann im dreidimensionalen Fall auch die Änderung der Winkel betreffen), während bei $w = \pi/a$ benachbarte Gitterpunkte in jeweils entgegengesetzte Richtungen verschoben sind (Dimerisierung). Die Energie (6.66) für diese Verschiebung stammt in Ionenkristallen aus der elektrostatischen Energie des Gitters – in Kristallen mit überwiegender Valenzbindungen aus der elektronischen Bindungsenergie, z. B. bei einem Peierls-Übergang²⁴. Auf letztgenannte Weise lassen sich unter anderem das rhomboedrische Arsen-Gitter der Halbmetalle As, Sb und Bi (Peierls, 1955, § 5.4; Enders, 1984/1985) sowie die ferroelektrischen Phasenübergänge von GeTe und SnTe erklären (Enders, 1984/1985). Hierbei spielt die Elektron-Phonon-Wechselwirkung – namentlich der Peierls-Übergang als Band-Jahn-Teller-Effekt²⁵ – eine entscheidende Rolle; wir werden auf die Elektron-Phonon-Wechselwirkung im Abschn. 8.7 näher eingehen.

Wegen der festen Phasenbeziehung zwischen den Koeffizienten $A_{n-1}e^{i\varphi_{n-1}}$ und $A_n e^{i\varphi_n}$ spricht man in derartigen Fällen auch von *nichtdiagonaler langreichweitiger Ordnung*. Welcher Parameter *Ordnungsparameter* ist, hängt von dem jeweiligen Phänomen und der zugrundeliegenden Wechselwirkung ab; oben ist es die mittlere Gitterverschiebung (bei Übergängen in eine ferroelektrische Phase ist der Ordnungsparameter sowohl durch die Gitterverschiebung, als auch durch die dadurch entstehende permanente Polarisation des Kristalls gegeben). Weitere Beispiele sind

²⁴ Sir Rudolf Ernest Peierls (1907-1995), *Quantum Theory of Solids*, 1955, §§ 5.3f.; Calais, *Is the Peierls Transition a Transition?*, 1977; Burdett & Lee, *Peierls Distortions in Two and Three Dimensions and the Structure of AB Solids*, 1983.

²⁵ Hermann Arthur Jahn & Edward Teller (1908-2003), *Stability of degenerate electronic states in polyatomic molecules I. Orbital degeneracy*, 1937; Jahn, *Stability ... II. Spin degeneracy*, 1938; Teller, *The Jahn-Teller Effect – Its History and Applicability*, 1982; Bersuker (Hrsg.), *The Jahn-Teller-Effect. A Bibliographic Review*, 1984.

- die Supraleitfähigkeit nach der BCS-Theorie²⁶; Ordnungsparameter ist der sogenannte Quasi-Mittelwert²⁷ $\langle \psi_{\uparrow}(\hat{r})\psi_{\downarrow}(\hat{r}') \rangle$ der Wellenfunktion eines Cooper-Paares²⁸;
- die Suprafluidität von Helium;
- der Ferro- ($w = 0$) und der Antiferromagnetismus ($w = \pi/a$); Ordnungsparameter ist die Spin-Ausrichtung gewisser Elektronen²⁹;
- die kohärente Polarisierung von Elektron-Loch-Paaren in Halbleitern; Ordnungsparameter sind die Matrixelemente gewisser Polarisationsoperatoren, siehe Gl. (8.115) unten.

Letzteres ist allerdings *keine* Bose-Einstein-Kondensation: Für das Vorliegen einer Bose-Einstein-Kondensation ist die Existenz eines Ordnungsparameters notwendig, aber nicht hinreichend, es bedarf immer auch der makroskopischen Besetzung eines Zustandes.

Aufgabe: Überprüfen Sie diese Ergebnisse anhand derer aus Abschn. 8.3 unten und zeigen Sie, dass $\langle w | \hat{n} | w \rangle = M\omega N \langle q_l(0) \rangle^2 / 2\hbar$ gilt, mithin die Anregungsenergie gleich der klassischen potentiellen Energie der Gitterverschiebung ist! Hinweis: Schrödinger, *Der stetige Übergang ...*, 1926; Kohn & Sherrington, 1970, Anhang II.

²⁶ John Bardeen (1908-1991, Nobelpreise 1956 und 1972), Leon Neil Cooper (*1930, Nobelpreis 1972) & John Robert Schrieffer (*1931, Nobelpreis 1972), *Theory of Superconductivity*, 1957.

²⁷ Bogoljubow, *Quasimittelwerte in Problemen der statistischen Mechanik*, 1961; Tjablikow, *Quantentheoretische Methoden des Magnetismus*, 1968, §11.

²⁸ Cooper, *Bound electron pairs in a degenerate Fermi gas*, 1956.

²⁹ Hühler, *Ferromagnetism as Einstein Condensation of Bloch Spin Waves*, 1950.

7. Die Besetzungszahl-Darstellung für Fermionen

7.1 Begründung der Besetzungszahl-Darstellung für Fermionen

Wie lassen sich die Vorteile der Besetzungszahl-Darstellung für Systeme nutzbar machen, die – wie die Elektronen im Atom – durch *antisymmetrische* Wellenfunktionen – wie ψ_E^- (5.22) – beschrieben werden? Offensichtlich können wir nicht einfach die Leiter-Operatoren \hat{b} und \hat{b}^+ nebst ihrer Umdeutung in Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren übernehmen, weil diese nicht mit dem Pauli-Verbot $\psi_{E_1, E_1}^-(x_1, x_2) = 0$ (5.24) kompatibel sind. Die Besetzungszahl-Darstellung für derartige Systeme muss sich deshalb wesentlich von der für Oszillatoren unterscheiden. Auch die Verbindung zur Schrödinger-Theorie ist etwas umständlicher als bei den Bosonen: Sie erfordert den Formalismus der Zweiten Quantisierung, den wir im nächsten Kapitel kennen lernen werden.

7.1.1 Die Besetzungszahl-Operatoren für Fermionen

Wir benötigen also eine (alternative) Besetzungszahl-Darstellung mit den folgenden Eigenschaften (Jordan & Wigner, 1928):

1. Es gibt nur *zwei* Besetzungs-Zustände $|n\rangle$: $|n = 0\rangle$ und $|n = 1\rangle$.
2. Die Wirkung der Vernichtungs- (a) und Erzeugungsoperatoren (a^+) auf diese Zustände ist

$$a|0\rangle = 0; \quad a^+|0\rangle = |1\rangle; \quad a|1\rangle = |0\rangle; \quad a^+|1\rangle = 0 \quad (7.1)$$

Die Quadrate dieser Operatoren ergeben also in jedem Fall Null:

$$a^2|0\rangle = (a^+)^2|0\rangle = a^2|1\rangle = (a^+)^2|1\rangle = 0 \quad (7.2)$$

Und für die Produkte aus Vernichtungs- und Erzeugungsoperator haben wir

$$a^+a|0\rangle = 0; \quad a \cdot a^+|0\rangle = |0\rangle; \quad a^+a|1\rangle = |1\rangle; \quad a \cdot a^+|1\rangle = 0$$

Daraus folgt die Beziehung

$$(a \cdot a^+ + a^+ a) \begin{pmatrix} |0\rangle \\ |1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |0\rangle \\ |1\rangle \end{pmatrix}$$

Mithin gilt – im Unterschied zur Vertauschungsrelation (6.6) – die *Anti-Vertauschungsrelation*

$$a \cdot a^+ + a^+ a \equiv [a, a^+]_+ = 1 \quad (7.3)$$

Außerdem verifiziert man sofort, dass der Operator

$$\hat{n} = a^+ a; \quad \hat{n} |n\rangle = n \cdot |n\rangle; \quad n = 0, 1 \quad (7.4)$$

als Besetzungszahl-Operator aufgefasst werden kann.

Betrachten wir nun Produkte von Operatoren zu verschiedenen Zuständen (μ, ν) . Gleichung (7.2) ist gleichbedeutend mit $a_\mu^2 = (a_\mu^+)^2 = 0$. Dies wird durch die Beziehungen $a_\mu a_\nu = -a_\nu a_\mu$ und $a_\mu^+ a_\nu^+ = -a_\nu^+ a_\mu^+$, mithin durch die Anti-Vertauschungsrelation

$$a_\mu a_\nu + a_\nu a_\mu = a_\mu^+ a_\nu^+ + a_\nu^+ a_\mu^+ = 0 \quad (7.5)$$

garantiert. Schließlich folgt auf analoge Weise und unter Berücksichtigung der Anti-Vertauschungsrelation (7.3) die Anti-Vertauschungsrelation

$$a_\mu a_\nu^+ + a_\nu^+ a_\mu = \delta_{\mu\nu} \quad (7.6)$$

Theoretisch sind auch andere Anti-Vertauschungsrelationen möglich, die dem Pauli-Verbot gerecht werden, doch hat der Vergleich mit dem Experiment für diese einfachsten entschieden.

1. Aufgabe: Begründen Sie die Formeln (7.1) anhand der unter 1. genannten Forderungen!

Aufgabe: Vergleichen Sie den Besetzungszahl-Operator \hat{n} (7.4) mit seinem bosonischen Gegenstück (6.18)! Hinweis: Berechnen Sie die Potenzen \hat{n}^m !

Aufgabe:* Konstruieren Sie eine zweidimensionale Darstellung für die Operatoren a , a^+ , \hat{n} und $1 - \hat{n}$ und zeigen Sie „die vollständige Symmetrie zwischen a und a^+ bzw. \hat{n} und $1 - \hat{n}$ “ (Pauli, *Selected Topics in Field Quantization*, 2000, S.4)! Hinweis: Beginnen Sie mit möglichst einfachen 2×2 -Matrizen!

Aufgabe:* Zeigen Sie, dass die Anti-Vertauschungsrelationen (7.5) f. *nicht* erfüllt sind, wenn man für den Zustandsraum das direkte Produkt $\prod_\nu |n_\nu\rangle$ benutzt. Wie lauten die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren in diesem Raum? Hinweis: Untersuchen Sie den Operator $\prod_{\mu < \nu} (1 - 2a_\mu^+ a_\mu) a_\nu$ (Jordan & Wigner, 1928)!

7.1.2 Systeme mit zwei gleichen Fermionen

Wir setzen in Analogie zur Darstellung (6.22)

$$\psi_E^- = \sum_{\mu, \nu} \sum_{n_1, n_2=0}^1 c_{\mu\nu}^{(n_1, n_2)} (a_\mu^+)^{n_1} (a_\nu^+)^{n_2} |0, 0\rangle; \quad c_{\nu\mu}^{(n_2, n_1)} = c_{\mu\nu}^{(n_1, n_2)}$$

Hierin beschreibt der Vektor $|n_1, n_2\rangle$ die Besetzung der beiden Ein-Teilchen-Zustände. Die Anti-Vertauschungsrelationen (7.5) f. erzwingen jetzt quasi automatisch die *Anti*-Permutationssymmetrie der Wellenfunktionen bezüglich der Teilchenindizes, die im Rahmen der 1. Quantisierung durch geeignete Konstruktionen nebst viel umständlicheren Rechnungen gesichert werden muss.

Ein weiterer wesentlicher Unterschied zu bosonischen Systemen besteht darin, dass die Anzahl der Teilchen im System erhalten bleibt; dies ändert sich erst in der relativistischen Quantenfeldtheorie. Beim Austausch von Energie mit der Umgebung wird – sehen wir von der Ionisierung von Atomen und ähnlichen Prozessen ab – nicht die Anzahl der Teilchen, sondern die Energie der im System enthaltenen Teilchen geändert.

Im übrigen liefert die einfache Umformulierung von Zusammenhängen nichts physikalisch Neues. Allerdings ergibt sich eine insbesondere für praktische Rechnungen eminent wichtige Vereinfachung. Weitere Vorteile der Besetzungszahl-Darstellung gegenüber der Verwendung der Wellenfunktionen nebst expliziter Berücksichtigung ihrer Permutationssymmetrie sind (a) der ästhetische Gewinn, (b) das generell einfachere und übersichtlichere Rechnen sowie (c) die dadurch entstehende Vereinfachung bei der Behandlung neuer und/oder komplizierterer Sachverhalte, wie wir in den Beispielen unten sehen werden.

7.1.3 Zwei-Niveau-Systeme. Quasi-Spin-Formalismus *

Zu den rätselhaftesten Erscheinungen gehört der Spin („Eigendrehimpuls“) der Elementar- und Quasiteilchen. Da er in das Gebiet der relativistischen Theorie fällt, gehen wir hier nur auf die bemerkenswerten formalen Beziehungen zwischen den Spin-Operatoren und den Operatoren der Besetzungszahl-Darstellung für Fermionen ein. Wir betrachten dazu ein Elektron, das sich in nur *zwei* Zuständen: $|u\rangle$ („unten“) und $|o\rangle$ („oben“), befinden kann, und zeigen, dass es sich infolge dieser Beschränkung wie ein Spin der Größe $\frac{1}{2}\hbar$ verhält.¹ Umgekehrt kann es vorteilhaft sein, ein Spin-System mit Hilfe fermionischer Besetzungszahl-Operatoren zu beschreiben.

Die fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren wirken auf diese beiden Zustände gemäß

$$a^+ |u\rangle = |o\rangle; \quad a |o\rangle = |u\rangle \quad (7.7)$$

¹ Eine umfassende Behandlung des Zwei-Niveau-Systems findet man in Allen & Eberly, *Optical Resonance and Two-Level Atoms*, 1987.

Wir bilden aus ihnen die (hermiteschen) *Quasi-Spin-Operatoren*

$$\sigma_x = \frac{1}{2}(a^+ + a); \quad \sigma_y = \frac{1}{2i}(a^+ - a); \quad \sigma_z = \frac{1}{2}(a^+a - aa^+) = a^+a - \frac{1}{2} \quad (7.8)$$

und aus diesen den Vektor

$$\mathbf{s} = \hbar \boldsymbol{\sigma} \equiv \hbar(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \quad (7.9)$$

Die Komponenten dieses Vektors erzeugen nun eine sogenannte Lie-Algebra²:

$$s_x s_y - s_y s_x = i\hbar s_z \quad (\text{zyklisch}) \quad (7.10)$$

Dies sind aber genau die Vertauschungsrelationen für den Drehimpuls $\frac{1}{2}\hbar$, d.h. für einen Spin $\frac{1}{2}$ (Pauli, *Die Quantenmechanik des magnetischen Elektrons*, 1927).

Umgekehrt kann man das Verhalten eines Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchens durch ein spinloses Fermion in einem Zwei-Niveau-System beschreiben. Mit den Operatoren a und a^+ lässt es sich im allgemeinen wesentlich einfacher rechnen als mit Spin-Operatoren.

Zum Beispiel lautet der Hamiltonian für die Wechselwirkung des Spins \mathbf{s} mit dem Magnetfeld \mathbf{H} (Pauli, 1927)

$$\begin{aligned} H_{int} &= \frac{e}{mc} \mathbf{H} \cdot \mathbf{s} = \frac{e}{mc} \left[H_x \hbar \frac{\sigma^+ + \sigma^-}{2} + H_y \hbar \frac{\sigma^+ - \sigma^-}{2i} + H_z \hbar \sigma_z \right] \\ &= \frac{e\hbar}{mc} \left[(H_x - iH_y) a^+ + (H_x + iH_y) a + H_z \left(a^+a - \frac{1}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (7.11)$$

In Analogie zum verschobenen harmonischen Oszillator wird dieses Modell als *verschobener Fermi-Oszillator* bezeichnet³.

Andererseits sind die Bosonen-Operatoren den Spin-Operatoren ähnlicher als den Fermionen-Operatoren. Daher lässt sich die Elektron-Phonon-Wechselwirkung oftmals leichter in Form der Spin-Boson-Wechselwirkung behandeln.

Abschließend erwähnen wir, dass sich für das Zweiband-Modell ($|c\rangle = |\uparrow\rangle$, $|v\rangle = |\downarrow\rangle$) Pseudo-Spin-Operatoren auch folgendermaßen definieren lassen:

$$\begin{aligned} \sigma^+ &= \sigma_x + i\sigma_y = a_c^+ a_v; & \sigma^- &= \sigma_x - i\sigma_y = a_v^+ a_c \\ \sigma_z &= \frac{1}{2}(\sigma^+ \sigma^- - \sigma^- \sigma^+) = \frac{1}{2}(a_c^+ a_v a_v^+ a_c - a_v^+ a_c a_c^+ a_v) = \frac{1}{2}(a_c^+ a_c - a_v^+ a_v) \end{aligned} \quad (7.12)$$

Aufgabe: Wie lauten die „zirkularen“ Operatoren σ^\pm für das Modell (7.8)?

² Marius Sophus Lie (1842-1899), *Theorie der Transformationsgruppen*, 1888-93.

³ Siehe Haken, *Quantenfeldtheorie des Festkörpers*, 1973, § 14b; hier wird auch der Grundzustand dieses Systems berechnet.

7.2 Kohärente Zustände II

7.2.1 Der thermische Phasen-Zustand

Der thermische Phasen-Zustand $|\psi_{\text{th}}\rangle$ ist ein kohärenter Zustand (6.23), dessen Koeffizienten A_n durch den Boltzmann-Faktor⁴ $\exp\{-E_n/k_B T\}$ (k_B – Boltzmann-Konstante, T – absolute Temperatur) bestimmt sind ($\varphi_n = 0$)⁵:

$$|\psi_{\text{th}}\rangle = N_{\text{th}}^{-1/2} \sum_n e^{-\frac{E_n}{2k_B T}} |n\rangle; \quad N_{\text{th}} = \sum_n e^{-\frac{E_n}{k_B T}} \quad (7.13)$$

Wenn $|n\rangle$ die stationären Zustände eines harmonischen Oszillators sind, haben wir $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, $n = 0, 1, \dots$, mithin

$$|\psi_{\text{th}}\rangle = |\psi_{\text{th}}^{\text{HO}}\rangle = \sqrt{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}} \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\frac{n\hbar\omega}{2k_B T}} |n\rangle \quad (7.14)$$

Das entsprechende Diagonal-Matrixelement des Besetzungszahl-Operators ist gleich der *Planckschen Verteilungsfunktion* f_{Pl} :

$$\langle \psi_{\text{th}}^{\text{HO}} | \hat{n} | \psi_{\text{th}}^{\text{HO}} \rangle = \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}\right) \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} = f_{\text{Pl}}\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \quad (7.15)$$

Sie beschreibt die mittlere Anzahl von Energiequanten in einem Quantenoszillator im thermodynamischen Gleichgewicht (vergleiche § 6.1.1). Denn die mittlere Energie eines harmonischen Oszillators im thermischen Gleichgewicht ist (Einstein, 1907)

$$\langle E \rangle_{\text{nkl}} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \hbar\omega e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}}} = k_B T \frac{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} = \hbar\omega f_{\text{Pl}}\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \quad (7.16)$$

Sie ist also gleich der Energie eines *einzelnen* Energiequants, $\hbar\omega$, multipliziert mit der *mittleren* Anzahl von Energiequanten, f_{Pl} , die diesen Oszillator besetzen (und zwar als System! siehe § 6.1.1) – die Theorie ist insoweit konsistent. Die hier nicht berücksichtigte Nullpunktsenergie $\frac{1}{2}\hbar\omega$ addiert sich einfach zu $\langle E \rangle_{\text{nkl}}$ (7.16) hinzu.

Für Fermionen haben wir dagegen $n = 0, 1$, mithin

$$|\psi_{\text{th}}\rangle = |\psi_{\text{th}}^{\text{F}}\rangle = \frac{e^{-\frac{E_0}{2k_B T}} |0\rangle + e^{-\frac{E_1}{2k_B T}} |1\rangle}{\sqrt{e^{-\frac{E_0}{k_B T}} + e^{-\frac{E_1}{k_B T}}}} \quad (7.17)$$

⁴ Ludwig Eduard Boltzmann (1844-1906), *Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen*, 1872.

⁵ Vgl. Schleich, *Quantum Optics in Phase Space*, 2000, S.53.

Das entsprechende Diagonal-Matrixelement des Besetzungszahl-Operators ist gleich der *Fermi-Diracschen-Verteilungsfunktion*⁶, wenn man E_0 als *Fermi-Energie* ansieht:

$$\langle \psi_{\text{th}}^{\text{F}} | \hat{n} | \psi_{\text{th}}^{\text{F}} \rangle = \frac{1}{e^{-\frac{E_0}{k_{\text{B}}T}} + e^{-\frac{E_1}{k_{\text{B}}T}}} \sum_{n=0}^1 n e^{-\frac{E_n}{k_{\text{B}}T}} = \frac{1}{e^{\frac{E_1-E_0}{k_{\text{B}}T}} + 1} \quad (7.18)$$

Die Wellenfunktion $|\psi_{\text{th}}\rangle$ (7.13) scheint auf höchst elegante Weise die Berücksichtigung von Temperatureffekten zu ermöglichen. In der Regel hat man es jedoch mit *inkohärenten* statt mit kohärenten Überlagerungen zu tun und muss mit *gemischten Zuständen* arbeiten. Dies geschieht mit Hilfe der Dichtematrix, die wir im folgenden Paragraphen kennen lernen werden.

Aufgabe: Zeigen Sie, dass die Wellenfunktion (7.14) zu einem verschobenen Oszillator gehört! Hinweis: Berechnen Sie das Matrixelement $\langle \psi_{\text{th}}^{\text{HO}} | b + b^+ | \psi_{\text{th}}^{\text{HO}} \rangle$!

7.2.2 Dynamik statistischer Gesamtheiten – Die Dichtematrix *

Die Ergebnisse des vorigen Abschnittes zeigen, dass auch in quantenmechanischen Viel-Teilchen-Systemen bei endlichen Temperaturen nicht nur die energetisch tiefsten stationären Zustände besetzt sind, sondern im Prinzip *alle*. Deshalb muss man die Quantenmechanik – die sozusagen eine $T = 0$ -Theorie ist – erweitern. Wir skizzieren hier nur einige Grundzüge der Theorie, soweit wir sie im Abschnitt 8.6 benötigen werden.

Wenn sich die Zustände $|n\rangle$ kohärent zum thermischen Phasenzustand (7.13) überlagern, erhält man für den Erwartungswert eines allgemeinen Operators \hat{O} den Ausdruck

$$\langle \hat{O} \rangle_{\text{kohärent}} = \langle \psi_{\text{th}} | \hat{O} | \psi_{\text{th}} \rangle = N_{\text{th}}^{-1} \sum_{m,n} e^{-\frac{E_m + E_n}{2k_{\text{B}}T}} \langle m | \hat{O} | n \rangle \quad (7.19)$$

Überlagern sich die Zustände dagegen – wie es die Regel ist – *inkohärent*, so mitteln sich die Nichtdiagonal-Matrixelemente durch destruktive Interferenz der Phasenfaktoren $e^{i\varphi_n}$ heraus und man erhält als Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle_{\text{inkohärent}} &= N_{\text{th}}^{-1} \sum_{m,n} e^{i(\varphi_n - \varphi_m)} e^{-\frac{E_n + E_m}{2k_{\text{B}}T}} \langle m | \hat{O} | n \rangle \\ &= N_{\text{th}}^{-1} \sum_n e^{-\frac{E_n}{k_{\text{B}}T}} \langle n | \hat{O} | n \rangle \end{aligned} \quad (7.20)$$

Diese Formel gilt allerdings nur bei Benutzung der Energie-Eigenfunktionen. Um uns von dieser Einschränkung zu befreien, bauen wir sie zu einem

⁶ Fermi, *Zur Quantelung des idealen einatomigen Gases*, 1926; Dirac, *On the Theory of Quantum Mechanics*, 1926.

Matrizen-Formalismus aus. Dazu schreiben wir (den Index „inkohärent“ weglassend)

$$\begin{aligned}\langle \hat{O} \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | e^{-\beta E_n} \hat{O} | n \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | e^{-\beta \hat{H}} \hat{O} | n \rangle = \frac{1}{Z} Sp \left\{ e^{-\beta \hat{H}} \hat{O} \right\} \\ Z &= \sum_m e^{-\beta E_m} = \sum_m \langle m | e^{-\beta \hat{H}} | m \rangle = Sp \left\{ e^{-\beta \hat{H}} \right\}; \quad \beta \equiv 1/k_B T\end{aligned}\quad (7.21)$$

Z ist die Summe des Boltzmann-Faktors über alle stationären Zustände des Systems, kurz die *Zustandssumme*. Die Spur (Sp), die Summe über alle Diagonalelemente einer Matrix, ist invariant gegenüber unitären Transformationen der Wellenfunktionen und damit unabhängig von der Darstellung der Wellenfunktionen und Operatoren. Statt der Energie-Eigenfunktionen $|n\rangle$ können wir deshalb einen beliebigen vollständigen Satz $\{\psi_n(x)\}$ von Wellenfunktionen verwenden.

Es ist daher zweckmäßig, die Dichte-Matrix bzw. den Dichte-Operator einzuführen:

$$\rho_{nm} = \frac{1}{Z} \langle \psi_n | e^{-\beta \hat{H}} | \psi_m \rangle; \quad \hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}; \quad Sp \{ \hat{\rho} \} = 1 \quad (7.22)$$

Hiermit schreiben sich die Erwartungswerte eines Operators

$$\langle \hat{O} \rangle = Sp \left\{ \hat{\rho} \hat{O} \right\} \quad (7.23)$$

Zu der Wichtung der Zustände durch die Raumeinnahme tritt die Wichtung durch ihre thermische Besetzung.

Für den Dichteoperator (7.22) gilt ein zum klassischen Liouvilleschen Theorem⁷ analoger Erhaltungssatz:

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}(t), \hat{\rho}(t) \right] + \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = 0 \quad (7.24)$$

Aus ihm resultiert als Bewegungsgleichung des Dichteoperators die *quantenmechanische Liouville- oder von-Neumann-Gleichung*⁸

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}(t), \hat{\rho}(t) \right] \quad (7.25)$$

Das Vorzeichen auf der rechten Seite ist entgegengesetzt zu dem in der Heisenbergschen Bewegungsgleichung für nicht explizit zeitabhängige Operatoren, doch beachte man, dass auf der linken Seite nicht – wie dort – die totale, sondern die explizite Zeitableitung steht.

⁷ Joseph Liouville (1809-1882), J. de Math. 3 (1838) 349 (nach Tolman, 1979, S.49, Fn.).

⁸ v. Neumann, *Wahrscheinlichkeitstheoretischer Aufbau der Quantenmechanik*, 1927; *Thermodynamik quantenmechanischer Gesamtheiten*, 1927; *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, 1932, Abschn. V.1. – S. auch Landau, *Das Dämpfungsproblem in der Wellenmechanik*, 1927; Dirac, *The basis of statistical mechanics*; 1929; *Note on the exchange phenomena in the Thomas atom*, 1930.

Gleichung (7.25) ist die Grundlage der Berechnung von Materialeigenschaften wie elektrische und magnetische Suszeptibilität im Rahmen der Dichtematrix-Theorie (Il'inskii & Keldysh, 1994). Wir werden im Abschnitt 8.6 davon Gebrauch machen.

7.3 Beispiel: Löcher (Defektelektroden) in Halbleitern

Das durch das Pauli-Verbot implizierte Aufbauprinzip der Atomhülle findet sich in der sukzessiven Besetzung der elektronischen Zustände in Festkörpern wieder, da diese aus den atomaren Zuständen gebildet werden. Insbesondere gibt es eine Analogie zu solchen mit der Auffüllung der Schalen verbundenen Effekten, wie der Einwertigkeit des Chlors in der Salzsäure, HCl . Wir kommen damit zu einem Konzept, das insbesondere für die Beschreibung von Halbleitern unentbehrlich ist. Es zeigt sich nämlich, dass man in einem annähernd gefüllten Band nicht immer die etwa 10^{24} (!) vorhandenen Elektronen beschreiben muss, sondern sich in vielen Fällen auf das Fehlen einer relativ geringen Anzahl von Elektronen beschränken kann. Die Besetzungszahl-Darstellung scheint wie geschaffen dafür, dieses Konzept zu realisieren.

Die Wellenfunktion des voll besetzten Valenzbandes v sei

$$|\Phi_v\rangle = \prod_k^{1.\text{BZ}} a_{vk}^+ |0_{vk}\rangle = \prod_k^{1.\text{BZ}} |1_{kv}\rangle \equiv |1_v\rangle \quad (7.26)$$

Zu einem voll besetzten Band lässt sich kein Elektron hinzufügen, deshalb ergibt die Gleichung $(a^+)^2 = 0$ sofort

$$a_{vk}^+ \Phi_v = (a_{vk}^+)^2 |0_{vk}\rangle \prod_{k' \neq k}^{1.\text{BZ}} a_{vk'}^+ |0_{vk'}\rangle = 0 \quad (7.27)$$

Diese Wirkung erinnert an die Grundzustands-Eigenschaft $a|0\rangle = 0|0\rangle$. Wir setzen daher – zunächst rein formal –

$$a_{vk} = d_{vk}^+; \quad a_{vk}^+ = d_{vk} \quad (7.28)$$

Der Operator d^+ „vernichtet“ ein Valenzelektron und „erzeugt“ an dessen Stelle ein „Loch“ (auch Defektelektron genannt).⁹ Diese Löcher sind wieder Fermionen:

$$d_{nk} d_{n'k'}^+ + d_{n'k'}^+ d_{nk} = \delta_{nn'} \delta_{kk'} \quad (7.29)$$

Gemäß Gleichung (7.27) ist das volle Valenzband $|1_v\rangle$ der Löcher-Grundzustand (das Löcher-Vakuum) $|0_d\rangle$:

⁹ Bei dieser Betrachtungsweise wird von Vielteilchen-Effekten abgesehen, aufgrund derer die Valenzelektronen realiter in andere Zustände übergehen.

$$d_{vk} |0_d\rangle \equiv a_{vk}^+ |1_v\rangle = 0 |1_v\rangle = 0 |0_d\rangle \quad (7.30)$$

Die *Anregung* des Valenzbandes besteht mithin in der Erzeugung von Löchern:

$$d_{vk}^+ |0_d\rangle \equiv a_{vk} \Phi_v = \prod_{k' \neq k}^{1.BZ} |1_{vk'}\rangle |0_{vk}\rangle \equiv \prod_{k' \neq k}^{1.BZ} |0_{dk'}\rangle |1_{dk}\rangle \quad (7.31)$$

Die physikalischen Konsequenzen dieses Löcherbildes lassen sich am anschaulichsten anhand des Hamiltonians für ein Leitungsband „c“ und ein Valenzband „v“ ableiten. Wir schreiben

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_k E_{ck} \hat{n}_{ck} + \sum_k E_{vk} \hat{n}_{vk} \\ &= \sum_k E_{ck} \hat{n}_{ck} - \sum_k E_{vk} d_{vk}^+ d_{vk} + \sum_k E_{vk} \end{aligned} \quad (7.32)$$

Elektronen im Löcher im relativ uninteressante Energie
Leitungsband Valenzband des vollen Valenzbandes

und erhalten folgende Ergebnisse:

1. Die Löcher nahe dem Valenzband-Maximum besitzen eine positive effektive Masse:

$$E_{vk} = E_{v0} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v} \Rightarrow -E_{vk} d_{vk}^+ d_{vk} = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_v} - E_{v0} \right) d_{vk}^+ d_{vk} \quad (7.33)$$

2. Die Löcher besitzen eine *positive* Ladung: der elektronische Ladungsdichte-Operator für das Valenzband ist nämlich (e – positive Elementarladung)

$$\hat{\rho}_{kv} = -e a_{vk}^+ a_{vk'} = e d_{vk}^+ d_{vk} - e \quad (7.34)$$

Der erste Term bezieht sich auf das angeregte Loch, der zweite auf die Ladung des vollen Valenzbandes (sie wird durch die Ladungen der Atomrümpfe kompensiert). Diese *effektive* positive Ladung zeigt sich im anomalen Hall-Effekt¹⁰.

*Aufgabe**: Weshalb lassen sich das Photoelektronen-Spektrum und der Brechungsindex nicht im Rahmen der Löchertheorie beschreiben?

¹⁰ Edwin Herbert Hall, 1855-1938. – Der von E. Hall 1879 erstmals beschriebene gewöhnliche Hall-Effekt wird durch Elektronen hervorgerufen.

8. Vom Viel-Teilchen-System zur Quantenfeldtheorie

Wenn man die Quantenmechanik und Relativitätstheorie mit der großen französischen Revolution von 1789 und der Oktoberrevolution von 1917 vergleicht, dann erinnert die Quantenfeldtheorie mehr an die englische glorreiche Revolution von 1688: die Verhältnisse haben sich soweit geändert, dass sie die alten bleiben konnten.

(S. Weinberg, 1977¹)

Die Quantenfeldtheorie ist die Quantentheorie von Systemen, deren dynamische Variablen Felder sind. Das für die Festkörperphysik bei weitem wichtigste Feld ist das elektromagnetische Feld. Die von uns bevorzugte Besetzungszahldarstellung gestattet eine höchst anschauliche einheitliche Beschreibung von Feldern und von quantenmechanischen Systemen, wie den Elektronen im Kristall. Die volle Leistungsfähigkeit dieses Formalismus wird wieder bei der Behandlung von Wechselwirkungen zum Tragen kommen.

8.1 Problemstellung und Übersicht

Es muss mit der Möglichkeit gerechnet werden, dass die Übernahme des Ansatzes für die potentielle Energie aus der gewöhnlichen Mechanik nicht mehr erlaubt ist, wenn beide „Punktladungen“ in Wahrheit ausgedehnte Schwingungszustände sind, die einander durchdringen.

(E. Schrödinger, *Über das Verhältnis . . .* , 1926, S.750f., Fn.1)

Physikalische Felder sind räumlich *verteilte* Systeme mit *unendlich* vielen Freiheitsgraden. Ihre klassischen dynamischen Variablen sind *Funktionen* über dem Ortsraum, sagen wir, $u(x, t)$ und $\dot{u}(x, t)$, die die Verteilung des Systems im Ortsraum und deren zeitliche Veränderung beschreiben. Und statt mit einem einzigen Parameter Gesamtenergie hat man es mit einer *Verteilung* der Gesamtenergie über den Ortsraum, der *Energiedichte* zu tun. Man führt dementsprechend Lagrange- und Hamilton*dichten* ein. Der direkteste Weg zu einer quantenmechanischen Feldbeschreibung führt über das Postulat, dass die hierbei definierten kanonisch-konjugierten Feldvariablen $u(x, t)$

¹ Steven Weinberg (*1933, Nobelpreis 1979), *The search for unity. Notes for a history of quantum field theory*, 1977 (nach Kuhn & Strnad, 1995, S.160).

und $\pi(x, t)$ zu Operator*dichten* werden: $u(x, t) \rightarrow \hat{u}(x, t)$, $\pi(x, t) \rightarrow \hat{\pi}(x, t)$, die Vertauschungsrelationen genügen mögen, die analog zu denen der kanonisch-konjugierten Variablen der Kontinuumsmechanik sind.² Man kann dann die Vertauschungsrelationen dadurch erfüllen, dass man diese Operatoren nach geeigneten modalen Eigenfunktionen und Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren entwickelt; man gelangt so zur Besetzungszahl-Darstellung.

Nach dem im 4. Kapitel vorgestellten Quantisierungsverfahren ergeben sich Begrenzungs- und schließlich Wellenfunktionen im Phasenraum dieser kanonisch-konjugierten Feldvariablen, sagen wir, $\Psi(u)$ und $\Phi(\pi)$. Es ist jedoch wesentlich einfacher, die Feldvariablen so darzustellen, dass der für punktmekanische Systeme entwickelte Formalismus *unmittelbar* angewendet werden kann. Dies gelingt mit Hilfe der Entwicklung der Feldvariablen nach Normalmoden.³ Hierbei werden die räumlichen und die zeitlichen Abhängigkeiten der Feldvariablen durch *verschiedene* Funktionen erfasst. Die nur von den Ortsvariablen abhängigen Funktionen sind orthonormiert und beschreiben die räumliche Ausdehnung des Feldes. Diese wird nicht durch die Feldenergie(dichte), sondern durch die Anfangs-, Rand- und Ausbreitungsbedingungen bestimmt und unterliegt deshalb der klassischen Diskretisierung – *nicht* jedoch der Quantisierung. Dagegen beschreiben die nur von der Zeitvariablen abhängigen Entwicklungskoeffizienten die Schwingungen der einzelnen Normalmoden. Analog zum Federschwinger wird deren Amplitude durch die Energiedichte begrenzt. Die Aufgabe besteht folglich darin, die Normalmoden-Entwicklung dergestalt durchzuführen, dass diese Schwingungen formal genau so wie die eines Federschwingers behandelt werden können:

Regel: Wähle die Dimension der Normalmoden-Amplitude derart, dass die Entwicklungskoeffizienten die Dimension Länge besitzen.

Merke: Das heuristische Element lässt sich bei kaum einer Quantisierung vermeiden!

Danach hat man es mit einer Menge von *abzählbar* unendlich vielen Oszillatoren zu tun. Bei der Interpretation dieser Menge werden wir uns an Plancks Vorstellung über die Verteilung von „Energieelementen“ auf „Resonatoren“ halten (siehe Abschnitt 1.1). Die Frage nach der Besetzung der Zustände dieses Systems wird sich dabei von selbst stellen und beantworten.

² Dirac, *The Quantum Theory of the Emission and Absorption of Radiation*, 1926.

³ Born, Heisenberg & Jordan, *Über Quantenmechanik II*, 1926, §4.3; Fermi, *Quantum theory of radiation*, 1932. – Siehe auch Heitler, *The Quantum Theory of Radiation*, 1954.

8.2 Klassische kanonische Feldtheorie und Normalmoden-Entwicklung

8.2.1 Kanonischer Formalismus für klassische verteilte Systeme

Der kanonische Formalismus für verteilte, kontinuierliche Systeme lässt sich relativ einfach als Grenzübergang $N \rightarrow \infty$ eines N -Körper-Systems mit Zwei-Körper-Wechselwirkung begründen.⁴ Dazu schreiben wir die Hamilton-Funktion (3.33) als

$$\begin{aligned} H(\{u(n\Delta x, t)\}, \{p(n\Delta x, t)\}) &= T(\{p(n\Delta x, t)\}) + V(\{u(n\Delta x, t)\}); \\ T(\{p(n\Delta x, t)\}) &= \frac{1}{2M} \sum_{n=2}^{N-1} p(n\Delta x, t)^2 = \frac{M}{2} \sum_{n=2}^{N-1} \dot{u}(n\Delta x, t)^2; \\ V(\{u(n\Delta x, t)\}) &= \frac{\kappa}{2} \sum_{n=1}^{N-1} [u((n+1)\Delta x, t) - u(n\Delta x, t)]^2 \end{aligned} \quad (8.1)$$

und führen den Grenzübergang

$$\begin{aligned} N \rightarrow \infty, \quad \Delta x \rightarrow 0, \quad N \cdot \Delta x = l = \text{const} > 0; \\ u(n\Delta x, t) \rightarrow u(x, t); \quad \sum_{n=1}^N u(n\Delta x, t) \cdot \Delta x \rightarrow \int_0^l u(x, t) dx \end{aligned} \quad (8.2)$$

durch. Anstelle der Bewegungsgleichung (3.82) erhalten wir eine d'Alembert-sche Wellengleichung⁵:

$$M\ddot{u}(x, t) = \kappa \Delta x^2 u''(x, t); \quad u'(x, t) \equiv \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) \quad (8.3)$$

Für die potentielle und die kinetische Energie ergeben sich die Ausdrücke

$$V(u(x, t)) = \frac{\kappa}{2} \Delta x \int_0^l [u'(x, t)]^2 dx; \quad T(p(x, t)) = \frac{1}{2M} \frac{1}{\Delta x} \int_0^l [p(x, t)]^2 dx \quad (8.4)$$

Aus letzteren folgen sofort – im Unterschied zur Gleichung (8.3), die diesbezüglich nicht ganz eindeutig ist – die notwendigen Parameter-Skalierungen:

$$M \rightarrow 0, \quad M/\Delta x = \rho = \text{const} > 0; \quad \kappa \rightarrow \infty, \quad \kappa \Delta x = g = \text{const} > 0 \quad (8.5)$$

⁴ Fick, *Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie*, 1988, Kap. 5.2; Haken, *Quantenfeldtheorie des Festkörpers*, 1973, §9; ter Haar, *Quantentheorie*, 1970, Kap.8.

⁵ d'Alembert, *Reflexions sur la cause generale des vents*, 1747.

Hierin sind ρ die lineare Massendichte und g der Youngsche Modul⁶. Außerdem muss der Impuls $p(x, t)$ (die letzte punktmechanische Variable an dieser Stelle!) durch die Impulsdichte

$$\pi(x, t) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{p(x, t)}{\Delta x} \quad (8.6)$$

ersetzt werden.

Der Kontinuum-Grenzfall ist also erwartungsgemäß das Bernoullische Problem für die stehenden Wellen einer Saite⁷:

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{c^2 \partial^2 t} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial^2 x}; \quad c^2 = \frac{g}{\rho}; \quad u(0, t) = u(l, t) = 0 \quad (8.7)$$

An die Stelle der Schwingungsfrequenzen ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit c als *innerer Parameter einer Welle* getreten. Darin spiegelt sich die Tatsache wieder, dass eine Welle nicht nur ein zeitlich, sondern auch ein räumlich periodischer Vorgang ist. Frequenz und Wellenlänge sind dagegen *äußere* Parameter, die einer Welle durch äußere Anregung beziehungsweise räumliche Begrenzungen (Resonatoren!) aufgeprägt werden.

Die potentielle und die kinetische Energie sind nun nicht mehr Funktionen von Koordinaten und Impulsen, sondern Funktionale der Feldvariablen:

$$V[u(x, t)] = \frac{g}{2} \int_0^l [u'(x, t)]^2 dx; \quad T[\pi(x, t)] = \frac{1}{2\rho} \int_0^l [\pi(x, t)]^2 dx \quad (8.8)$$

Wie sieht nun die zur Wellengleichung äquivalente Lagrangesche Bewegungsgleichung aus?

Um das Problem der Ortsintegration zu umgehen, fassen wir die Lagrange-Funktion $L = T - V$ als Integral über die *Lagrange-Dichte* \mathcal{L} auf:

$$L[u(x, t)] = \int_0^l \mathcal{L}(\dot{u}, u') dx; \quad \mathcal{L}(\dot{u}, u') \equiv \frac{\rho}{2} \dot{u}(x, t)^2 - \frac{g}{2} u'(x, t)^2 \quad (8.9)$$

Die Wellengleichung ergibt sich dann aus der Gleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}(\dot{u}(x, t), u'(x, t))}{\partial \dot{u}(x, t)} - \frac{d}{dx} \frac{\partial \mathcal{L}(\dot{u}(x, t), u'(x, t))}{\partial u'(x, t)} = 0 \quad (8.10)$$

Da wir die Funktion $u(x, t)$ selbst berechnen wollen, bringen wir sie in die folgende, der Lagrangeschen Bewegungsgleichung der Punktmechanik nachempfundene Form:

⁶ Thomas Young (1773-1829). – Wir verwenden nicht das in der Elastizitätstheorie übliche Symbol E , um Verwechslungen mit der Gesamtenergie zu vermeiden.

⁷ Bernoulli, *Examen principorum mechanicae*, 1726 (nach Riemann, *Über die Darstellbarkeit einer Function durch eine trigonometrische Reihe*, 1892; Gould, *Variational Methods for Eigenvalue Problems*, 1957, § III.4).

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L[u(x, t)]}{\delta \dot{u}(x, t)} - \frac{\delta L[u(x, t)]}{\delta u(x, t)} = 0 \quad (8.11)$$

Dafür fordern wir für die Ableitung $\delta/\delta f(x)$ nach einer (stetigen) Funktion $f(x)$ (die Zeitvariable lassen wir hier als festzuhaltenden Parameter fort) die Eigenschaften

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta f(x)} \int_0^l \mathcal{L}(f(x')) dx' &\stackrel{!}{=} \frac{\partial \mathcal{L}(f(x))}{\partial f(x)}; \\ \frac{\delta}{\delta f(x)} \int_0^l \mathcal{L}(f'(x')) dx' &\stackrel{!}{=} \frac{d}{dx} \frac{\partial \mathcal{L}(f'(x))}{\partial f'(x)} \end{aligned} \quad (8.12)$$

Diese Forderungen sind erfüllt, wenn die Beziehungen

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta f(x)} \int_0^l \mathcal{L}(f(x')) dx' &= \int_0^l \frac{\delta}{\delta f(x)} \mathcal{L}(f(x')) dx' \\ &= \int_0^l \frac{\partial \mathcal{L}(f(x'))}{\partial f(x')} \frac{\delta f(x')}{\delta f(x)} dx'; \end{aligned} \quad (8.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta f(x)} \int_0^l \mathcal{L}(f'(x')) dx' &= \int_0^l \frac{\delta}{\delta f(x)} \mathcal{L}(f'(x')) dx' \\ &= \int_0^l \frac{\partial \mathcal{L}(f'(x'))}{\partial f'(x')} \frac{\delta f'(x')}{\delta f(x)} dx' \end{aligned} \quad (8.14)$$

nebst

$$\frac{\delta f(x')}{\delta f(x)} = \delta(x - x'); \quad \frac{\delta f'(x')}{\delta f(x)} = \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') \quad (8.15)$$

gelten. Dies entspricht nun gerade den Eigenschaften der Variationsableitung, die Euler (1744) zur Lösung von Extremalaufgaben eingeführt hat.

Wir gelangen somit zu der folgenden

Regel: *Der kanonische Formalismus der Punktmechanik kann auf kontinuierliche Systeme übertragen werden, indem die partiellen Ableitungen durch die Eulerschen Variationsableitungen ersetzt werden.*

Der kanonische Impuls ist dann die Impulsdichte

$$\pi(x, t) \stackrel{def}{=} \frac{\delta L[u(x, t)]}{\delta \dot{u}(x, t)} = \frac{\partial \mathcal{L}(\dot{u}, u')}{\partial \dot{u}(x, t)} = \rho \dot{u}(x, t) \quad (8.16)$$

für die Lagrange-Funktion (8.9), in Übereinstimmung mit der Definition (8.6).

Die *Hamilton-Dichte* ist

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(x, t) &\stackrel{\text{def}}{=} \pi(x, t)\dot{u}(x, t) - \mathcal{L}(\dot{u}(x, t), u'(x, t)) \\ &= \mathcal{T}(\pi(x, t)) + \mathcal{V}(u'(x, t)) = \mathcal{E}(x) = \frac{1}{2\rho}\pi(x, t)^2 + \frac{g}{2}u'(x, t)^2\end{aligned}\quad (8.17)$$

für dieses Modell, wobei $\mathcal{E}(x)$ die orts-, aber nicht zeitabhängige *Energiedichte* bezeichnet. Die Hamilton-Funktion ist logischerweise das räumliche Integral über die Hamilton-Dichte, sie wird als Funktional der Felder $u(x, t)$ und $\pi(x, t)$ aufgefasst:

$$H(t) = H[\pi(x, t), u'(x, t)] = \int_0^l \mathcal{H}(x, t) dx \quad (8.18)$$

Das ist in Übereinstimmung mit den Ergebnissen (8.8). Die Gesamtenergie ist

$$E_{\text{tot}}^{(kl)} = \int_0^l \mathcal{E}(x) dx = \int_0^l \left[\frac{1}{2\rho}\pi(x, t)^2 + \frac{g}{2}u'(x, t)^2 \right] dx \quad (8.19)$$

Aufgabe: Illustrieren Sie die Aussage, dass Frequenz und Wellenlänge *äußere* Parameter einer Welle sind, anhand von speziellen Lösungen der Wellengleichung!

Aufgabe: Formulieren Sie die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen für eine Welle und zeigen Sie, dass diese kompatibel mit der Wellengleichung sind! Hinweis: Berechnen Sie $\delta H/\delta u$ und $\delta H/\delta \pi$!

8.2.2 Elektromagnetische Wellen

Dieser [Maxwell] wäre nicht so oft missverstanden worden, wenn man das Studium nicht mit dem treatise begonnen hätte, während die spezifisch Maxwell'sche Methode in dessen früheren Abhandlungen viel klarer hervortritt.

(L. Boltzmann⁸)

Wir betrachten der Einfachheit halber ebene elektromagnetische Wellen im „Vakuum“ und beginnen wie üblich mit den entsprechend vereinfachten Maxwell-Gleichungen⁹:

⁸ In: Maxwell, *Über Faradays Kraftlinien*, 2001, S.99.

⁹ James Clerk Maxwell (1831-1879), *On physical lines of force*, 1861/1862; *Dynamical Theory of the electromagnetic field*, 1864; *A Treatise on Electricity & Magnetism*, 1891, Pt. IV, Ch. IX. – Wir folgen i. wes. Haken (1973, §11), stellen aber auf SI-Einheiten um; vgl. auch Sommerfeld, *Elektrodynamik*, 2001.

$$\begin{aligned} \nabla \mathbf{E} = 0; \quad \nabla \mathbf{B} = 0; \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\dot{\mathbf{B}}; \quad \nabla \times \mathbf{B} = c_0^{-2} \dot{\mathbf{E}} \\ \mathbf{H} = \mu_0^{-1} \mathbf{B}; \quad \mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E}; \quad c_0 = (\varepsilon_0 \mu_0)^{-1/2} \end{aligned} \quad (8.20)$$

(μ_0 , ε_0 – Induktions- bzw. Dielektrizitätskonstante des Vakuums, c_0 – Lichtgeschwindigkeit im Vakuum). Zur Lösung dieser Gleichungen werden oft die *Potenziale* \mathbf{A} und Φ eingeführt (Lorentz, 1895, 1909)¹⁰:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}; \quad \mathbf{E} = -\dot{\mathbf{A}} - \nabla \Phi \quad (8.21)$$

Wir werden sie auch für die kanonische Theorie der Wechselwirkung eines elektromagnetischen Feldes mit elektrischen Ladungen und Strömen benötigen.

Die Potenziale werden durch die Gleichungen (8.20) allerdings nicht eindeutig bestimmt; ihre Festlegung durch gewisse Zusatzforderungen nennt man *Eichung* (Weyl, 1923). Für die Beschreibung transversaler Felder eignet sich besonders gut die Eichung

$$\nabla \mathbf{A} = \Phi = 0 \quad (8.22)$$

Der Vorteil, dass die nicht vorhandenen Freiheitsgrade von vornherein eliminiert werden, wird allerdings mit dem Nachteil erkaufte, dass diese Eichung nicht manifest relativistisch kovariant ist¹¹.

Mit der Eichung (8.22) erhält man für jede Komponente des Vektorpotenzials einzeln die d'Alembertsche Wellengleichung:

$$\left(\Delta - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (8.23)$$

Die Lösungen für die drei Komponenten A_x , A_y , A_z sind jedoch nicht unabhängig voneinander, sondern durch die Eich-Bedingung (8.22) miteinander verknüpft. Hierin liegt eine der Quellen für die Schwierigkeiten bei der Quantisierung des elektromagnetischen Feldes [siehe Gleichung (8.62) unten].

Wir skizzieren nun den kanonischen Formalismus für die Wellengleichung (8.23), wobei wir uns eng an den vorangegangenen Paragraphen anlehnen.

In die Lagrange-Dichte gehen als generalisierte Koordinaten die unabhängigen dynamischen Feldvariablen ein; das sind in diesem Fall das Vektorpotential und seine Zeitableitung (hierbei wird die Eichung außer acht gelassen, die ja auch unabhängig von der Wellengleichung ist): $\mathcal{L}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{L}(\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t))$. Die Lagrange-Gleichungen lauten somit

¹⁰ Bereits Maxwell (*On Faraday's lines of force*, 1856) sah die Potenziale als physikalische, nicht nur als Hilfsgrößen an. Ihre physikalische Relevanz tritt spätestens im Schwarzschild-Sommerfeldschen Prinzip der kleinsten Wirkung zutage (Sommerfeld, *Elektrodynamik*, 2001, §32E) und wurde letztgültig im Aharonov-Bohm-Effekt (1959) nachgewiesen; vgl. auch die historischen Anmerkungen in Tricker, *Faraday und Maxwell*, 1974, S.131; Sommerfeld, *a.a.O.*; Longair, *Theoretical Concepts in Physics*, 2003, S.91.

¹¹ Siehe z. B. Greiner & Reinhardt, *Feldquantisierung*, 1993, §7.6.

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)} - \frac{\delta L}{\delta \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)} = \mathbf{0} \quad (8.24)$$

Die Wellengleichung (8.23) folgt dann aus der Lagrange-Funktion

$$L(t) = \frac{1}{2} \int \left[\varepsilon_0 \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)^2 - \mu_0^{-1} (\nabla A_x(\mathbf{r}, t))^2 - \mu_0^{-1} (\nabla A_y(\mathbf{r}, t))^2 - \mu_0^{-1} (\nabla A_z(\mathbf{r}, t))^2 \right] d^3r \quad (8.25)$$

Die zum Vektorpotenzial $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ konjugierte *kanonische Impulsdichte* lautet folglich

$$\boldsymbol{\Pi}(\mathbf{r}, t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\delta L(t)}{\delta \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)} = \varepsilon_0 \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \quad (8.26)$$

Mit ihr folgt die *Hamilton-Funktion* zu

$$\begin{aligned} H[\mathbf{A}, \boldsymbol{\Pi}] &= \int \boldsymbol{\Pi} \cdot \dot{\mathbf{A}} d^3r - L \\ &= \frac{1}{2} \int \left[\varepsilon_0^{-1} \boldsymbol{\Pi}^2 + \mu_0^{-1} (\nabla A_x)^2 + \mu_0^{-1} (\nabla A_y)^2 + \mu_0^{-1} (\nabla A_z)^2 \right] d^3r \end{aligned} \quad (8.27)$$

Aufgabe: Diskutieren Sie den Begriff „Vakuum“ anhand der Tatsache, dass ε_0 und μ_0 endlich sind! Hinweis: Diese Tatsache bedeutet, dass das „Vakuum“ polarisierbar und magnetisierbar ist.

Aufgabe:* Diskutieren Sie das Problem der Eichinvarianz unter dem Gesichtspunkt der Freiheitsgrade! Hinweis: Verringert die Eichinvarianz die Anzahl der unabhängigen dynamischen Variablen?

Aufgabe: Begründen Sie die einzelnen Faktoren in $L(t)$ anhand der Energiedichte! Hinweis: Vergleichen Sie die Formel $E = \frac{1}{2} \int (\varepsilon_0 \mathbf{E}^2 + \mu_0^{-1} \mathbf{B}^2) d^3r$ mit Gleichung (8.27)!

8.2.3 Normalmoden-Entwicklung

Eine Saite der Länge l , deren Schwingungen durch die Wellengleichung beschrieben werden, ist ein mechanischer Resonator, in dem die Normalmoden

$$u_w(x) = \sqrt{2} \sin(wx); \quad w = w_j = \frac{\pi}{l} j; \quad j = 1, 2, 3, \dots \quad (8.29)$$

existieren können. Diese Normalmoden sind orthogonal zueinander:

$$\int_0^l u_w(x) u_{w'}(x) dx = \delta_{w'w} l \quad (8.30)$$

und es gilt die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_w u_w(x)u_w(x') = \delta(x - x') \cdot l \quad (8.31)$$

Dies berechtigt uns, die Feldvariablen $u(x, t)$ und $\pi(x, t)$ in eine Fourier-Reihe nach diesen Normalmoden w zu entwickeln:

$$u(x, t) = \sum_w q_w(t)u_w(x); \quad \pi(x, t) = \sum_w \pi_w(t)u_w(x); \quad \pi_w(t) \equiv \rho \dot{q}_w(t) \quad (8.32)$$

Für die Energiedichte (8.17) ergeben sich eher unanschauliche Doppelreihen über die Wellenzahlen w . Der Ausdruck für die Gesamtenergie (8.19) vereinfacht sich jedoch dank der Orthogonalität (8.30) zu

$$E_{tot}^{(kl)} = \sum_w E_w^{(kl)}; \quad E_w^{(kl)} = \frac{l}{2\rho} \pi_w^2(t) + \frac{glw^2}{2} q_w^2(t) \quad (8.33)$$

Dies ist gleich der Summe der Energien E_w der *Normalschwingungen* $q_w(t)$. Letztere sind jeweils gleich der Energie eines klassischen Federschwingers mit der Masse $M_w = \rho l$, der Federkonstanten $\kappa_w = glw^2$ und der Kreisfrequenz

$$\omega_w = \sqrt{\frac{\kappa_w}{M_w}} = \sqrt{\frac{g}{\rho}} w = cw \quad (8.34)$$

Die den Ortsvariablen $q_w(t)$ entsprechenden kartesischen Impulse sind

$$p_w(t) = M_w \dot{q}_w(t) = l \cdot \pi_w(t) \quad (8.35)$$

Damit lautet die punktmechanische Zustandsgleichung eines solchen Oszillators

$$H_w(q_w(t), p_w(t)) = \frac{1}{2M_w} p_w^2(t) + \frac{\kappa_w}{2} q_w^2(t) = E_w^{(kl)} = const; \quad (8.36)$$

$$\sum_w H_w(q_w(t), p_w(t)) = E_{tot}^{(kl)}$$

Aufgabe:* Zeigen Sie, dass die Vollständigkeitsrelation die Äquivalenz der Beschreibung der hier untersuchten Vorgänge durch ein überabzählbar unendliches Kontinuum einerseits und eine abzählbar unendliche Menge andererseits sichert!

8.3 Quantisierung der Normalschwingungen

8.3.1 Quantisierung der Entwicklungskoeffizienten q_w und p_w

Die Hamilton-Funktionen H_w (8.36) besitzen konstruktionsgemäß exakt die Struktur der Hamilton-Funktion des harmonischen Oszillators der Punktmechanik. Wir können deshalb dessen quantenmechanische Form sofort übertragen: $H_w(q_w, p_w) \rightarrow H_w(\hat{q}_w, \hat{p}_w)$. Als Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung erhalten wir Produkte (4.61) aus Gauß-Funktion und Hermiteschen

Polynomen für die Wellenfunktionen $\psi_w(q_w)$ und $\phi_w(p_w)$ sowie die Energien $E_{n_w} = \hbar\omega_w(n_w + \frac{1}{2})$ mit $n_w = 0, 1, \dots$ und $w = w_1, w_2, \dots$.

8.3.2 Besetzungszahl-Darstellung

Zur Interpretation des quantisierten Feldes nehmen wir an, dass die Feldvariable $u(x, t)$ das linear polarisierte elektromagnetische Feld in einem Resonator beschreibt, das mit einem äußeren elektromagnetischen Strahlungsfeld und über dieses mit den Feldern in einer großen Anzahl gleichartiger Resonatoren im Gleichgewicht steht. Die Frequenz aller Resonator-Felder sei die der Grundmode ($w = w_1$). Wenn man dieses Gleichgewicht auf die Plancksche Weise betrachtet, dann entsprechen die Energiequanten $\hbar\nu \equiv \hbar\omega_1$ den „Energieelementen“, die Planck auf die Resonatoren aufteilt (siehe § 6.1.1). Mithin ist $n_w^{(i)} = p_i^{(w)}$ die Anzahl der Energiequanten $\hbar\omega_w$ im Zustand $E_{n_w} = (\frac{1}{2} + n_w)\hbar\omega_w$ der Mode w im Resonator i . Die Zustände E_1, E_2, \dots, E_{n_w} jeder einzelnen Mode w werden *sukzessive* besetzt.

Diese sukzessive Besetzung wird nun wieder zweckmäßigerweise mit Hilfe von Leiteroperatoren wie (6.1) beschrieben:

$$b_w = i\sqrt{\frac{\omega_w}{2\hbar\kappa_w}}\hat{p}_w + \sqrt{\frac{\kappa_w}{2\hbar\omega_w}}\hat{q}_w = i\sqrt{\frac{1}{2\hbar\sqrt{\rho g w}}}\hat{p}_w + \sqrt{\frac{\sqrt{\rho g w}}{2\hbar}}\hat{q}_w \quad (8.37)$$

$$b_w^+ = -i\sqrt{\frac{\omega_w}{2\hbar\kappa_w}}\hat{p}_w + \sqrt{\frac{\kappa_w}{2\hbar\omega_w}}\hat{q}_w = -i\sqrt{\frac{1}{2\hbar\sqrt{\rho g}}}\hat{p}_w + \sqrt{\frac{\sqrt{\rho g w}}{2\hbar}}\hat{q}_w \quad (8.38)$$

Mit ihnen erhalten wir für den Hamiltonian der Mode w erwartungsgemäß den Ausdruck

$$\hat{H}_w = \hbar\omega_w \left(b_w^+ b_w + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega_w \left(\hat{n}_w + \frac{1}{2} \right); \quad \hat{n}_w = b_w^+ b_w \quad (8.39)$$

Der Gesamt-Hamiltonian als Summe aller Moden-Hamiltonians wird schließlich

$$\hat{H}_{tot} = \sum_w \hat{H}_w = \sum_w \hbar\omega_w \left(\hat{n}_w + \frac{1}{2} \right); \quad \hat{n}_w = b_w^+ b_w \quad (8.40)$$

Er beinhaltet die diskreten Anregungen eines nichtklassischen Feldes – dessen räumliche Verteilung im Normierungsvolumen aber nach wie vor auf klassische Weise beschrieben wird: Für die Moden selbst besteht ja kein Anlass zur nichtklassischen Behandlung, weil ihre Ausdehnung und ihr Spektrum nicht durch den Energiesatz, sondern durch die Randbedingungen bestimmt wird. Es ist deshalb nicht unproblematisch, diesen Anregungen einen Teilchencharakter zuzuschreiben. Dies spielt für unsere Anwendungen aber keine Rolle, weshalb wir für weitergehende Überlegungen auf die Literatur verweisen¹².

¹² Siehe z. B. Schleich, *Quantum Optics in Phase Space*, 2000, Kap.10.

Die Bra-Ket-Darstellung des Feld-Hamiltonians lautet natürlich

$$\bar{H}_{tot} = \sum_w \sum_{n_w=0}^{\infty} |n_w\rangle E_{n_w} \langle n_w|; \quad E_{n_w} = \hbar\omega_w \left(n_w + \frac{1}{2} \right) \quad (8.41)$$

Da die Quantenzahlen n_w nach oben unbegrenzt sind, kann jede einzelne Normalmode w mit einer unbegrenzten Anzahl von Energiequanten $\hbar\omega_w$ besetzt werden. Dies führt zu neuartigen Quanteneffekten (Laser!), auf die wir bereits im § 6.3.3 eingegangen sind.

8.4 Feld-Quantisierung

Wir wenden nun die obigen Ausführung auf die Quantisierung des Schrödinger-Feldes $\psi(\mathbf{r}, t)$ und des elektromagnetischen Feldes an.

8.4.1 Kanonische Feld-Quantisierung

Die kanonische Feld-Quantisierung ist für die oben betrachteten Felder eine methodische Alternative zur Normalmoden-Entwicklung. Sie kann zur Quantisierung von Feldern benutzt werden, die nicht nach Normalmoden entwickelt werden können bzw. bei denen diese Entwicklung nicht eindeutig vorgegeben ist. Wir werden sie als Vorarbeit für die 2. Quantisierung benutzen.

Mit der Quantisierung der Entwicklungskoeffizienten: $q_w(t) \rightarrow \hat{q}_w$, werden auch die Feldvariablen $u(x, t)$ und $\pi(x, t)$ zu Operatoren (die Zeitabhängigkeit wird wieder auf die Wellenfunktionen gewälzt):

$$u(x, t) \rightarrow \hat{u}(x) = \sum_w \hat{q}_w u_w(x); \quad \pi(x, t) \rightarrow \hat{\pi}(x) = \sum_w \hat{p}_w u_w(x) \quad (8.42)$$

Für diese Operatoren gilt mit $[\hat{\pi}_w, \hat{q}_{w'}] = -i\hbar l^{-1} \delta_{ww'}$ die Vertauschungsrelation

$$[\hat{\pi}(x), \hat{u}(x')] = -i\hbar \delta(x - x') \quad (8.43)$$

Sie kann formal durch die Darstellungen

$$\hat{u}(x) = u(x); \quad \hat{\pi}(x) = -i\hbar \frac{\delta}{\delta u(x)} \quad (8.44)$$

beziehungsweise

$$\hat{u}(x) = i\hbar \frac{\delta}{\delta \pi(x)}; \quad \hat{\pi}(x) = \pi(x) \quad (8.45)$$

erfüllt werden, analog zur Orts- bzw. Impulsdarstellung in der Wellenmechanik.

Die kanonische Feld-Quantisierung besteht nun gerade darin, dass man – und zwar *ohne* eine Ableitung wie die obige zugrunde zu legen – die Feldamplitude und ihre kanonische Impulsdichte *per Postulat* zu Operatoren erklärt und sie Vertauschungsrelationen wie (8.43) unterwirft.¹³ Der Vorteil dieses Verfahrens besteht in seiner Anwendbarkeit auf nicht-mechanische Felder, in denen die Masse und also der kartesische Impuls nicht vorgegeben sind. Beispiele hierfür sind das elektromagnetische Feld und das Schrödinger-Feld (2. Quantisierung). Die Erfüllung dieser Vertauschungsrelationen kann man dann mit Hilfe von Moden-Entwicklungen erreichen.

Merke: Jede Quantisierungsvorschrift setzt eine etablierte klassische Beschreibung voraus!

Aufgabe: Beweisen Sie die Richtigkeit der Vertauschungsrelation (8.43)! Hinweis: Gl.(8.31)

8.4.2 Zweite Quantisierung für Bosonen

Zu diesen nichtmechanischen Fällen gehört die sogenannte Zweite Quantisierung. In ihr werden die Integrale in der nichtklassischen Darstellung (4.43) der Energie als Integrale über die Energiedichte $\mathcal{E}(x)$ und die Hamilton-Dichte $\mathcal{H}(x)$ angesehen (vgl. Born, 1926b, § 1):

$$\int \mathcal{E}(x)dx \equiv \int E\bar{\psi}_E(x)\psi_E(x)dx = \int \bar{\psi}_E(x)\hat{H}(x)\psi_E(x)dx \equiv \int \mathcal{H}(x)dx \quad (8.46)$$

Betrachtet man nun die Wellenfunktionen $\psi(x, t)$ und $\phi(p, t)$ als *Feldfunktionen* – Schrödinger bezeichnete ψ auch als „mechanischen Feldskalar“ (*Vierte Mitteilung*, §1) –, so kann die kanonische Quantisierung auch an ihnen vollzogen werden. Diese 2. Quantisierung betrifft also nicht – wie die im 4. Kapitel betrachtete 1. Quantisierung – die Menge der möglichen Zustände. Die Namensgebung bezieht sich vielmehr darauf, dass die Wellenfunktionen der 1. Quantisierung und ihre kanonisch Konjugierten – wie zuvor die Variablen x und p – zu Operatoren werden¹⁴:

$$\psi(x, t) \rightarrow \hat{\psi}(x); \quad \bar{\psi}(x, t) \rightarrow \hat{\psi}^+(x); \quad \phi(p, t) \rightarrow \hat{\phi}(p); \quad \bar{\phi}(p, t) \rightarrow \hat{\phi}^+(p) \quad (8.47)$$

Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (4.114) lässt sich aus der Lagrange-Dichte

¹³ Siehe die umfassende Darstellung in Wentzel, *Quantentheorie der Wellenfelder*, 1943.

¹⁴ Mitunter wird hierfür auch die Wellenmechanik als „klassische“ Wellentheorie, die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ als klassische (Feld)Funktion angesehen (z. B. Heisenberg, 1929, S.97; Haken, 1973, §12; Fick, 1988, § 1.3.1). – Wegen $\bar{\psi} \neq \psi$ und $\bar{\phi} \neq \phi$ sind $\hat{\psi}$ und $\hat{\phi}$ – im Unterschied zu \hat{u} in Gl. (8.42) – keine selbstadjungierten Operatoren.

$$\mathcal{L}(x, t) = i\hbar\bar{\psi}(x, t)\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) - \frac{\hbar^2}{2M}\nabla\bar{\psi}(x, t)\nabla\psi(x, t) - V(x, t)\bar{\psi}(x, t)\psi(x, t) \quad (8.48)$$

gewinnen. Die zu ψ kanonisch konjugierte Impulsdichte ist demnach

$$\pi(x, t) = \frac{\partial\mathcal{L}(x, t)}{\partial\dot{\psi}(x, t)} = i\hbar\bar{\psi}(x, t) \quad (8.49)$$

Da $i\hbar$ nurmehr ein konstanter Faktor ist, arbeitet man in der Regel mit $\psi(x, t)$ und $\bar{\psi}(x, t)$ als unabhängigen dynamischen Variablen, wie es in den Beziehungen (8.47) bereits angedeutet wurde.

Die – analog zu denen für \hat{x} und \hat{p} – zu postulierenden kanonischen Vertauschungsrelationen (VR) lauten somit

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^+(x')] &= \delta(x - x'); & [\hat{\phi}(p), \hat{\phi}^+(p')] &= \delta(p - p'); \\ [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(x')] &= [\hat{\psi}^+(x), \hat{\psi}^+(x')] = [\hat{\phi}(p), \hat{\phi}(p')] = [\hat{\phi}^+(p), \hat{\phi}^+(p')] = 0 \end{aligned} \quad (8.50)$$

Sie gelten zunächst für zeitunabhängige Operatoren, ihre Gültigkeit auch für gleichzeitige Operatoren lässt sich mit Hilfe der Bewegungsgleichungen zeigen. Auf die VR für $\hat{\psi}(x, t)$ und $\hat{\psi}^+(x', t')$ bzw. $\hat{\phi}(p, t)$ und $\hat{\phi}^+(p', t')$ bei $t' \neq t$ können wir leider nicht eingehen, da dies unseren nichtrelativistischen Rahmen überschreiten würde.

Stellt man die Feldoperatoren durch die Normalmoden-Entwicklungen

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(x) &= \sum_{\mu} \psi_{\mu}(x) b_{\mu}; & \hat{\psi}^+(x) &= \sum_{\mu} \bar{\psi}_{\mu}(x) b_{\mu}^+; \\ \hat{\phi}(p) &= \sum_{\mu} \phi_{\mu}(p) b_{\mu}; & \hat{\phi}^+(p) &= \sum_{\mu} \bar{\phi}_{\mu}(p) b_{\mu}^+ \end{aligned} \quad (8.51)$$

dar ($\{\mu\}$ – vollständiger Satz von Quantenzahlen), so sieht man, dass die Operatoren b_{μ} und b_{μ}^+ gerade den *bosonischen* VR (6.6) genügen. Die Permutationssymmetrie $\hat{\psi}(x_2, x_1) = \hat{\psi}(x_1, x_2)$ möge der Leser selbständig nachweisen.

Es wäre allerdings voreilig, die Ersetzungen (8.47) einfach in die Gleichung (8.46) einzusetzen, d. h. als Hamilton-Operator den Ausdruck $\hat{H} = \int \hat{\psi}^+(x) \hat{H}(x) \hat{\psi}(x) dx$ anzunehmen. Denn im Unterschied zu $\bar{\psi}(x) \hat{H}(x) \psi(x) = \psi(x) \hat{H}(x) \bar{\psi}(x)$ ist $\hat{\psi}^+(x) \hat{H}(x) \hat{\psi}(x) \neq \hat{\psi}(x) \hat{H}(x) \hat{\psi}^+(x)$. Um dieses Problem zu lösen, besinnen wir uns auf die Faktorisierung der klassischen Hamilton-Funktion für den harmonischen Oszillator im § 3.4.3. In jenem Fall führte die Symmetrisierung

$$\tilde{H}(b, b^*) \equiv \frac{1}{2} [\tilde{H}(b, b^*) + \tilde{H}(b^*, b)] \rightarrow \frac{1}{2} [\tilde{H}(\hat{b}, \hat{b}^*) + \tilde{H}(\hat{b}^*, \hat{b})] \quad (8.52)$$

zum Ziel. Deshalb setzen wir

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \left[\int \hat{\psi}^+(x) \hat{H}(x) \hat{\psi}(x) dx + \int \hat{\psi}(x) \hat{H}(x) \hat{\psi}^+(x) dx \right] \quad (8.53)$$

Wenn wir hier die Entwicklungen (8.51) einsetzen, gelangen wir zu dem korrekten Ausdruck

$$\hat{H} = \sum_{\mu} E_{\mu} \left(b_{\mu}^+ b_{\mu} + \frac{1}{2} \right) \quad (8.54)$$

Aufgabe: Ist $H(x)$ durch (8.46) eindeutig bestimmt? Hinweis: Vertauschen Sie $\psi(x)$ mit $\bar{\psi}(x)$!

Aufgabe:* Leiten Sie die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung aus der Lagrange-Dichte (8.48) her! Hinweis: Variieren Sie $\psi(x, t)$ und $\bar{\psi}(x, t)$ unabhängig voneinander!

Aufgabe: Rechtfertigen Sie die Entwicklungen (8.51)! Wie kann man Systeme mit kontinuierlichem Spektrum einbeziehen? Hinweise: $\{\psi_{\mu}\}$ sei ein vollständiges Orthonormalsystem, bilden Sie ein geeignetes Normierungsvolumen und zeigen Sie, dass $\hat{\psi}(x_2, x_1) = \hat{\psi}(x_1, x_2)$ gilt!

8.4.3 Zweite Quantisierung für Fermionen

In der nichtrelativistischen Quantenmechanik ist der Gebrauch der 2. Quantisierung für Elektronen-Zustände nur eine Sache der Bezeichnung.

(W. A. Harrison, 1970¹⁵)

Wir gehen ganz analog zum vorhergehenden Abschnitt vor. Weil jetzt $\hat{\psi}(x_2, x_1) = -\hat{\psi}(x_1, x_2)$ gefordert ist, ersetzen wir in den Entwicklungen die bosonischen durch die fermionischen Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(x) &= \sum_{\mu} \psi_{\mu}(x) a_{\mu}; & \hat{\psi}^+(x) &= \sum_{\mu} \bar{\psi}_{\mu}(x) a_{\mu}^+ \\ \hat{\phi}(p) &= \sum_{\mu} \phi_{\mu}(p) a_{\mu}; & \hat{\phi}^+(p) &= \sum_{\mu} \bar{\phi}_{\mu}(p) a_{\mu}^+ \end{aligned} \quad (8.55)$$

Aus den Anti-Vertauschungsregeln (Anti-VR) (7.5) und (7.6) erhält man für die Feldoperatoren ohne große Mühe die *Anti-VR*

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(x) \hat{\psi}^+(x') + \hat{\psi}^+(x') \hat{\psi}(x) &= \delta(x - x'); \\ \hat{\psi}(x) \hat{\psi}(x') + \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x) &= \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}^+(x') + \hat{\psi}^+(x') \hat{\psi}^+(x) = 0 \end{aligned} \quad (8.56)$$

und

$$\begin{aligned} \hat{\phi}(p) \hat{\phi}^+(p') + \hat{\phi}^+(p') \hat{\phi}(p) &= \delta(p - p'); \\ \hat{\phi}(p) \hat{\phi}(p') + \hat{\phi}(p') \hat{\phi}(p) &= \hat{\phi}^+(p) \hat{\phi}^+(p') + \hat{\phi}^+(p') \hat{\phi}^+(p) = 0 \end{aligned} \quad (8.57)$$

¹⁵ Walter Ashby Harrison (*1934), *Solid State Theory*, Ausgabe 1980, S.399.

Sie gelten zunächst für zeitunabhängige Operatoren, ihre Gültigkeit auch für gleichzeitige Operatoren lässt sich wieder mit Hilfe der Bewegungsgleichungen zeigen. Wie die VR erfordern auch die Anti-VR für *nicht*-gleichzeitige Operatoren eine relativistische Behandlung, die jenseits des Rahmens dieser Darstellung liegt.

Der Hamilton-Operator in 2. Quantisierung lautet dementsprechend

$$\hat{H} = \int \hat{\psi}^+(x) \hat{H}(x) \hat{\psi}(x) dx = \int \hat{\phi}^+(p) \hat{H}(p) \hat{\phi}(p) dp = \sum_{\mu} E_{\mu} a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu} = \sum_{\mu} E_{\mu} \hat{n}_{\mu} \quad (8.58)$$

Er beschreibt ein Ensemble nicht wechselwirkender Elektronen in den Einteilchen-Zuständen $|n_{\mu}\rangle$. Seine Bra-Ket-Darstellung lautet offenbar

$$\bar{H} = \sum_{\mu} \sum_{n_{\mu}=0}^1 |n_{\mu}\rangle E_{\mu} \langle n_{\mu}| \quad (8.59)$$

Im Unterschied zum harmonischen Oszillator (6.19) und zum bosonischen Feld (8.41) laufen hier die Besetzungszahlen n_{μ} nur von Null bis Eins und die Energien E_{μ} hängen *nicht* von den n_{μ} ab. Umgekehrt haben die Operatoren a und a^+ – im Unterschied zu den Operatoren b und b^+ – nichts mit dem Energiespektrum zu tun. Infolgedessen liefert die Schrödinger-Gleichung in 2. Quantisierung:

$$\hat{H} |\psi\rangle = \sum_{\mu} E_{\mu} \hat{n}_{\mu} |\psi\rangle; \quad |\psi\rangle = \sum_{\mu} c_{\mu} |n_{\mu}\rangle; \quad \sum_{\mu} |c_{\mu}|^2 = 1 \quad (8.60)$$

keine neuen Ergebnisse; die Energiewerte E_{μ} und Koeffizienten c_{μ} sind Input und müssen im Rahmen der 1. Quantisierung berechnet werden.

Aufgabe: Begründen Sie die Behauptung von Harrison (Zitat am Anfang dieses Paragraphen)! Hinweis: Beziehung der Besetzungszahl-Operatoren zu dynamischen Variablen

Aufgabe: Warum entfällt in Formel (8.58) die Symmetrisierung? Hinweis: Anti-VR (8.56)

Aufgabe: Beweisen Sie die Anti-VR (8.56)! Hinweis: Benutzen Sie die Vollständigkeitsrelation für die Funktionen $\psi_{\mu}(x)$!

8.4.4 Quantisierung der Elektromagnetischen Wellen: Photonen

Es erscheint nicht angebracht, eines von diesen hypothetischen Gebilden Lichtteilchen, Lichtkorpuskel, Lichtquant oder Lichtquantum zu nennen ... Darum nehme ich mir die Freiheit und schlage für dieses hypothetische neue Atom, das nicht Licht ist, aber eine wichtige Rolle in allen Strahlungsvorgängen spielt, den Namen Photon vor.

(G. N. Lewis, 1926¹⁶)

Die Photonen („Lichtteilchen“) sind vielleicht die rätselhaftesten physikalischen Objekte überhaupt¹⁷. Euler hat das Licht wegen seiner Durchdringlichkeit nicht zum Gegenstandsbereich der Klassischen Mechanik gerechnet. Die nichtklassischen Eigenschaften der elektromagnetischen Strahlung waren der Anstoß bei der „Entdeckung“ des Wirkungsquantums (Planck 1900), und sie spielten bei der Entwicklung der Quantentheorie (Einstein 1905, 1916) eine entscheidende Rolle. In den Diskussionen über die Natur des Lichtes ist der Welle(Huygens, Euler)-Teilchen(Newton¹⁸)-Dualismus so geschichtsnotorisch geworden, dass er in die Quantentheorie übertragen wurde.

Da sich Lichtstrahlen offensichtlich nicht auf klassischen Bahnkurven bewegen, kann man nicht – wie beim harmonischen Oszillator – die Orts- und Impulsvariablen quantisieren. Die nichtmechanischen Eigenschaften des elektromagnetischen Feldes sind deshalb der eigentliche Anlass zur Entwicklung der Quantenfeldtheorie gewesen.

Wir führen der Einfachheit halber die kanonische Quantisierung durch und übertragen dazu die Darlegungen des § 8.4.1 auf das Vektorpotenzial $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$.

Die Feldvariable und ihr kanonischer Impuls werden hiernach zu Operatoren erklärt:

$$A_i(\mathbf{r}, t) \rightarrow \hat{A}_i(\mathbf{r}); \quad \Pi_i(\mathbf{r}, t) \rightarrow \hat{\Pi}_i(\mathbf{r}); \quad i = x, y, z \quad (8.61)$$

und geeigneten Vertauschungsrelationen unterworfen:

$$\begin{aligned} [\hat{A}_i(\mathbf{r}), \hat{A}_j(\mathbf{r}')] &= [\hat{\Pi}_i(\mathbf{r}), \hat{\Pi}_j(\mathbf{r}')] = 0 \\ [\hat{\Pi}_i(\mathbf{r}), \hat{A}_j(\mathbf{r}')] &= -i\hbar\delta_{ij}^{\text{tr}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv -i\hbar \left(\delta_{ij} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{1}{4\pi} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \end{aligned} \quad (8.62)$$

Das Auftreten der transversalen δ -Funktion δ_{ij}^{tr} ergibt sich aus der Transversalität der hier betrachteten Wellen; sie ist ein Zeichen für die Schwierigkeiten der Quantisierung des elektromagnetischen Feldes.¹⁹

¹⁶ Gilbert Newton Lewis (1875-1946), *The conservation of photons*, 1926 (zit. nach Kuhn & Strnad, 1995, S.109).

¹⁷ Vgl. die zahlreichen amüsanten und lehrreichen Zitate in Kuhn & Strnad, *Quantenfeldtheorie*, 1995.

¹⁸ Newton war jedoch nicht ignorant gegenüber der Wellenauffassung (Paul, *Photonen*, 1999, S.22).

¹⁹ Gupta [Proc. Phys. Soc. L. 53 A (1950) 681] und Bleuler [Helv. Phys. Acta 23 (1950) 567; beide zit. nach Heitler, 1984, S.90] haben eine *explicit* kovariante

Die Hamilton-Funktion wird dadurch zum Hamilton-Operator (Hamiltonian)

$$\hat{H} = H[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{\Pi}}] = \frac{1}{2} \int \left[\varepsilon_0^{-1} \hat{\mathbf{\Pi}}^2 + \mu_0^{-1} \left(\nabla \hat{A}_x \right)^2 + \mu_0^{-1} \left(\nabla \hat{A}_y \right)^2 + \mu_0^{-1} \left(\nabla \hat{A}_z \right)^2 \right] d^3r \quad (8.63)$$

Die Operatoren $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$ und $\hat{\mathbf{\Pi}}(\mathbf{r})$ wirken auf gewisse Wellenfunktionen – für unsere Zwecke ist es aber wieder bequemer, die Besetzungszahl-Darstellung zu verwenden. Dazu werden die Operatoren $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$ und $\hat{\mathbf{\Pi}}(\mathbf{r})$ nach *Normal-Moden* entwickelt:

$$\hat{A}_j(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{w}} \sqrt{\frac{\hbar Z_0}{2V}} e_{\mathbf{w},j} [b_{j\mathbf{w}} e^{i\mathbf{w} \cdot \mathbf{r}} + b_{j\mathbf{w}}^+ e^{-i\mathbf{w} \cdot \mathbf{r}}] \quad (8.64)$$

$$\hat{\Pi}_j(\mathbf{r}) = i \sum_{\mathbf{w}} \sqrt{\frac{\hbar \mathbf{w}}{2Z_0 V}} e_{\mathbf{w},j} [-b_{j\mathbf{w}} e^{i\mathbf{w} \cdot \mathbf{r}} + b_{j\mathbf{w}}^+ e^{-i\mathbf{w} \cdot \mathbf{r}}] \quad (8.65)$$

(V – Normierungsvolumen für periodische Randbedingungen; $\mathbf{e}_{\mathbf{w}}$ – Polarisationsvektor; $j = 1, 2$ – Polarisationsmoden-Index; \mathbf{w} – Wellenzahlvektor; $Z_0 = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0}$ – Wellenwiderstand des „Vakuums“). $b_{j\mathbf{w}}$ und $b_{j\mathbf{w}}^+$ sind Bose-Operatoren mit den Vertauschungsrelationen

$$[b_{j\mathbf{w}}, b_{j'\mathbf{w}'}^+] = \delta_{\mathbf{w}\mathbf{w}'} \delta_{jj'}; \quad [b_{j\mathbf{w}}, b_{j'\mathbf{w}'}] = [b_{j\mathbf{w}}^+, b_{j'\mathbf{w}'}^+] = 0 \quad (8.66)$$

Mithin wird aus dem Feld-Hamiltonian (8.63) der Hamiltonian einer Summe unabhängiger harmonischer Oszillatoren (das war wieder das anti-zierte Ziel!):

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{w},j} \hbar \omega_{\mathbf{w}} \left(b_{j\mathbf{w}}^+ b_{j\mathbf{w}} + \frac{1}{2} \right); \quad \omega_{\mathbf{w}} = c |\mathbf{w}| \quad (8.67)$$

In der Normalmoden-Entwicklung wird allerdings die räumliche Verteilung auch des quantisierten elektromagnetischen Feldes nach wie vor durch *klassische* Moden beschrieben. Es ist deshalb nicht unproblematisch, diesen Anregungen einen Teilchencharakter („Photonen“) zuzuschreiben (Schleich, 2000, Kap.10).

Quantisierungsmethode unter Einbeziehung aller Feldkomponenten entwickelt (s. auch Gupta, 1951). Allerdings treten hierbei zusätzliche, skalare Photonen und die instantane Coulomb-WW auf (wobei die Endergebnisse frei von diesen Artefakten sind). Dieser Zugang besitzt Vorteile in bestimmten Anwendungen und wird deshalb und wegen seiner methodischen Bedeutung in vielen Lehrbüchern besprochen (Gupta, *Quantum Electrodynamics*, 1977; Pauli, *Selected Topics in Field Quantization*, 2000, Sec.15c; Schwabl, *QM II*, Anhang E; Greiner & Reinhardt, *Feldquantisierung*, 1993, §7.3).

Tiefer braucht man für die meisten festkörperphysikalischen Anwendungen nicht in die Materie einzudringen. Die Behandlung der hierüber hinausgehenden, außerordentlich interessanten und sich nach wie vor stürmisch entwickelnden Fragen der Quantenoptik würde den hier ins Auge gefassten Rahmen weit überschreiten.²⁰ Dabei dringt sie in immer neue Anwendungsbereiche vor; wir führen mit der rauscharmen Signalübertragung mittels nichtklassischen Lichtes, der Daten-Sicherheit durch die Übermittlung einzelner Photonen („Quanten-Kryptographie“) und der Quanten-Teleportation nur drei aktuelle Beispiele an.²¹

Aufgabe: Leiten Sie die Gleichungen (8.62) aus der Coulomb-Eichung her (Haken, 1973, S.84f.; Greiner & Reinhardt, 1993, §7.4)!

Aufgabe:* Mit welchen „Orten“ und „Impulsen“ sind die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren (8.66) verknüpft?²²

8.5 Beispiel: Elektron-Elektron-Wechselwirkung in Festkörpern

Wir kommen nun zu einer Thematik, für die die quantenfeldtheoretische Formulierung und insbesondere die 2. Quantisierung nicht nur eine elegante, mitunter systematisierende und vereinheitlichende Neuformulierung darstellt, sondern eine tiefergehende Bearbeitung dank systematischer Näherungsmethoden überhaupt erst ermöglicht. Dabei ist die zu behandelnde Wechselwirkung (WW) *genuin* nichtlinear, ihr Einfluss auf die Zustände des Gesamtsystems kann also nicht – wie im Fall der gekoppelten Oszillatoren (Phononen) – mittels Diagonalisierung elementar berechnet werden. In diesem Abschnitt legen wir den grundlegenden Formalismus dar und illustrieren ihn anhand von einfachen Effekten in Metallen, Isolatoren und Halbleitern.

8.5.1 Coulomb-Wechselwirkung. Hartree-Fock-Ansatz

Für die hier interessierenden Effekte genügt es, die Elektron-Elektron-WW als statische Paar-WW zu behandeln. Analog zu der Kopplung zweier har-

²⁰ Siehe z. B. Mandel & Wolf, *Optical Coherence and quantum optics*, 1995; Paul, *Photonen*, 1999; Schleich, *Quantum Optics in Phase Space*, 2000. Eine vom Formalismus her anspruchsvollere Darstellung findet sich in Cohen-Tannoudji, Dupont-Roc & Grynberg, *Atom-Photon Interactions*, 1992.

²¹ Bouwmeester, Ekert & Zeilinger (Hrsg.), *The Physics of Quantum Information*, 2000. – Populärwissenschaftliche Darstellungen finden sich z. B. in Bennett, Brassard & Ekert, *Quanten-Kryptographie*, 2003; Bruß, *Quanteninformatik*, 2003; Morsch, *Licht und Materie*, 2003; Zeilinger, *Einsteins Schleier*, 2003; Zeilinger, *Quanten-Teleportation*, 2003.

²² Diese Frage ist Jettmann, *Konsistente Behandlung der Zeitentwicklung bei der spontanen Lichtemission freier Atome*, 1987, entlehnt; ich danke Prof. L. Fritsche für den Hinweis auf diese Problematik und für die Zusendung einer Kopie dieser Arbeit.

monischer Oszillatoren addieren wir das Coulomb-Potenzial zwischen zwei klassischen Punktladungen $-e$ im Abstand $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ ²³,

$$V_C(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (8.68)$$

(ϵ_0 – Dielektrizitätskonstante des Vakuums), zum Gitterpotenzial (4.138) der nicht-wechselwirkenden Elektronen. Die nichtklassische Darstellung der Energie lautet dann

$$E = \frac{\int \left[\sum_{i=1}^N V_G(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N V_C(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \right] F_E(\mathbf{r}_1 \cdots \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_N}{\int F_E(\mathbf{r}_1 \cdots \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_N} \quad (8.69)$$

$$+ \frac{\int \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N p_i^2 G_E(\mathbf{p}_1 \cdots \mathbf{p}_N) d\mathbf{p}_1 \cdots d\mathbf{p}_N}{\int G_E(\mathbf{p}_1 \cdots \mathbf{p}_N) d\mathbf{p}_1 \cdots d\mathbf{p}_N}$$

Aus ihr erhalten wir die N -Elektronen-Schrödinger-Gleichung (Dirac, 1929)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N V_G(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N V_C(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \right] \psi(\mathbf{r}_1 \cdots \mathbf{r}_N) = E \psi(\mathbf{r}_1 \cdots \mathbf{r}_N) \quad (8.70)$$

Die hier auftretende potentielle Energie ist zwar unabhängig vom Spin, jedoch langreichweitig und nicht gitterperiodisch. Infolgedessen lassen sich die N -Elektronen-Wellenfunktionen nicht analog zu der Blochschen Form (4.142) schreiben und die Rechnungen nicht auf eine Elementarzelle beschränken. Folglich ist man bei der Lösung dieser Gleichung auf Näherungsmethoden angewiesen.

Merke: *Man ist immer geneigt, sich über Vereinfachungen zu freuen – woher aber sollte die schier unerschöpfliche Vielfalt der Natur rühren, wenn alle Zusammenhänge trivial wären?*

Merke: *Die Grundgesetze sind einfach, ihre Anwendung ist es mitnichten!*

Eine der frühesten und immer noch gebräuchlichsten Näherungen ist die Hartree-Fock-Näherung²⁴. Sie benutzt den Produkt-Ansatz (Slater-Determi-

²³ Charles Augustin Coulomb (1736-1806).

²⁴ Douglas Rayner Hartree (1897-1958; 1 Hartree = 2 Rydberg $\approx 27.2\text{eV}$), *The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field*, 1927/1928; Fock, *Approximate Methods for the Solution of Quantum-mechanical Many Body Problems*, 1930. – Das Feld aller anderen Elektronen besitzt im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung die Symmetrie des Ein-Elektronen-Potenzials, deshalb können die Quantenzahlen der Ein-Elektronen-Näherung beibehalten werden.

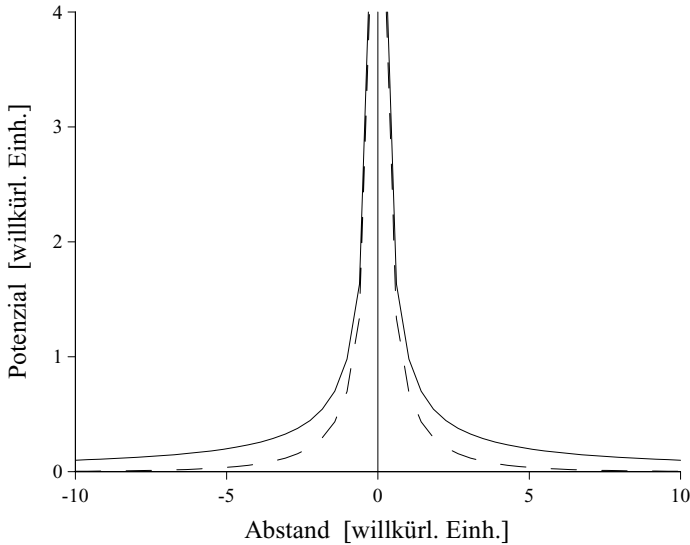


Abb. 8.1. „Nacktes“ (—) und abgeschirmtes Coulomb-Potenzial (- - -)

nante²⁵⁾)

$$\psi(x_1 \cdots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N}} \det |\psi_i(x_j)| \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \cdots & \psi_N(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(x_1) & \cdots & \psi_N(x_N) \end{vmatrix} \quad (8.71)$$

Dieser Ansatz berücksichtigt explizit das Paulische Ausschluss-Prinzip und enthält die Austausch-WW, vernachlässigt aber alle weitergehenden Vielteilchen-Effekte; diese werden unter dem Begriff *Korrelationen* zusammengefasst. Alle Elektronen, bis auf das gerade betrachtete, werden als räumlich fixiert betrachtet. Für viele Anwendungen reicht dies aus, zum Beispiel für Excitonen in Isolatoren (§ 8.5.5) und in Halbleitern (§ 8.5.7). Es gibt jedoch wichtige Effekte, die erst aufgrund dieser Korrelationen entstehen (Fulde, 2001); wir werden darauf im § 8.5.4 näher eingehen.

Tatsächlich reagieren alle anderen Elektronen (wie auch die Gitterbausteine) auf die Bewegung des betrachteten Elektrons. Diese Reaktion führt zur Abschirmung des „nackten“ Coulomb-Potenzials (8.68) durch diese anderen Ladungen, siehe Abb. 8.1.

8.5.2 Zweite Quantisierung. Austausch-Wechselwirkung

Setzt man die Slater-Determinante (8.71) und ihr Pendant im Impulsraum in die rechte Seite der Gleichung (8.69) ein, so kann man gliedweise über alle

²⁵⁾ John Clark Slater (1900-1976), *The Theory of Complex Spectra*, 1929. – Siehe auch Jones & March, *Theoretical Solid State Physics*, Vol.1, 1973, App. A1.1.

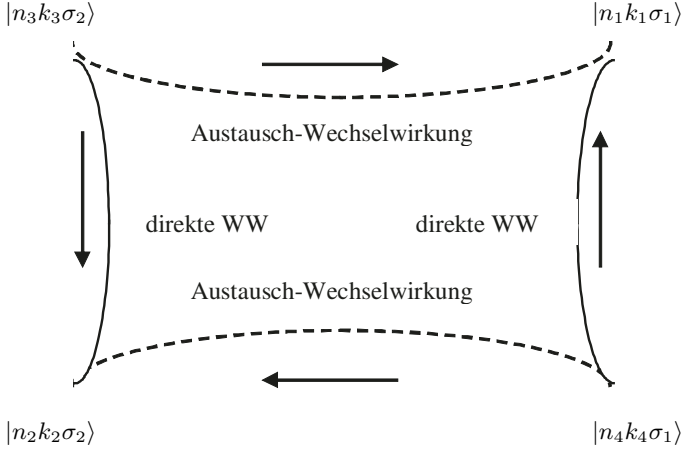


Abb. 8.2. Coulomb-Streuung zweier Elektronen aneinander (s. Text)

Koordinaten $\mathbf{r}_{k \neq i,j}$ integrieren und erhält ein Zweiteilchenproblem, nämlich²⁶

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2} \sum_{n_1 k_1 \dots n_4 k_4} \langle \psi_{n_1 k_1} \psi_{n_2 k_2} | H | \psi_{n_3 k_3} \psi_{n_4 k_4} \rangle a_{n_1 k_1}^+ a_{n_2 k_2}^+ a_{n_3 k_3} a_{n_4 k_4} \quad (8.72) \\ &= \sum_{n k} E_{n k} a_{n k}^+ a_{n k} + \frac{1}{2} \sum_{n_1 k_1 \dots n_4 k_4} W \left(\begin{matrix} n_1 & n_2 & n_3 & n_4 \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{matrix} \right) a_{n_1 k_1}^+ a_{n_1 k_2}^+ a_{n_3 k_3} a_{n_4 k_4} \quad (8.73) \end{aligned}$$

Hier haben wir das *Coulomb-Matrixelement* ($\sigma_{1\dots 4}$ sind Spin-Indices)

$$\begin{aligned} &W \left(\begin{matrix} n_1 \sigma_1 & n_2 \sigma_2 & n_3 \sigma_3 & n_4 \sigma_4 \\ \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \end{matrix} \right) \\ &= \int \int_{\text{Kristall}} \bar{\psi}_{n_1 \sigma_1 \mathbf{k}_1}(\mathbf{r}') \bar{\psi}_{n_2 \sigma_2 \mathbf{k}_2}(\mathbf{r}) V_C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{n_3 \sigma_3 \mathbf{k}_3}(\mathbf{r}) \psi_{n_4 \sigma_4 \mathbf{k}_4}(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \\ &= \delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} W \left(\begin{matrix} n_1 \sigma_1 & n_2 \sigma_2 & n_3 \sigma_3 & n_4 \sigma_4 \\ \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \end{matrix} \right) \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \quad (8.74) \end{aligned}$$

eingeführt. Es beschreibt die Streuung zweier Elektronen aus den Einteilchen-Bloch-Zuständen $|n_3 k_3 \sigma_2\rangle$ und $|n_4 k_4 \sigma_1\rangle$ in die Einteilchen-Bloch-Zustände $|n_1 k_1 \sigma_1\rangle$ und $|n_2 k_2 \sigma_2\rangle$, siehe Abb. 8.2.

Hierbei treten sowohl die klassische Coulomb-Abstoßung zwischen den Ladungsdichten $-e |\psi(x)|^2$ und $-e |\psi(x')|^2$:

$$|n_3 k_3 \sigma_2\rangle \rightarrow |n_2 k_2 \sigma_2\rangle \quad \text{und} \quad |n_4 k_4 \sigma_1\rangle \rightarrow |n_1 k_1 \sigma_1\rangle$$

²⁶ Die korrekte Reihenfolge der Operatoren im Coulomb-Term wurde von Jordan & Klein gefunden (*Zum Mehrkörperproblem der Quantentheorie*, 1927).

als auch der sogenannte *Teilchen-Austausch*:

$$|n_3 k_3 \sigma_2\rangle \rightarrow |n_1 k_1 \sigma_1\rangle \quad \text{und} \quad |n_4 k_4 \sigma_1\rangle \rightarrow |n_2 k_2 \sigma_2\rangle$$

auf.

Besitzt das Kristallgitter ein Inversionszentrum, so sind die Bänder noch zweifach Kramers-entartet. Die Symmetrie der Coulomb-Wechselwirkung gegenüber dem Spin überträgt sich auf die Kramers-Entartung, d.h. der Index σ in Gleichung (8.74) kann auch Kramers-entartete Subbänder bezeichnen.

Mit dem Hamiltonian (8.72) ist – wie bei einer Entwicklung nach Eigenfunktionen mit diskretem Spektrum üblich – die Schrödinger-Gleichung auf ein unendlich-dimensionales algebraisches Problem zurückgeführt:

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle; \quad |\psi\rangle = \sum_{nn'kk'} c_{nk,n'k'} |n_{nk}, n_{n'k'}\rangle \quad (8.75)$$

Voraussetzung für die praktische Anwendung dieser Entwicklung ist natürlich die explizite Lösung des Einteilchen-Problems (4.139). Der große Vorteil dieser „Algebraisierung“ liegt darin, dass man die qualitativen Effekte der Coulomb-WW auf elementare Weise studieren kann, wie in den folgenden Abschnitten gezeigt werden wird.

Aufgabe: Leiten Sie den Hamiltonian (8.72) ab! Hinweis: Achten Sie besonders auf die Normierungen!

Aufgabe: Zeigen Sie, dass im Austausch-Term nur der Gesamtspin erhalten bleibt!

8.5.3 Einfluss der Coulomb-Wechselwirkung auf die Energiebänder in Metallen

Der metallische Glanz (vergleiche die dielektrische Suszeptibilität nach Drude²⁷) und die gute elektrische und Wärmeleitfähigkeit von Metallen (vergleiche das Wiedemann-Franzsche Gesetz²⁸) rühren von den vielen Leitungselektronen her ($\sim 10^{23} \text{cm}^{-3}$). Wenn die Dichte der Elektronen sehr groß ist, kann man annehmen, dass sich relativ schnell eine „mittlere“ Wechselwirkung zwischen jeweils zwei Elektronen einstellt.²⁹ Wenn möglich, sollte diese Mittelung so vorgenommen werden, dass aus den Produkten von 4 Operatoren in Gleichung (8.72) quadratische Terme entstehen, denn dann lässt sich der Hamiltonian exakt diagonalisieren. Entsprechend dem Hartree-Fock-Ansatz macht man deshalb die *Hartree-Fock-Näherung*

²⁷ Paul Drude (1863-1906), *Zur Elektronentheorie der Metalle*, 1900.

²⁸ Gustav Heinrich Wiedemann (1826-1899) & Rudolph Franz (1826-1902), *Über die Wärme-Leitungsfähigkeit der Metalle*, 1853.

²⁹ Dies ist eine klassisch-statistische Argumentation, doch kommt es hier nur auf den prinzipiellen Effekt an.

$$a_{n_1 k_1}^+ a_{n_2 k_2}^+ a_{n_3 k_3} a_{n_4 k_4} \approx a_{n_1 k_1}^+ \langle a_{n_2 k_2}^+ a_{n_3 k_3} \rangle a_{n_4 k_4} - a_{n_1 k_1}^+ \langle a_{n_2 k_2}^+ a_{n_4 k_4} \rangle a_{n_3 k_3} \quad (8.76)$$

Hierbei wird berücksichtigt, dass für die Mittelwerte „normalerweise“ folgendes gilt:

$$\langle a_{n_1 k_1}^+ a_{n_2 k_2}^+ \rangle = \langle a_{n_3 k_3} a_{n_4 k_4} \rangle = 0 \quad (8.77)$$

$$\langle a_{n_2 k_2}^+ a_{n_3 k_3} \rangle = \left\{ \begin{array}{ll} \delta_{n_2 n_3} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} n_{n_2 \mathbf{k}_2} & - \text{Besetzungszahl } n_{n_2 \mathbf{k}_2} \\ \delta_{n_2 n_3} |\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3| & - \text{Intraband-Polarisation } p_{n_2 \mathbf{k}_2} \\ \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} & - \text{Interband-Polarisation } p_{n_2 n_3, \mathbf{k}_2} \end{array} \right\} \quad (8.78)$$

$$\mathbf{p}_{n\mathbf{k}} \equiv \langle \psi_{n\mathbf{k}} | \hat{\mathbf{p}} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = \frac{m}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_{n\mathbf{k}}; \quad \mathbf{p}_{nn'\mathbf{k}} \equiv \langle \psi_{n\mathbf{k}} | \hat{\mathbf{p}} | \psi_{n'\mathbf{k}} \rangle \quad (8.79)$$

Ausnahmen sind zum Beispiel die Supraleitfähigkeit und andere Zustände mit langreichweitigen Korrelationen (siehe §§ 6.3.3, 8.6.1).

Im Gleichgewichtsfall ist die mittlere Besetzungszahl durch die Fermi-Funktion gegeben (vergleiche § 7.2.2):

$$\langle n_{n\mathbf{k}} \rangle = \langle \psi_{n\mathbf{k}} | a_{n\mathbf{k}}^+ a_{n\mathbf{k}} | \psi_{n\mathbf{k}} \rangle = f_{n\mathbf{k}} \equiv \frac{1}{e^{\frac{E_{n\mathbf{k}} - E_F}{k_B T}} + 1} \quad (8.80)$$

Im Rahmen eines Ein-Band-Modells ($n = c, \sigma = 1$) sind die Konsequenzen der Coulomb-WW kaum spektakulär. Das Einsetzen der Gleichungen (8.76) f. nebst (8.75) in die Formel (8.72) ergibt den Hamiltonian

$$\begin{aligned} \hat{H}_c = & \sum_{\mathbf{k}} E_{c\mathbf{k}} a_{c\mathbf{k}}^+ a_{c\mathbf{k}} \\ & + \sum_{k_1 k_2} \left[W \begin{pmatrix} c & c & c & c \\ k_1 & k_2 & k_2 & k_1 \end{pmatrix} - W \begin{pmatrix} c & c & c & c \\ k_1 & k_2 & k_1 & k_2 \end{pmatrix} \right] f_{ck_2} a_{ck_1}^+ a_{ck_1} \end{aligned} \quad (8.81)$$

Folglich ist in diesem Modell die Zweiteilchen(Coulomb)-WW auf ein effektives Potenzial W_{ck}^{eff} reduziert, das sich einfach zur Bandenergie addiert:

$$\hat{H}_c = \sum_{\mathbf{k}} \left(E_{c\mathbf{k}} + W_{c\mathbf{k}}^{eff} \right) a_{c\mathbf{k}}^+ a_{c\mathbf{k}} \quad (8.82)$$

$$W_{ck}^{eff} = \sum_{k'} \left[W \begin{pmatrix} c & c & c & c \\ k & k' & k' & k \end{pmatrix} - W \begin{pmatrix} c & c & c & c \\ k & k' & k & k' \end{pmatrix} \right] f_{ck'} \quad (8.83)$$

Natürlich sind solche effektiven Potenziale bereits in den experimentellen Werten der Bandenergien enthalten; insofern sind, wie zuvor, volle Bänder relativ uninteressant. Allerdings müssen bei sogenannten ab initio-Berechnungen der Bandstruktur, bei denen alle Matrixelemente berechnet

werden, die Wellenfunktionen ψ_{nk} , die Bandenergien E_{nk} und die Fermi-Energie E_F selbstkonsistent, d. h. in ihrer gegenseitigen Abhängigkeit berechnet werden – eine immer noch große Herausforderung für Bandstruktur-Spezialisten. Dabei trägt die Fermi-Verteilungsfunktion f_{nk} in Gleichung zur Temperaturabhängigkeit der Bandstruktur bei.

Aufgabe: Begründen Sie das Minuszeichen des 2. Gliedes in Formel (8.76)!

8.5.4 Einfluss der Korrelationen: Hubbard-Modell *

In der Wannier-Basis (4.146) schreibt sich der Hamiltonian (8.72) (l steht hier für den Gitterplatz \mathbf{R}_l , $l = 1, \dots, N$)

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{n\sigma l} E_{n\sigma l} a_{n\sigma l}^+ a_{n\sigma l} + \sum_{n\sigma, l \neq l'} T_{n\sigma ll'} a_{n\sigma l}^+ a_{n\sigma l'} + \\ & \frac{1}{2} \sum_{n_1 l_1 \dots n_4 l_4, \sigma_1 \sigma_2} W \begin{pmatrix} n_1 \sigma_1 & n_2 \sigma_2 & n_3 \sigma_2 & n_4 \sigma_1 \\ l_1 & l_2 & l_3 & l_4 \end{pmatrix} a_{n_1 \sigma_1 l_1}^+ a_{n_2 \sigma_2 l_2}^+ a_{n_3 \sigma_2 l_3} a_{n_4 \sigma_1 l_4} \end{aligned} \quad (8.84)$$

Die Spin-Quantenzahl σ wurde explizit aufgeschrieben, um korrelationsinduzierte Spin-Effekte zu berücksichtigen. Dieses Modell ist natürlich genauso in-traktabel wie das Modell (8.72). Man kann in dieser lokalen Darstellung aber den Wechselwirkungsterm systematischer handhaben, weil die Austausch-WW und die oben genannten Korrelationen gegenüber dem Gitterpotenzial und der Coulomb-WW kurzreichweitig sind.

Wenn man vornehmlich an Korrelationseffekten interessiert ist, kann man sich daher zunächst auf nur ein Band, nur Hopping-Integrale zwischen Nächsten-Nachbarn (NN) und vor allem nur die intra-atomare Elektron-Elektron-WW auf einem kubischen einatomigen Gitter beschränken. Diese Vereinfachungen führen zum Hubbard-Modell³⁰:

$$\begin{aligned} \hat{H} = \hat{H}_{Hubbard} = & E \sum_{\sigma l} a_{\sigma l}^+ a_{\sigma l} + \sum_{\sigma, l \neq l'}^{NN} T_1 a_{\sigma l}^+ a_{\sigma l'} \\ & + \sum_{\sigma_1 \sigma_2, l} W \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_2 & \sigma_1 \\ l & l & l & l \end{pmatrix} a_{\sigma_1 l}^+ a_{\sigma_2 l}^+ a_{\sigma_2 l} a_{\sigma_1 l} \\ = & \sum_{\sigma l} E a_{\sigma l}^+ a_{\sigma l} + \sum_{\sigma, l \neq l'}^{NN} T_1 a_{\sigma l}^+ a_{\sigma l'} + U \sum_{\sigma l} \hat{n}_{\sigma l} \hat{n}_{-\sigma l}; \\ & E \equiv E_{\sigma l}; \quad T_1 \equiv T_{\sigma l l'}; \quad U \equiv W \begin{pmatrix} \sigma & -\sigma & -\sigma & \sigma \\ l & l & l & l \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (8.85)$$

Hierin sind E die mittlere Energie des Bandes und T_1 seine halbe energetische Breite. E ist zugleich die Energie, die benötigt wird, um ein Elektron zu binden. $U + E$ ist die zur Bindung eines zweiten Elektrons (mit entgegengesetztem

³⁰ J. Hubbard, *Electron correlations in narrow energy bands*, 1963/1964; Montorsi, *The Hubbard Model*, 1992; Lieb & Wu, *The one-dimensional Hubbard model: A reminiscence*, 2002.

Spin) benötigte Energie, mithin ist U die (Coulomb-)Wechselwirkungsenergie zwischen den beiden Elektronen.

Da es neben der Raumdimension mit T_1/E und U/E nur zwei effektive Parameter enthält, ist das Hubbard-Modell das wohl einfachste Modell, um das Zusammenspiel von kinetischer Energie, Coulomb-WW, Paulischen Ausschluss-Prinzips und Bandstruktur zu studieren (Nolting, *Viel-Teilchen-Theorie*, 2001, S.55). Trotz seiner Einfachheit enthält es eine erstaunliche Vielfalt von Erscheinungen und ist dank dessen ein grundlegendes Modell für die starke WW von Elektronen – wegen der drastischen Vereinfachungen ist seine Anwendung auf reale Materialien natürlich stark eingeschränkt. Wichtige Erscheinungen, die anhand des Hubbard-Modells untersucht wurden, betreffen die elektronischen Eigenschaften von Festkörpern mit schmalen Energiebändern³¹, den Band-Magnetismus in Eisen, Kobalt, Nickel u.s.w., gewisse Metall-Isolator-Übergänge (sogenannte Mott-Übergänge³²), die Lokalisierung (Anderson-Modell³³), den Einfluss der Korrelationen auf allgemeine statistische Gesetzmäßigkeiten sowie die Hochtemperatur-Supraleitung (Bednorz & Müller 1986³⁴). Die Korrelationen können zur Aufhebung der Spinrentartung und damit zur Bandaufspaltung führen; dabei entscheidet die Besetzung der Zustände wieder über den Leitungscharakter.

Trotz aller Vereinfachungen ist auch das Modell (8.85) bisher nicht exakt gelöst worden, außer für den Fall weniger Gitterplätze. Einige Lösungsansätze benutzen Greensche Funktionen; sie können hier leider nicht weiter verfolgt werden.

Bemerkenswerterweise ergibt sich eine ähnliche Vielfalt von Effekten, wenn man die fermionischen durch bosonische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ersetzt. Anwendung findet das *Bose-Hubbard-Modell* u.a. auf Quanten-Phasenübergänge in Arrays von Josephson-Kontakten, die Quantendynamik topologischer Anregungen und auf ultrakalte Atome in optischen Gittern (Bruder, Fazio & Schön, 2005).

³¹ Nach dem Tight-Binding-Modell (§ 4.6.2) ist die Breite der Energiebänder umso schmaler, je geringer die Überlappung der atomaren Wellenfunktionen ist; deshalb sind z.B. die d-Bänder in den Übergangsmetallen viel schmaler als die Valenzbänder in den typischen Halbleitern.

³² Sir Nevill Francis Mott (1905-1996, Nobelpreis 1977), *Metals, nonmetals and metal-nonmetal transitions: some recollections*, 1984; Mott & Jones, *The Theory of the Properties of Metals and Alloys*, 1936; Zimmermann, *Many-Particle Theory of Highly Excited Semiconductors*, 1988, § 5.2.

³³ Phillip Warren Anderson (*1923, Nobelpreis 1977), *Local Moments and Localized States*, 1977.

³⁴ Johannes Georg Bednorz (*1950, Nobelpreis 1987) & Karl Alex Müller (*1927, Nobelpreis 1987), *Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-CuO system*, 1986. – Der Mechanismus ist hier grundsätzlich verschieden von dem der „normalen“ Supraleitung, der von der BCS-Theorie (s. §§ 6.3.3, 8.7.4) und der dazu äquivalenten Theorie von Bogoljubow (1958) beschrieben wird.

*Aufgabe**: Gibt es einen Zusammenhang zwischen Reichhaltigkeit und Lösbarkeit (in expliziter geschlossener Form) eines Modells?

*Aufgabe**: Finden Sie exakte Lösungen für die Fälle $l = 1$ und $l = 1 \dots 2$ (Jones & March, 1973, Vol.1, § 4.5) und diskutieren Sie deren Eigenschaften!

8.5.5 Elektron-Loch-Wechselwirkung in Molekülkristallen: Frenkel-Excitonen

Wenn ein Elektron aus einem Valenz- in ein Leitungsband angeregt wird, hinterlässt es dort ein positiv geladenes Loch (siehe Abschnitt 7.3). Wenn nun die elektrostatische Anziehung zwischen diesen beiden groß genug ist, entsteht ein gebundenes Elektron-Loch-Paar. Diese Elementaranregung heißt Exciton.

Wir betrachten in diesem Abschnitt das besonders für Molekülkristalle wichtige Frenkel-Exciton³⁵. In ihm sind Elektron und Loch an *demselben* Gitterbaustein lokalisiert; seine Wellenfunktion setzt sich aus denjenigen lokalisierten Orbitalen zusammen, die überwiegend zu den Valenz- bzw. Leitungsbändern beitragen. Deshalb gehen wir von der Wannier-Darstellung für den Hamiltonian aus. Um uns auf das Wesentliche zu konzentrieren, betrachten wir nur je ein Leitungs- (c) und Valenzband (v) und sehen vom Spin ab.³⁶ Dann vereinfacht sich der Hamiltonian der Elektron-Loch-Wechselwirkung zu

$$\hat{H}_{\text{Frenkel}} = \sum_{ll'} W \begin{pmatrix} c & v & c & v \\ l & l' & l' & l \end{pmatrix} a_{cl}^+ a_{vl'}^+ a_{cl'} a_{vl} \quad (8.86)$$

Hier rücken wir den Operator a_{vl} um zwei Stellen nach links, absorbieren den durch den Antikommutator mit $a_{vl'}^+$ entstehenden Term wieder in den Ein-Elektronen-Hamiltonian und erhalten

$$\hat{H}_{\text{Frenkel}} = \sum_{ll'} W \begin{pmatrix} c & v & c & v \\ l & l' & l' & l \end{pmatrix} a_{cl}^+ a_{vl} a_{vl'}^+ a_{cl'} \equiv \sum_{ll'} W \begin{pmatrix} c & v & c & v \\ l & l' & l' & l \end{pmatrix} B_l^+ B_{l'} \quad (8.87)$$

Die neuen Operatoren

$$B_l^+ \equiv a_{cl}^+ a_{vl} \quad B_l \equiv a_{vl}^+ a_{cl} \quad (8.88)$$

³⁵ Jakow Iljitsch Frenkel (1894-1952), *On the Transformation of Light into Heat in Solids*, 1931; *On the Absorption of Light and the Trapping of Electrons and Positive Holes in Crystalline Dielectrics*, 1936; Song & Williams, *Self-trapped excitons*, 1993.

³⁶ Bzgl. der exakten Berücksichtigung des Spins, der Lokalfeldeffekte in der Abschirmung der Elektron-Loch-WW sowie der Einteilung in longitudinale und transversale Excitonen siehe Stolz, *Einführung in die Vielelektronentheorie der Kristalle*, 1974, §10.3.

bewirken die Erzeugung beziehungsweise Vernichtung eines Elektron-Loch-Paares am Gitterplatz \mathbf{R}_l .

Für bestimmte Anwendungen ist es zweckmäßig, diese Operatoren analog zu den Wellenfunktionen (4.6-9) in die Bloch-Darstellung („zurück“) zu transformieren:

$$B_l^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{w}} e^{i\mathbf{w} \cdot \mathbf{R}_l} B_{\mathbf{w}}^+; \quad B_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{w}} e^{-i\mathbf{w} \cdot \mathbf{R}_l} B_{\mathbf{w}} \quad (8.89)$$

Damit erhalten wir unter Beachtung der Impulserhaltung (8.75) den Ausdruck

$$\hat{H}_{\text{Frenkel}} = \sum_{\mathbf{w}} W_{c\nu, \mathbf{w}} B_{\mathbf{w}}^+ B_{\mathbf{w}} \quad (8.90)$$

Hier ist das Coulomb-Matrixelement diagonal im Wellenzahlvektor \mathbf{w} :

$$W_{c\nu, \mathbf{w}} = \frac{1}{N} \sum_{l, l'} e^{i\mathbf{w}(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_{l'})} W \begin{pmatrix} c & \nu & c & \nu \\ l & l' & l' & l \end{pmatrix} \quad (8.91)$$

Dies war das Ziel der Vereinfachungen im Hamiltonian (8.86).

Unter der Voraussetzung, dass allein exzitronische Zustände angeregt sind, lässt sich auch der Ein-Elektronen-Hamiltonian in die Form (8.90) bringen. Damit ergibt sich für den Gesamt-Hamiltonian der Ausdruck

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{w}} E_{\mathbf{w}} B_{\mathbf{w}}^+ B_{\mathbf{w}} \quad (8.92)$$

Die Excitonen-Energie $E_{\mathbf{w}}$ enthält alle relevanten Ein- und Zweiteilchenbeiträge.

Der Hamiltonian (8.92) liegt in Bilinearform vor, obwohl er ein wechselwirkendes Vielteilchen-System beschreibt (vgl. Cooper, 1972). Dies wird die formale Behandlung weiterer Wechselwirkungen dieses (Modell-)Systems, beispielsweise mit äußeren elektromagnetischen Feldern, entscheidend vereinfachen, wie wir im § 8.8.5 sehen werden. – Es ist übrigens recht mühselig, dieses Ergebnis im Rahmen der 1. Quantisierung zu erhalten.

Aufgabe:* Geben Sie $E_{\mathbf{w}}$ explizit an (Haken, 1973, §24)!

8.5.6 Elektron-Elektron(Loch)-Wechselwirkungen in Halbleitern *

Wie bei den Isolatoren ist für das Verständnis der meisten elektronischen Eigenschaften der Halbleiter die Einbeziehung von Valenz- und Leitungsbändern nötig. Um eine Vorstellung von den möglichen Wechselwirkungsprozessen in solch einem System zu gewinnen, betrachten wir zunächst den Hamilton-Operator (8.72) für ein Leitungsband c und ein Valenzband v . Er enthält die folgenden Terme:

$$\hat{H} = \sum_k E_{ck} a_{ck}^+ a_{ck} + \sum_k E_{vk} a_{vk}^+ a_{vk} \quad (8.93)$$

Leitungs- (c) und Valenzband (v) ohne Coulomb-Wechselwirkung

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W \begin{pmatrix} c & c & c & c \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{ck_1}^+ a_{ck_2}^+ a_{ck_3} a_{ck_4} \\
& \quad + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W \begin{pmatrix} v & v & v & v \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{vk_1}^+ a_{vk_2}^+ a_{vk_3} a_{vk_4} \quad (8.94)
\end{aligned}$$

Coulomb-Wechselwirkung innerhalb des Leitungs- bzw. Valenzbandes

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W \begin{pmatrix} c & c & c & v \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{ck_1}^+ a_{ck_2}^+ a_{ck_3} a_{vk_4} \\
& \quad + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W \begin{pmatrix} c & c & v & c \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{ck_1}^+ a_{ck_2}^+ a_{vk_3} a_{ck_4} \quad (8.95)
\end{aligned}$$

Elektron-Loch-Paar-Anregung durch Elektron-Elektron-Stoß in c
(*Auger-Generation*³⁷)

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W \begin{pmatrix} c & v & c & c \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{ck_1}^+ a_{vk_2}^+ a_{ck_3} a_{ck_4} \\
& \quad + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W \begin{pmatrix} v & c & c & c \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{vk_1}^+ a_{ck_2}^+ a_{ck_3} a_{ck_4} \quad (8.96)
\end{aligned}$$

Elektron-Loch-Paar-Vernichtung durch Elektron-Elektron-Stoß in c
(*Auger-Rekombination*)

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W \begin{pmatrix} c & c & v & v \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{ck_1}^+ a_{ck_2}^+ a_{vk_3} a_{vk_4} \\
& \quad + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W \begin{pmatrix} v & v & c & c \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{vk_1}^+ a_{vk_2}^+ a_{ck_3} a_{ck_4} \quad (8.97)
\end{aligned}$$

Gleichzeitige Erzeugung und Vernichtung zweier Elektron-Loch-Paare

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W \begin{pmatrix} c & v & c & v \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{ck_1}^+ a_{vk_2}^+ a_{ck_3} a_{vk_4} \\
& \quad + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W \begin{pmatrix} v & c & c & v \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{vk_1}^+ a_{ck_2}^+ a_{ck_3} a_{vk_4}
\end{aligned}$$

³⁷ Pierre Victor Auger (1899-1993), *Sur les rayons secondaire produits dans un gas par les rayons X*, 1925; *Sur l'effect photoélectrique composé*, 1925; *Sur le rendement de la fluorescence dans la domaine des rayons X*, 1926. Siehe auch Mehra & Rechenberg (2001, Bd.6). – Die Anwendung der Auger-Glieder auf den Festkörper erfolgte zuerst durch Peierls [Ann. Phys. 13 (1932) 905; nach Pankove, *Optical Processes in Semiconductors*, 1975, S.161].

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W \begin{pmatrix} c & v & v & c \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{ck_1}^+ a_{vk_2}^+ a_{vk_3} a_{ck_4} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W \begin{pmatrix} v & c & v & c \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{vk_1}^+ a_{ck_2}^+ a_{vk_3} a_{ck_4} \quad (8.98)
\end{aligned}$$

Elektron-Loch-Wechselwirkung (*Excitonen*, siehe § 8.5.7)

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W \begin{pmatrix} c & v & v & v \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{ck_1}^+ a_{vk_2}^+ a_{vk_3} a_{vk_4} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W \begin{pmatrix} v & c & v & v \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{vk_1}^+ a_{ck_2}^+ a_{vk_3} a_{vk_4} \quad (8.99)
\end{aligned}$$

Elektron-Loch-Paar-Anregung durch Elektron-Elektron-Stoß in v
(*Auger-Generation*)

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W \begin{pmatrix} v & v & c & v \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{vk_1}^+ a_{vk_2}^+ a_{ck_3} a_{vk_4} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W \begin{pmatrix} v & v & v & c \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{vk_1}^+ a_{vk_2}^+ a_{vk_3} a_{ck_4} \quad (8.100)
\end{aligned}$$

Elektron-Loch-Paar-Vernichtung durch Elektron-Elektron-Stoß in v
(*Auger-Rekombination*)

Schon bei zwei Bändern tritt also ein erstaunlicher Reichtum von Prozessen zutage! Während die Auger-Generation für die meisten Anwendungen weniger wichtig ist, beeinflusst die Auger-Rekombination als strahlungsloser Konkurrenzprozess zur strahlenden Rekombination die Eigenschaften optoelektronischer Bauelemente in höchst unerwünschter Weise. Sie vergrößert die Temperaturempfindlichkeit von Halbleiterlasern, und die Ladungsträger werden aufgeheizt. Ein weiterer wichtiger Effekt der Elektron-Loch-WW ist die (für Isolatoren bereits im § 8.5.5 betrachtete) Bildung von Excitonen, d. h. von gebundenen Elektron-Loch-Paaren. Wir werden im folgenden deren Eigenschaften näher betrachten, da sie in einigen modernen Bauelementen eine dominierende Rolle spielen.

8.5.7 Wannier-Mott-Excitonen *

Die Coulomb-Anziehung zwischen den negativ geladenen (Bloch-)Elektronen im Leitungsband und den positiv geladenen Löchern im Valenzband führt zu wichtigen, qualitativ neuen Effekten gegenüber den Eigenschaften der Einzelteilchen-Zustände. Dies betrifft vor allem die optischen Eigenschaften von

Halbleitern, namentlich in dimensionsreduzierten Mikrostrukturen (Quantengraben, -drähten und -punkten), die zum Beispiel in elektrooptischen Modulatoren gezielt ausgenutzt werden³⁸.

Wir betrachten hier das Wannier-Mott-Exciton³⁹, dessen mittlere Ausdehnung viele Gitterzellen umfasst (dies ist also der zum Frenkel-Exciton im § 8.5.5 komplementäre Fall). Deshalb ist die Bloch-Darstellung angemessen. Wir führen Löcher(Defektelektronen)-Operatoren wie im Abschn. 7.3 ein:

$$a_{vk} = d_k^+; \quad a_{vk}^+ = d_k; \quad d_k d_{k'}^+ + d_{k'}^+ d_k = \delta_{kk'} \quad (8.101)$$

und unterdrücken den Index c bei den Elektron-Operatoren. Das ergibt für den obigen Hamiltonian ohne Auger-Prozesse (diese erzeugen und zerstören ja Elektron-Loch-Paare, während wir uns hier auf deren innere Wechselwirkung konzentrieren wollen) nach Umordnung der Operatoren den Ausdruck

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_k (E_{ck} a_{ck}^+ a_{ck} - E_{vk} d_{vk}^+ d_{vk}) + \sum_k E_{vk} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} \left[\begin{aligned} & -W \begin{pmatrix} c & v & c & v \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{k_1}^+ a_{k_3} (\delta_{k_2 k_4} - d_{k_4}^+ d_{k_2}) \\ & + W \begin{pmatrix} v & c & c & v \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{k_2}^+ a_{k_3} (\delta_{k_1 k_4} - d_{k_4}^+ d_{k_1}) \\ & + W \begin{pmatrix} c & v & v & c \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{k_1}^+ a_{k_4} (\delta_{k_2 k_3} - d_{k_3}^+ d_{k_2}) \\ & - W \begin{pmatrix} v & c & v & c \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} a_{k_2}^+ a_{k_4} (\delta_{k_1 k_3} - d_{k_3}^+ d_{k_1}) \end{aligned} \right] \quad (8.102) \end{aligned}$$

Die zweite Summe stellt wieder die Energie des vollen Valenzbandes dar und wird im folgenden genauso weggelassen, wie die Ein-Teilchen-Beiträge in der dritten Summe, die die Wechselwirkung des Leitungselektrons mit dem vollen Valenzband beschreiben. Das ergibt nach geeigneten Umnummerierungen den Exciton-Hamiltonian

$$\hat{H}_{exc} = \sum_k (E_{ck} a_{ck}^+ a_{ck} - E_{vk} d_{vk}^+ d_{vk}) + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} W_{k_1 k_2 k_3 k_4}^{exc} a_{k_1}^+ a_{k_2} d_{k_3}^+ d_{k_4} \quad (8.103)$$

³⁸ Siehe z. B. Chuang, *Physics of optoelectronic devices*, 1995; Piprek, *Semiconductor Optoelectronic Devices*, 2003; Rosencher & Vinter, *Optoelectronics*, 2002. – Dagegen haben sich die Hoffnungen, durch die Bose-Einstein-Kondensation von Excitonen in sogenannte Elektron-Loch-Tropfen zu neuen, auch technisch nutzbaren Effekten zu gelangen, nicht erfüllt.

³⁹ Wannier, *Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals*, 1937; Mott, *Conduction in polar crystals*, pt.2, 1938. – Eine klassische Quelle ist Dexter & Knox, *Excitons*, 1965; für spätere Entwicklungen siehe Rashba & Sturge, *Excitons*, 1982; Zimmermann, *Many-Particle Theory of Highly Excited Semiconductors*, 1988.

mit dem effektiven excitonischen Coulomb-Matrixelement

$$W_{k_1 k_2 k_3 k_4}^{exc} \equiv \frac{1}{2} W \begin{pmatrix} c & v & c & v \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} W \begin{pmatrix} v & c & c & v \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} \\ - \frac{1}{2} W \begin{pmatrix} c & v & v & c \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} W \begin{pmatrix} v & c & v & c \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} \quad (8.104)$$

$$= W \begin{pmatrix} c & v & c & v \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} - W \begin{pmatrix} v & c & c & v \\ k_1 & k_2 & k_3 & k_4 \end{pmatrix} \quad (8.105)$$

Merke: In Physik ist fast alles „effektiv“!

Bei optischer Anregung sind die Quasiimpulse von Elektron und Loch anfänglich praktisch gleich: $k_e = k_h$, doch die nicht-gitterperiodische Coulomb-Wechselwirkung hebt diese Gleichheit mit der Zeit auf. Deshalb muss man die Elektron- und Loch-Funktionen *inkohärent* überlagern:

$$|\psi_{exc}\rangle = \sum_{k_e, k_h} c_{k_e k_h} a_{k_e}^+ |0_c\rangle d_{k_h}^+ |0_h\rangle \quad (8.106)$$

Die Schrödinger-Gleichung $H_{exc}\psi_{exc} = E_{exc}\psi_{exc}$ für das Exciton ergibt nach Anwendung der Vertauschungsrelationen (was sonst?!) mit $a_k |0_c\rangle = d_k |0_h\rangle = 0$ nebst Vertauschung der Summationsindizes im Wechselwirkungsterm ein N_k^2 -dimensionales (N_k – Anzahl der k -Werte) lineares homogenes Gleichungssystem für die Koeffizienten $c_{k_e k_h}$:

$$\sum_{k_2, k_4} [W_{k_e k_2 k_h k_4}^{exc} + (E_{ck_e} - E_{vk_h} - E_{exc}) \delta_{k_2 k_e} \delta_{k_4 k_h}] c_{k_2 k_4} = 0 \quad (8.107)$$

In erster Näherung erhält man hieraus für die Excitonen-Energien das Ergebnis

$$E_{k_e k_h}^{exc} = E_{ck_e} - E_{vk_h} + W_{k_e k_e k_h k_h}^{exc} \quad (8.108)$$

Wegen $W_{k_e k_e k_h k_h}^{exc} < 0$ bilden die Excitonen *gebundene* Zustände *unterhalb* der fundamentalen Ein-Teilchen-Energielücke $E_g = E_{ck_0} - E_{vk_0}$. Wegen der Beweglichkeit der es konstituierenden Ladungsträger ist das Exciton polarisierbar und beeinflusst wesentlich die optischen Eigenschaften nahe E_g ; insbesondere wird die Absorptionskante von Halbleitern stark modifiziert.

Wannier-Mott-Excitonen sind also gebundene Elektron-Loch-Paare, bei denen der mittlere Abstand zwischen Elektron und Loch relativ groß ist: Die Elektronen- und Löcher-Wellenfunktionen überdecken viele Elementarzellen, wodurch über die atomaren Potenzialtrichter (s. Abb. 4.1) „gemittelt wird“. Dadurch wird die Effektivmassen-Methode anwendbar (Dresselhaus, 1956). Die Schwerpunktsbewegung des Paares ähnelt derjenigen freier Teilchen, während die gebundenen Zustände sehr ähnlich denen des Wasserstoffs sind. Hierbei ist die reduzierte Masse aus den effektiven Massen des Elektrons und des Loches zu bilden.

Die Bindungsenergie der Wannier-Mott-Excitonen sollte sich demnach erhöhen, wenn der mittlere Elektron-Loch-Abstand sinkt. Dieser Effekt tritt in dimensionsreduzierten Halbleiterstrukturen tatsächlich ein: in quasi-zweidimensionalen Quantengraben ist die Bindungsenergie etwa viermal so groß wie im vergleichbaren Volumenmaterial. Die Theorie bleibt dabei formal unverändert, doch muss man die drastisch modifizierte Bandstruktur berücksichtigen (Schmitt-Rink, Chemla & Miller, 1989).

Aufgabe: Setzt sich dieser Trend in Quantendrähten und Quantenpunkten fort? Hinweis: Siehe Woggon, 1996; Kalt & Hetterich, 2004.

8.6 Beispiel:

Optische Effekte durch Hybrid-Wechselwirkung in hochangeregten Halbleitern *

Bei hohen Elektronen- und Löcherdichten⁴⁰ führt die Coulomb-WW zum „Verschmieren“ der Exciton-Zustände, die schließlich in den renormierten Bändern (8.82) aufgehen. Diese Rotverschiebung der optischen Bandkante sowie die Vergrößerung der Oszillatorstärken (das sogenannte *Coulomb enhancement*) in hochangeregten Halbleitern lassen sich mit Hilfe der Halbleiter-Bloch-Gleichungen⁴¹ verstehen. Sie werden in den einschlägigen Monographien⁴² ausführlich beschrieben, wir wenden uns daher neuen Effekten zu, die durch die Coulomb-WW zwischen leichten (*light holes* – LH) und schweren Löchern (*heavy holes* – HH) in GaAs-ähnlichen Halbleitern entstehen. Dabei wird die Besetzungszahl-Darstellung den Formalismus wesentlich anschaulicher gestalten und – nicht zuletzt dadurch – die Auswahl der relevanten Terme deutlich erleichtern. Das elektromagnetische Feld wird hierbei als klassisches Feld behandelt, diese Theorie ist deshalb halbklassisch.

8.6.1 3-Band-Hamiltonian mit Hybrid-Wechselwirkung

Üblicherweise wird die Coulomb-WW nur zwischen den Elektronen im Leitungsband (C) und den Löchern in den jeweils obersten Valenzbändern (LH

⁴⁰ Dies meint durch starke externe Einwirkung (große elektrische Stromdichten oder intensive optische Felder) erzeugte Ladungsträgerdichten in der Größenordnung von $10^{18} \dots 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

⁴¹ Schäfer & Treusch, *An Approach to the nonequilibrium theory of highly excited semiconductors*, 1986; Lindberg & Koch, *Effective Bloch equations for semiconductors*, 1988. – Sie sind Analoga zu den Bloch-Gleichungen (1952) für die Kernmagnetische Resonanz.

⁴² Chow, Koch & Sargent III, *Semiconductor-Laser Physics*, 1994; Haug & Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, 1994. – Siehe auch Shah, *Ultrafast Spectroscopy of Semiconductors and Semiconductor Nanostructures*, 1999, für einen breiteren Überblick sowie Bonitz, *Quantum Kinetic Theory*, 1998, Ch.11, für die Einbettung in die Quantenkinetik von Nichtgleichgewichtsprozessen.

bzw. HH) berücksichtigt (Wannier-Näherung), und die Effekte dieser zwei Quasi-Zweiband-Modelle (CCHH und CCLL) werden addiert. Jedoch sind wegen der Fast-Entartung, d.h. energetisch nahen Lage der LH- und HH-Bänder die Coulomb-*Hybrid*-Integrale (CCHL und CCLH) de facto *nicht* vernachlässigbar. Diese *Hybrid-WW* koppelt die optischen C-HH- und C-LH-Übergänge bereits im linearen Fall. Für Halbleiter-Quantengraben – sie sind optisch anisotrop – bedeutet dies, dass die Anregung durch TE(TM)-polarisiertes Licht zur *linearen* Lumineszenz TM(TE)-polarisierten Lichtes führen sollte.

TE(TM) bezeichnet hierbei die Richtung des elektrischen Feldvektors parallel (senkrecht) zur Ebene des Materials, das den (energetisch tieferliegenden) Quantengraben realisiert.

Unser Modell besteht aus dem 3-Band-Hamiltonian (C, HH, LH, ohne Kramers-Entartung)

$$\hat{H} = \hat{H}_{el} + \hat{H}_{WW}, \quad \hat{H}_{el} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{Coul} + \Delta\hat{H}_{Coul} \quad (8.109)$$

Hierin beschreibt

$$\hat{H}_0 = \sum_k (E_{ck} c_k^\dagger c_k + E_{hk} h_k^\dagger h_k + E_{lk} l_k^\dagger l_k) \quad (8.110)$$

die wechselwirkungsfreien Elektronen und Löcher. Die Standard-2-Band-WW zwischen ihnen,

$$\hat{H}_{Coul} = \frac{1}{2} \sum_{kk'; q \neq 0} \left(\begin{aligned} &W_{ck+q, ck'-q, ck', ck} \cdot c_{k+q}^\dagger c_{k'-q}^\dagger c_{k'} c_k \\ &+ W_{hk+q, hk'-q, hk', hk} \cdot h_{k+q}^\dagger h_{k'-q}^\dagger h_{k'} h_k \\ &+ W_{lk+q, lk'-q, lk', lk} \cdot l_{k+q}^\dagger l_{k'-q}^\dagger l_{k'} l_k \\ &+ 2W_{ck+q, hk'-q, hk', ck} \cdot c_{k+q}^\dagger h_{k'-q}^\dagger h_{k'} c_k \\ &+ 2W_{ck+q, lk'-q, lk', ck} \cdot c_{k+q}^\dagger l_{k'-q}^\dagger l_{k'} c_k \\ &+ 2W_{hk+q, lk'-q, lk', hk} \cdot h_{k+q}^\dagger l_{k'-q}^\dagger l_{k'} h_k \end{aligned} \right) \quad (8.111)$$

enthält nur diejenigen Glieder, die die Gesamt-Teilchenzahl innerhalb eines jeden Bandes unverändert lassen⁴³. Die Hybrid-WW,

$$\Delta\hat{H}_{Coul} = \sum_{kk'; q \neq 0} \left(\begin{aligned} &W_{ck+q, hk'-q, lk', ck} \cdot c_{k+q}^\dagger h_{k'-q}^\dagger l_{k'} c_k \\ &+ W_{hk+q, hk'-q, lk', hk} \cdot h_{k+q}^\dagger h_{k'-q}^\dagger l_{k'} h_k \\ &+ W_{lk+q, lk'-q, lk', hk} \cdot l_{k+q}^\dagger l_{k'-q}^\dagger l_{k'} h_k + h.c. \end{aligned} \right) \quad (8.112)$$

(*h.c.* bezeichnet die hermitesch-konjugierten Terme) enthält die hier besonders interessierenden Coulomb-induzierten HH-LH-Übergänge mittels der sogenannten *Hybrid-Integrale*, W_{chlc} , W_{hhlh} u.s.w. Für die WW mit dem lokalen elektromagnetischen Feld wählen wir die *transversale* Dipol-WW, um gewisse

⁴³ Die Auger-Terme werden weggelassen; die Hybrid-Terme werden wir gesondert behandeln.

Probleme bei der Teilchenzahlerhaltung und der Eichinvarianz zu umgehen⁴⁴:

$$\hat{H}_{\text{WW}} = -\mathbf{A}(t) \cdot \sum_k (\mathbf{j}_{chk} c_k^+ h_k + \mathbf{j}_{clk} c_k^+ l_k + h.c.) \quad (8.113)$$

Da wir hier nur selektiv an der Elektron-Elektron-WW interessiert sind, wollen wir die Zweiteilchenterme in \hat{H}_{Coul} und $\Delta\hat{H}_{\text{Coul}}$ zu Einteilchentermen vereinfachen. Es zeigt sich jedoch, dass hierzu die „normale“ Hartree-Fock-Näherung (8.76) nicht ausreicht. Von den Mittelwerten der reduzierten Einteilchen-Dichtematrix

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{a,b=c,h,l} \sum_k \rho_{bak}(t) a_k^+ b_k \quad (8.114)$$

muss man nicht nur die „normalen“ Mittelwerte, d.h. die Besetzungszahlen

$$\begin{aligned} \rho_{cck}(t) &= n_{ck}(t) = \langle c_k^+ c_k \rangle; \\ \rho_{hhk}(t) &= n_{hk}(t) = \langle h_k^+ h_k \rangle; \quad \rho_{llk}(t) = n_{lk}(t) = \langle l_k^+ l_k \rangle \end{aligned} \quad (8.115)$$

sondern auch sogenannte *anormale Mittelwerte* berücksichtigen, nämlich die *kohärenten Interband-Polarisationen*

$$\begin{aligned} \rho_{hck}(t) &= p_{hck}(t) = \bar{p}_{hck}(t) = \langle c_k^+ h_k \rangle; \quad \rho_{lck}(t) = p_{lck}(t) = \bar{p}_{lck}(t) = \langle c_k^+ l_k \rangle; \\ \rho_{lhk}(t) &= p_{lhk}(t) = \bar{p}_{lhk}(t) = \langle h_k^+ l_k \rangle \end{aligned} \quad (8.116)$$

Die kohärente Polarisation zwischen HH- und LH-Zuständen, p_{hl} , kann die WW zwischen den optischen Moden wesentlich beeinflussen.⁴⁵

Damit erhalten wir

$$\hat{H}_{\text{Coul}}^{\text{HF}} = - \sum_{k;q \neq 0} \left(\begin{aligned} &Re \{ W_{ck+q,ck,ck+q,ck} \} n_{ck+q} c_k^+ c_k \\ &+ Re \{ W_{hk+q,hk,hk+q,hk} \} n_{hk+q} h_k^+ h_k \\ &+ Re \{ W_{lk+q,lk,lk+q,lk} \} n_{lk+q} l_k^+ l_k \\ &+ W_{ck+q,hk,hk+q,ck} p_{hck+q} h_k^+ c_k + h.c. \\ &+ W_{ck+q,lk,lk+q,ck} p_{lck+q} l_k^+ c_k + h.c. \\ &+ W_{hk+q,lk,lk+q,hk} p_{lhk+q} l_k^+ h_k + h.c. \end{aligned} \right) \quad (8.117)$$

und

$$\Delta\hat{H}_{\text{Coul}}^{\text{HF}} = - \sum_{k;q \neq 0} \left(\begin{aligned} &W_{ck+q,hk,lk+q,ck} p_{lck+q} h_k^+ c_k + W_{ck,hk+q,lk,ck+q} p_{chk+q} c_k^+ l_k \\ &+ W_{ck+q,lk,hk+q,ck} p_{hck+q} l_k^+ c_k + W_{ck,lk+q,hk,ck+q} p_{lck+q} c_k^+ h_k \\ &+ W_{hk+q,hk,lk+q,hk} p_{lhk+q} h_k^+ h_k + W_{hk,hk+q,lk,hk+q} n_{hk+q} h_k^+ l_k \\ &+ W_{hk+q,lk,hk+q,hk} n_{hk+q} l_k^+ h_k + W_{hk,lk+q,hk,hk+q} p_{hlk+q} h_k^+ h_k \\ &+ W_{lk+q,lk,lk+q,hk} n_{lk+q} l_k^+ h_k + W_{lk,lk+q,lk,hk+q} p_{hlk+q} l_k^+ l_k \\ &+ W_{hk+q,lk,lk+q,lk} p_{lhk+q} l_k^+ l_k + W_{hk,lk+q,lk,lk+q} n_{lk+q} h_k^+ l_k \end{aligned} \right) \quad (8.118)$$

⁴⁴ Diese Problematik wird oft vernachlässigt – wir können hier nur auf Mertsching, *Theorie des Dielektrizitätstensors in Relaxationszeit-Approximation*, 1966, und Stolz, *Einführung in die Vielelektronentheorie der Kristalle*, 1974, §9.2, verweisen.

⁴⁵ Kohärente Polarisationen spielen auch eine große Rolle in der Ultra-Kurzzeit-Spektroskopie, die sich in den achtziger und neunziger Jahren rasant entwickelt hat, siehe Shah, *Ultrafast Spectroscopy of Semiconductors and Semiconductor Nanostructures*, 1999.

$\hat{H}_{\text{Coul}}^{\text{HF}}$ und $\Delta\hat{H}_{\text{Coul}}^{\text{HF}}$ enthalten konstruktionsgemäß nur Ein-Teilchen-Operatoren, die wir zu \hat{H}_0 (8.110) und \hat{H}_{WW} (8.113) addieren:

$$\hat{H}_0^{\text{HF}} = \sum_k [E_{ck}^{\text{HF}} c_k^+ c_k + E_{hk}^{\text{HF}} h_k^+ h_k + E_{lk}^{\text{HF}} l_k^+ l_k]; \quad E_{ak}^{\text{HF}} \equiv E_{ak} + \Delta E_{ak} \quad (8.119)$$

Im Unterschied zu den bekannten Zweibandmodellen enthalten die Energieverschiebungen („Renormierungen“)

$$\begin{aligned} \Delta E_{ck} &= - \sum_{k' \neq k} \text{Re} \{ W_{ak',ak,ak',ak} \} n_{ck'} \\ \Delta E_{hk} &= - \sum_{k' \neq k} \text{Re} \{ W_{hk',hk,hk',hk} \} n_{hk'} + 2 \text{Re} \{ W_{hk',hk,lk',hk} p_{lhk'} \} \\ \Delta E_{lk} &= - \sum_{k' \neq k} \text{Re} \{ W_{lk',lk,lk',lk} \} n_{lk'} + 2 \text{Re} \{ W_{lk',lk,lk',hk} p_{hlk'} \} \end{aligned} \quad (8.120)$$

nicht nur Anregungs(Austausch)-Beiträge, sondern auch *neue*, polarisationsabhängige (Transfer-induzierte) Terme. Die Effekte der vollen Bänder werden im weiteren fortgelassen⁴⁶, während die Abschirmeffekte später heuristisch addiert werden⁴⁷.

Der WW-Hamiltonian ist in dieser Näherung ($\mathbf{j}_{hlk} = \mathbf{0}$, $W_{abcd} = \bar{W}_{dcba}$)

$$\hat{H}_{\text{WW}}^{\text{HF}} = - \sum_k \left[\begin{aligned} & \left(+ \sum_{k' \neq k} (W_{ck,hk',hk,ck'} p_{chk'} + W_{ck,lk',hk,ck'} p_{clk'}) \right) c_k^+ h_k \\ & + \left(+ \sum_{k' \neq k} (W_{ck,lk',lk,ck'} p_{clk'} + W_{ck,hk',lk,ck'} p_{chk'}) \right) c_k^+ l_k \\ & + \left(\sum_{k' \neq k} (W_{hk,lk',lk,hk'} p_{hlk'} + W_{hk,hk',lk,hk'} n_{hk'} + W_{hk,lk',lk,lk'} n_{lk'}) \right) h_k^+ l_k \\ & + h.c. \end{aligned} \right] \quad (8.121)$$

$$\equiv \sum_{a \neq b; k} H_{abk}^{\text{HF}} a_k^+ b_k; \quad a, b = c, h, l \quad (8.122)$$

Er zeitigt zwei wichtige Effekte der Hybrid-Coulomb-Integrale:

1. Die C-HH- und die C-LH-Übergänge werden verkoppelt;
2. Die kohärenten Interband-Polarisationen liefern zusätzliche Beiträge bereits zu den *linearen* Polarisationen p_{ch} and p_{cl} .

Infolgedessen werden gegenüber dem Quasi-2-Band-Modell die optischen Koeffizienten nicht nur quantitativ, sondern auch qualitativ verändert. Durch die

⁴⁶ Sie sind, wie bereits früher angemerkt wurde, bei semiempirischen Methoden in den (auch unten verwendeten) experimentell gewonnenen Bandstrukturparametern berücksichtigt.

⁴⁷ Die Abschirmeffekte durch virtuelle Übergänge sind im Hamiltonian (8.109) nicht enthalten (Haken, 1973, S.166).

Aufhebung von Auswahlregeln entstehen neue Effekte, wie die oben genannte *lineare* Kreuz-Polarisation in Quantengraben. Das wird in den folgenden Paragraphen noch deutlicher werden.

Aufgabe: Begründen Sie, dass die Polarisationen eine nichtdiagonale langreichweitige Ordnung beschreiben! Hinweis: Vergleichen Sie sie mit den im § 6.3.3 genannten Quasi-Mittelwerten!

8.6.2 3-Band-Halbleiter-Bloch-Gleichungen

Die resultierenden Bewegungsgleichungen für die Dichtematrix (8.114) sind strukturell denen der Zweiband-Näherung gleich, enthalten aber einige offensichtliche Ergänzungen; insbesondere erscheint die *HH-LH-Polarisation* in den Matricelementen $H_{ch(l)k}^{\text{HF}}$. Zum Beispiel ergeben sich für die C-HH-Polarisation

$$i\hbar \frac{d}{dt} p_{chk} = (E_{ck}^{\text{HF}} - E_{hk}^{\text{HF}}) p_{chk} + H_{chk}^{\text{HF}} (n_{hk} - n_{ck}) + H_{clk}^{\text{HF}} p_{lhk} - p_{clk} H_{lhk}^{\text{HF}} \quad (8.123)$$

und für die Population im Leitungsband

$$i\hbar \frac{d}{dt} n_{ck} = H_{chk}^{\text{HF}} p_{hck} - H_{hck}^{\text{HF}} p_{chk} + H_{clk}^{\text{HF}} p_{lck} - H_{lck}^{\text{HF}} p_{clk} - \frac{i\hbar}{\tau_{ck}} (n_{ck} - n_{ck}^{\text{eq}}) \quad (8.124)$$

Hierbei wird der Stoßterm in der Relaxationszeit-Näherung⁴⁸ behandelt, wobei angenommen wird, dass sich ohne optisches Feld die Elektronen (*c*) einerseits und die Löcher (*h*, *l*) andererseits in einem (näherungsweise) stationären Zustand befinden, der sich durch Quasi-Fermi-Verteilungen $n_{c(h,l)k}^{\text{eq}}$ mit Quasi-Fermi-Energien $E_{F_{c,v}}$ beschreiben lässt:

$$n_{ck}^{\text{eq}} = \frac{1}{e^{\frac{E_{ck}^{\text{HF}} - E_{Fc}}{k_B T}} + 1}; \quad n_{h(l)k}^{\text{eq}} = \frac{1}{e^{\frac{E_{h(l)k}^{\text{HF}} - E_{Fv}}{k_B T}} + 1} \quad (8.125)$$

Zusammen mit den – durch zyklische Vertauschungen erhältlichen – Gleichungen für p_{clk} u.s.w. sind dies die *Drei-Band-Halbleiter-Bloch-Gleichungen* im Rahmen einer verallgemeinerten Hartree-Fock-Näherung. Eine allgemeine Lösung dieses nichtlinearen Systems von $9N_k$ Differential-Integralgleichungen ist nicht bekannt. Exakte geschlossene Näherungslösungen kann man jedoch im Rahmen der Störungstheorie und der Rotating Wave Approximation (RWA) erzielen, wie wir im folgenden zeigen werden.

⁴⁸ Zur Kritik dieser Näherung siehe Mertsching, *Theorie des Dielektrizitätstensors in Relaxationszeit-Approximation*, 1966; Chow, Smowton, Blood, Girndt, Jahnke & Koch, *Comparison of experimental and theoretical GaInP quantum well gain spectra*, 1997; Enders, *Enhancement and Spectral Shift of Optical Gain in Semiconductors from Non-Markovian Intraband Relaxation*, 1997.

8.6.3 Explizite RWA-Lösung der Halbleiter-Bloch-Gleichungen

Für ein einzelnes zeitharmonisches Feld $\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_0 e^{-i\omega t}$ besteht die *Rotating Wave Approximation* in der Vernachlässigung *nichtresonanter* Polarisationsglieder⁴⁹:

$$\begin{aligned} n_{c(h,l)k}(t) &= n_{c(h,l)k} = \text{const}; \\ p_{ch(l)k}(t) &= p_{ch(l)k} \cdot e^{-i\omega t}; \quad p_{hlk}(t) = p_{hlk} = \text{const} \end{aligned} \quad (8.126)$$

Für die linearen Polarisationen erhalten wir damit

$$\begin{aligned} &\left(E_{ck}^{(1)} - E_{hk}^{(1)} - \hbar\omega - \frac{i\hbar}{\tau_{chk}} \right) p_{chk} + (n_{ck} - n_{hk}) \sum_{k' \neq k} W_{ck,hk',hk,ck'} p_{chk'} \\ &+ p_{clk} \sum_{k' \neq k} (\bar{W}_{hk,hk',lk,hk'} n_{hk'} + \bar{W}_{hk,lk',lk,lk'} n_{lk'}) = -\mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{j}_{chk} (n_{ck} - n_{hk}) \end{aligned} \quad (8.127)$$

und

$$\begin{aligned} &\left(E_{ck}^{(1)} - E_{lk}^{(1)} - \hbar\omega - \frac{i\hbar}{\tau_{clk}} \right) p_{clk} + (n_{ck} - n_{lk}) \sum_{k' \neq k} W_{ck,lk',lk,ck'} p_{clk'} \\ &+ p_{chk} \sum_{k' \neq k} (\bar{W}_{lk,lk',hk,lk'} n_{lk'} + \bar{W}_{lk,hk',hk,hk'} n_{hk'}) = -\mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{j}_{clk} (n_{ck} - n_{lk}) \end{aligned} \quad (8.128)$$

$E_{c(h,l)k}^{(1)}$ sind die Hartree-Fock-Bandenergien (8.119) f. mit $p_{hl} = 0$. Man sieht, dass Coulomb-induzierte HH-LH-Übergänge zu den lichtinduzierten C-HH- bzw. C-LH-Übergängen hinzukommen und Coulomb-assistierte C-LH- bzw. C-HH-Übergänge bilden. Diese Kopplung von C-HH- und C-LH-Polarisationen fehlt im Rahmen der Zwei-Band-Modelle.

In Verallgemeinerung einer Idee von Ahn⁵⁰ können die Gleichungen (8.127) f. in geschlossener Form gelöst werden, indem man beide Seiten über k summiert, im Coulomb-Term die Reihenfolge der Doppelsummation vertauscht und die Gleichung für jeden k -Wert einzeln löst.⁵¹

⁴⁹ Für Details siehe Allen & Eberly, *Optical Resonance and Two-Level Atoms*, 1975; Mandel & Wolf, *Optical Coherence and Quantum Optics*, 1995, Abschn.7.5.2f.

⁵⁰ Ahn, *Theory of Non-Markovian Optical Gain in Quantum-well Lasers*, 1997. – Dank dieser Umformung braucht auch im 2-Band-Modell nicht mehr auf die früher übliche Padé-Approximation zurückgegriffen werden.

⁵¹ Dieser Wechsel der Summationsreihenfolge ist nur erlaubt, wenn der Summand für große k -Werte hinreichend schnell konvergiert. Zu diesem Zweck müssen die Beiträge des vollen Bandes geeignet subtrahiert werden. Der zunächst unbestimmte Vorfaktor des p_{cvk} -Gliedes wird gleich Eins gesetzt, um Übereinstimmung mit dem Ergebnis der sukzessiven Iteration zu erreichen.

Dazu kondensieren wir die Gleichungen (8.127) f. in die Form

$$\hat{B}_k \cdot \mathbf{P}_k - \sum_{k'} \hat{C}_{kk'} \cdot \mathbf{P}_{k'} = \mathbf{D}_k \quad (8.129)$$

bzw.

$$\mathbf{P}_k - \sum_{k'} \hat{Q}_{kk'} \cdot \mathbf{P}_{k'} = \mathbf{P}_k^{(0)}; \quad \hat{Q}_{kk'} \equiv \hat{B}_k^{-1} \cdot \hat{C}_{kk'}; \quad \mathbf{P}_k^{(0)} \equiv \hat{B}_k^{-1} \cdot \mathbf{D}_k \quad (8.130)$$

mit

$$\mathbf{P}_k = (p_{chk} \quad p_{clk})^t \quad (8.131)$$

$$\begin{aligned} B_{k,11} &= E_{ck}^{(1)} - E_{hk}^{(1)} - \hbar\omega - \frac{i\hbar}{\tau_{chk}}; \\ B_{k,12} &= \sum_{k' \neq k} (\bar{W}_{hk,hk',lk,hk'} n_{hk'} + \bar{W}_{hk,lk',lk,lk'} n_{lk'}); \\ B_{k,21} &= \sum_{k' \neq k} (\bar{W}_{lk,lk',hk,lk'} n_{lk'} + \bar{W}_{lk,hk',hk,hk'} n_{hk'}); \\ B_{k,22} &= E_{ck}^{(1)} - E_{lk}^{(1)} - \hbar\omega - \frac{i\hbar}{\tau_{clk}} \end{aligned} \quad (8.132)$$

$$\begin{aligned} C_{kk',11} &= (n_{ck} - n_{hk}) W_{ck,hk',hk,ck'}; & C_{kk',12} &= 0; \\ C_{kk',21} &= 0; & C_{kk',22} &= (n_{ck} - n_{lk}) W_{ck,lk',lk,ck'} \end{aligned} \quad (8.133)$$

und

$$D_{k,1} = -\mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{j}_{chk} (n_{ck} - n_{hk}); \quad D_{k,2} = -\mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{j}_{clk} (n_{ck} - n_{lk}) \quad (8.134)$$

$B_{k,12}$ und $B_{k,21}$ sind die neuen Terme, die die gewöhnlichen 2-Band-Übergänge: C-HH und C-LH, koppeln. Nun kann Gleichung (8.130) mit Hilfe von Ahns Summationstrick gelöst werden:

$$\sum_k \mathbf{P}_k^{(0)} = \sum_k \mathbf{P}_k - \sum_{kk'} \hat{Q}_{kk'} \cdot \mathbf{P}_{k'} = \sum_k \left(\mathbf{P}_k - \sum_{k'} \hat{Q}_{k'k} \cdot \mathbf{P}_k \right) \quad (8.135)$$

Das heißt,

$$\mathbf{P}_k = \left(\hat{1} - \sum_{k'} \hat{Q}_{k'k} \right)^{-1} \cdot \mathbf{P}_k^{(0)} \quad (8.136)$$

Die Verallgemeinerung zu höheren Ordnungen im optischen Feld ist ebenso elementar wie die Verallgemeinerung auf Mehrmoden-Felder u.s.w.⁵²

⁵² Streng genommen muss man die Coulomb-Loch-Verschiebung (*Coulomb hole shift*) und die Abschirmung der Coulomb-WW hinzufügen, doch ändert dies nichts

Aufgabe: Begründen Sie das Weglassen der Glieder, die p^2 und A_0p enthalten, in den Gleichungen (8.127) f.!

8.6.4 Qualitative Effekte der Hybrid-Wechselwirkung

Zur Demonstration qualitativer Effekte betrachten wir den folgenden einfachen Fall. Das optische Feld ist $\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_0 e^{-i\omega t}$; alle Bänder sind isotrop und parabolisch, für das Wechselwirkung-Matrixelement gilt dann

$$|\mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{j}_{cvk}|^2 = \frac{1}{3} (A_0 j_{cv0})^2 \frac{E_g^2}{E_{ck} - E_{vk}}$$

Die Relaxationskonstanten sind $\tau_{chk} = \tau_{clk} = \tau_2 = \text{const}$; die Energieverschiebungen können vernachlässigt werden. Für die Coulomb-Wechselwirkung kann das Jellium-Modell mit der Hintergrund-Dielektrizitätskonstanten $\varepsilon_b = \varepsilon_\infty$ und der Plasma-Abschirmung mit

$$\kappa_{cv}^2 = \frac{e^2}{\varepsilon_\infty \varepsilon_0} \left[1 + \frac{2}{3} \frac{k_B T}{E_{Fc} - E_g} \right] N_{tot}$$

benutzt werden: $W_{sk} = e^2 / \varepsilon_\infty \varepsilon_0 V (k^2 + \kappa_{cv}^2) (V - \text{Kristallvolumen})$. Die k -Abhängigkeit von $B_{k,12}$ kann vernachlässigt werden, wie das für den ähnlichen Fall von ΔE_{ak} (8.120) üblich ist; analogerweise kann man $\hat{Q}_{k,k'} \approx \hat{Q}_{k,0}$ annehmen⁵³. Für den Beitrag der C-HH- und C-LH-Übergänge zur linearen dielektrischen Funktion erhält man dann ($P_{kp} = \sqrt{\hbar^2 E_P / 2m}$ – Impuls-Matrixelement der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie, $P_{cv}(k, \omega)$ – Oszillatorstärke)

$$\Delta \varepsilon_{cv}(\omega) = \frac{e^2}{\varepsilon_0 \hbar \omega} \frac{1}{\pi^2} \int_0^{k_{BZ}} \frac{\frac{1}{3} P_{kp}^2 E_g^2}{(E_{ck} - E_{vk})^2} P_{cv}(k, \omega) k^2 dk; \quad v = h, l \quad (8.137)$$

Der Materialgewinn ist der mit (-1) multiplizierte Absorptionskoeffizient ($n_r = \sqrt{\varepsilon_b}$ – Brechungsindex),

$$g(\omega) = -\frac{\omega}{cn_r} [\Delta \varepsilon_{cv}(\omega) + \Delta \varepsilon_{cv}(\omega)] \quad (8.138)$$

Abbildung 8.3 zeigt numerische Ergebnisse für den typischen Halbleiter GaAs⁵⁴.

am Lösungsverfahren. Dieses funktioniert sogar auch noch dann, wenn nichtdiagonale Relaxationsglieder der Polarisation (siehe z.B. Chow, Smowton, Blood, Girndt, Jahnke & Koch, *Comparison of experimental and theoretical GaInP quantum well gain spectra*, 1997) berücksichtigt werden.

⁵³ Der Coulomb-Enhancement-Faktor wird dadurch unabhängig von k , nicht aber von ω ; sein Imaginärteil muss im Rahmen dieser Näherungen unterdrückt werden, da er zu Artefakten führt.

⁵⁴ Bandstrukturparameter finden sich z.B. in Madelung (Hrsg.), *Landolt-Börnstein Tables*, Bd. 17a, 1982; für $T=300\text{K}$: $E_P = 20\text{eV}$, $E_g = 1,45\text{eV}$, $m_c = 0,0665m$, $m_h = 0,377m$, $m_l = 0,09m$, $a_0 = 125\text{\AA}$, $\varepsilon_s = 13,74$, $\varepsilon_b = \varepsilon_\infty = 10,9$.

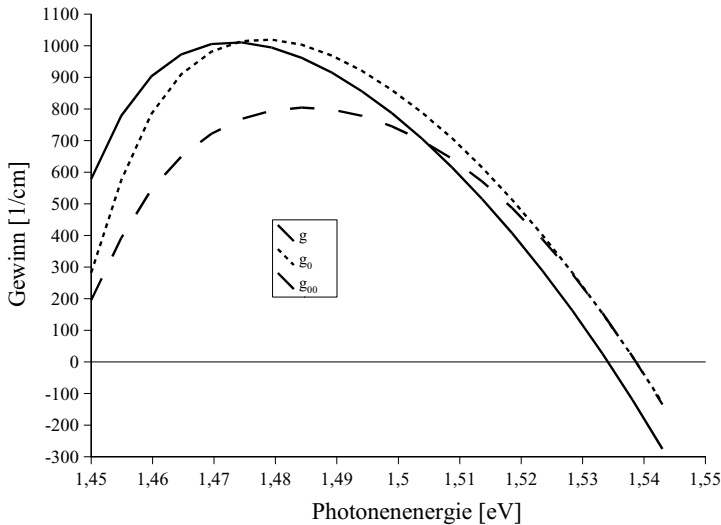


Abb. 8.3. Einfluss der Coulomb-induzierten HH-LH-Übergänge auf den Materialgewinn $g(\hbar\omega)$ in GaAs; $N_e = N_h = 3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$; $\delta \equiv \hbar/\tau_2 = 4,2 \text{ meV}$; g – Dreibandmodell; g_0/g_{00} – Quasizweibandmodell mit/ohne Coulomb-WW

Der Hauptunterschied zur Quasi-2-Band-Theorie besteht in einer Rotverschiebung des Gewinn-Maximums, während das Coulomb-Enhancement des Gewinn-Maximums etwa gleich ist. Diese Rotverschiebung sollte die Übereinstimmung von Theorie und Experiment deutlich verbessern, da die Zweiband-Theorie den Gewinn nahe der Energielücke unterbestimmt⁵⁵. Auch für die anderen optischen Koeffizienten ergeben sich merkliche Änderungen.

Insgesamt tragen sehr viele „Effekte“ zu den optischen Eigenschaften von Festkörpern bei. Wenn im Rahmen halbempirischer Theorien (auf die man angesichts der Komplexität der Verhältnisse in der Regel angewiesen ist) gewisse Parameter an experimentelle Befunde angepasst werden, sind viele Einflüsse in diesen Parametern summarisch berücksichtigt. Wir haben hier einen Effekt explizit untersucht, der bisher nicht beachtet wurde und der in der Größenordnung vieler anderer Einflüsse ist. Insofern hat man sich des *Pauling-Effektes*⁵⁶ zu gewärtigen. Dieser besteht darin, dass bei einer expliziten Berücksichtigung eines einzelnen Einflusses die in den (halb-)empirischen Parametern enthaltene Kompensation gegensätzlicher Einflüsse⁵⁷ in der er-

⁵⁵ Vgl. Chow, Smowton, Blood, Girndt, Jahnke & Koch, *Comparison of experimental and theoretical GaInP quantum well gain spectra*, 1997.

⁵⁶ Linus Carl Pauling (1901-1994, Nobelpreise 1954 und 1962), *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals*, 1960. – Die Bezeichnung Pauling-Effekt stammt nach J.-L. Calais (1976, S.39) von Per-Olov Löwdin.

⁵⁷ Ein Beispiel für eine solche Kompensation ist auch Sommerfelds Ableitung seiner Feinstruktur-Formel, in der sowohl die wellenmechanischen Effekte als auch der Spin unberücksichtigt sind (vgl. Yourgrau & Mandelstam, 1979, S.115).

weiterten Theorie nicht mehr wirksam wird, wodurch die Übereinstimmung zwischen Modell und Experiment zunächst schlechter werden kann.

*Aufgabe**: Eine interessante Anwendung dieser Ergebnisse betrifft die optischen Eigenschaften von Quantengraben. Aufgrund der Symmetriebrechung der Valenzbandstruktur sind die Übergänge C-HH und C-LH energetisch verschieden und optisch anisotrop; erstere emittieren und absorbieren vorwiegend TE-polarisiertes Licht – letztere vorwiegend TM-polarisiertes Licht. Deshalb erwartet man aus der Anregung der C-HH(LH)-Übergänge mit TE(TM)-polarisiertem Licht auch nur TE(TM)-polarisierte Photolumineszenz, auch wenn die C-LH(HH)-Übergangsenergien kleiner sind. Zeigen Sie, dass wegen der Hybrid-WW Photolumineszenz auch infolge der jeweils anderen Übergänge auftritt und berechnen Sie dessen Spektrum!

*Aufgabe**: Für die Stabilität von Halbleiterlasern können die nichtlinearen optischen Eigenschaften wichtig sein, z. B. kann spontane Selbstpulsation infolge nichtlinearer Gewinnsättigung auftreten. Letzteres bezeichnet das Absinken des Gewinns g mit zunehmender Lichtintensität I :

$$g_{TE} = g_{TE,0} - \frac{I_{TE}}{I_{TE,TE}^{\text{sätt}}} - \frac{I_{TM}}{I_{TE,TM}^{\text{sätt}}}, \quad g_{TM} = g_{TM,0} - \frac{I_{TM}}{I_{TM,TM}^{\text{sätt}}} - \frac{I_{TE}}{I_{TM,TE}^{\text{sätt}}}$$

Berechnen Sie den Einfluss der Hybrid-WW auf die Selbst- und Kreuzsättigungsintensitäten $I^{\text{sätt}}$!

8.7 Beispiel: Elektron-Phonon-Wechselwirkung. Diagramm-Technik

Die Elektron-Phonon-WW ist der entscheidende Mechanismus für den elektrischen Widerstand, einschließlich der Supraleitung, für strukturelle Phasenübergänge und viele andere Eigenschaften von und Erscheinungen an Kristallen (siehe auch Abschn. 8.3). Für unsere quantenfeldtheoretische Behandlung neu ist, dass diese WW zwischen *unterschiedlichen* Teilchentypen, nämlich zwischen Fermionen und Bosonen, stattfindet. Auch hierbei entsteht ein neues Quasiteilchen: das *Polaron*⁵⁸.

Wie die Elektron-Elektron-WW führt die Elektron-Phonon-WW prinzipiell auf *nicht*lineare Probleme, die sich nur bei starken Vereinfachungen exakt lösen lassen. Die Besetzungszahldarstellung stellt aber auch hier anschauliche systematische Näherungsmethoden bereit; wir brauchen sogar nicht besonders darauf zu achten, dass Fermionen mit Bosonen wechselwirken, da die (Anti-)Vertauschungsrelationen deren Unterschiede selbsttätig berücksichtigen.

⁵⁸ Pekar, *Lokale Quantenzustände des Elektrons im idealen Ionenkristall*, 1946. Für eine umfassende Übersicht siehe Henderson & Imbusch, *Optical spectroscopy of inorganic solids*, 1989. Wir werden uns auf einige quantenfeldtheoretische Aspekte beschränken.

8.7.1 Bloch-Elektronen und Phononen als Idealisierungen

Wir haben die Phononen als wechselwirkungsfreie Anregungen von gekoppelten harmonischen Oszillationen der Atomrümpfe um ihre Gleichgewichtslagen im Kristallgitter und die Bloch-Elektronen als elektronische Einteilchen-Elementaranregung im periodischen Potenzial des *starr*en Kristallgitters kennen gelernt. Beides sind Idealisierungen, denn

- die Coulomb-WW zwischen den Elektronen führt zu beliebig komplexen Vielteilchen-Effekten, wie wir weiter oben gesehen haben;
- die interatomaren Kräfte sind für endliche Auslenkungen nicht harmonisch, das führt zur Phonon-Phonon-WW; die Vielteilchen-Problematik ist hier ziemlich ähnlich der der Elektron-Elektron-WW, obwohl phänomenologisch natürlich ganz andere Eigenschaften des Festkörpers betroffen sind, zum Beispiel die thermische Ausdehnung und der Wärmewiderstand;
- die Gitterschwingungen verändern die Umgebung der Elektronen – umgekehrt tragen die Elektronen zur interatomaren WW bei; aus beidem ergibt sich die Elektron-Phonon-WW⁵⁹, die in diesem Abschnitt behandelt werden soll.

Grundsätzlich hat man hierfür zunächst die Hamilton- oder die Lagrange-Funktion des Gesamtsystems als Summe der Lagrange-Funktionen der beiden Teilsysteme und die der WW zwischen ihnen zu finden.⁶⁰ In diesem Kapitel werden wir uns aber auf Wechselwirkungen beschränken, die mit Hilfe einer potenziellen Energie beschrieben werden können, wir verschieben deshalb die Diskussion des Lagrange-Formalismus auf den § 8.8.1.

8.7.2 Elektron-Kern-Wechselwirkung in Born-Oppenheimer-Näherung

Die stationäre Schrödinger-Gleichung für das Elektron-Kern-System lautet

$$[T_{nucl} + T_{el} + V(r, R)]\Psi_E(r, R) = E\Psi_E(r, R) \quad (8.139)$$

Die Gesamt-Wellenfunktion $\Psi_E(r, R)$ wird nun aus elektronischen und Kern-Komponenten wie folgt dargestellt:

$$\Psi_E(r, R) = \sum_n \phi_n(r, R)\Phi_n(R) \quad (8.140)$$

Hierin beschreiben die Wellenfunktionen $\phi_n(r, R)$ das elektronische Subsystem bei *festgehaltenen* Kernen (R ist hier also ein äußerer Parameter; n läuft über alle elektronischen Zustände):

$$[T_{el} + V(r, R)]\phi_n(r, R) = \varepsilon_n(R)\phi_n(r, R) \quad (8.141)$$

⁵⁹ Landau, *Über die Bewegung des Elektrons im Kristallgitter*, 1933.

⁶⁰ Vgl. Nelson, *Electric, Optic, & Acoustic Interactions in Dielectrics*, 1979.

Denn da die Atomkerne viel schwerer als die Elektronen sind, kann man in 1. Näherung annehmen, dass die Bewegung der Elektronen denen der Kerne praktisch instantan folgt bzw. die Gitterschwingungen für die Elektronen eine hinreichend langsame, adiabatische Potenzialänderung bewirken (Born & Oppenheimer 1927⁶¹).

Wir setzen nun die Entwicklung (8.140) in die Schrödinger-Gleichung (8.139) ein und integrieren die elektronischen Orte aus. Das ergibt

$$\begin{aligned} \sum_n \langle \phi_m(r, R) | T_{el} \Phi_n(R) | \phi_n(r, R) \rangle + \varepsilon_m(R) \Phi_m(R) \\ \equiv \sum_n \hat{H}_{mn}^{\text{eff}}(R) \Phi_n(R) = E \Phi_m(R) \end{aligned} \quad (8.142)$$

$\hat{H}_{mn}^{\text{eff}}(R)$ ist ein matrixwertiger Hamiltonian für die Kernbewegung. Die R -Abhängigkeiten der elektronischen Energieniveaus bilden „effektive Potenzialalgebirge“ für die Kerne. Die effektive kinetische Energie besteht aus Termen der Form (siehe Aufgabe)

$$\langle \phi_m | \nabla_R^2 \Phi_n \phi_n \rangle = \sum_l (\delta_{ml} \nabla_R + \langle \phi_m | \nabla_R \phi_l \rangle) (\delta_{ln} \nabla_R + \langle \phi_l | \nabla_R \phi_n \rangle) \Phi_n \quad (8.143)$$

Die formale Ähnlichkeit mit den (skalaren) Ausdrücken in den Gleichungen (4.126) ff. und (8.167) unten suggeriert die Definition eines (*matrix*wertigen, mithin nicht-Abelschen⁶²) „Eichpotenzials“

$$\mathbf{A}_{mn} \stackrel{\text{def}}{=} i\hbar \langle \phi_m | \nabla_R \phi_n \rangle \quad (8.144)$$

(Moody, Shapere & Wilczek, 1989), wie sogleich noch deutlicher werden wird.

Die Born-Oppenheimer-Näherung besteht nun neben dem Ansatz (8.140) darin, die Nichtdiagonal-Matrixelemente von $\hat{H}_{mn}^{\text{eff}}$ (8.142) zu vernachlässigen. Für nichtentartete elektronische Zustände n ist dann der effektive Kern-Hamiltonian gleich

$$\hat{H}_n^{\text{BO}}(R) = \frac{1}{2M} [-i\hbar \nabla_R + \mathbf{A}_{nn}(R)]^2 + \tilde{\varepsilon}_n(R) \quad (8.145)$$

mit dem effektiven skalaren Potenzial (siehe Aufgabe)

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_n(R) &\equiv \varepsilon_n(R) + \frac{1}{2M} \sum_{l \neq n} \langle \phi_n | \nabla_R \phi_l \rangle \langle \phi_l | \nabla_R \phi_n \rangle \\ &= \varepsilon_n(R) + \frac{1}{2M} \sum_{l \neq n} \left| \frac{\langle \phi_n | (\nabla_R H) | \phi_l \rangle}{\varepsilon_n(R) - \varepsilon_l(R)} \right|^2 \end{aligned} \quad (8.146)$$

⁶¹ Max Born (1882-1970, Nobelpreis 1954) & Julius Robert Oppenheimer (1904-1967), *Zur Quantentheorie der Molekeln*, 1927.

⁶² Niels Henrik Abel (1802-1829)

Der Born-Oppenheimer-Hamiltonian (8.145) besitzt die Gestalt des Hamiltonians eines elektrisch geladenen Teilchens in einem statischen elektrischen Feld $\tilde{\varepsilon}_n(R)/q$ und statischen magnetischen Feld $\mathbf{B} = \nabla_R \times \mathbf{A}_{nn}(R)/q$, wenn q die Ladung des Teilchens ist. Die damit verbundenen Eichtransformationen (siehe § 4.5.4) führen zu *geometrischen Phasen* auch für die elektronischen Wellenfunktionen. Da diese mit – für die Elektronen – adiabatischen Bewegungen im Parameterraum (hier der Kernorte R) verbunden sind, nennt man diese auch *adiabatische Phasen*.

Aufgabe: Beweisen Sie die Formeln (8.143) und (8.146)! Hinweise: Achten Sie auf die Reihenfolge der Operatoren; benutzen Sie die Beziehung $\langle \nabla_R \phi_m | \phi_l \rangle + \langle \phi_m | \nabla_R \phi_l \rangle = 0$!

8.7.3 Deformationspotenzial-Wechselwirkung *

Wir wollen nun das Wechselwirkungspotenzial $V(r, R)$ näher betrachten.

Die Änderung (gegenüber dem idealen Kristallgitter) des auf die Elektronen wirkenden Gitterpotenzials besteht aus zwei Anteilen:

- der Polarisierung des Gitters durch Verschiebung der geladenen Gitterbausteine (Fröhlich-Wechselwirkung⁶³); wichtige Effekte dieser Polarisierung sind die Farbzentren in Isolatoren und die konventionelle Supraleitung in Metallen;
- der (nichtpolaren) Deformationspotenzial-Wechselwirkung⁶⁴; eine wichtige Anwendung dieser Wechselwirkung ist die Optimierung von Halbleiter-Bauelementen durch gezielte Verspannung des Kristallgitters.

Für die nichtpolare Wechselwirkung ist der Hamiltonian viel einfacher herzuleiten, sie wird daher im folgenden betrachtet; und zwar, um Indizes zu sparen, für ein Bravais-Gitter.⁶⁵

Die N Atomkerne seien um die Verschiebungen \mathbf{u}_l , $l = 1 \dots N$, aus ihren Gleichgewichtslagen $\{\mathbf{R}_l\} = \{\mathbf{G}\}$ (\mathbf{G} – Gittervektor) ausgelenkt. Dadurch ändert sich das Einelektronen-Potenzial $V(\mathbf{r})$ gegenüber dem starren Gitterpotenzial (4.138) um

$$\delta V(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^N [V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l - \mathbf{u}_l) - V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)] \quad (8.147)$$

⁶³ Herbert Fröhlich (1905-1991), Proc. Roy. Soc. 160 (1937) 230; *Theory of the superconducting state*, 1950; *Interactions of electrons with lattice vibrations*, 1952. S. auch Lee, Low & Pines, *The Motion of Slow Electrons in Polar Crystals*, 1953.

⁶⁴ Bardeen, *Conductivity of Monovalent Metals*, 1937; Bardeen & Pines, *Electron-phonon interaction in metals*, 1955.

⁶⁵ Wir folgen Haken, *Quantenfeldtheorie des Festkörpers*, 1973, § 15, und vernachlässigen die Deformation des reziproken Gitters (s. hierzu Jones & March, *Theoretical Solid State Physics*, Vol.2, 1973, Appendix 8.1; Bir & Pikus, *Deformationseffekte in Halbleitern*, 1972), da diese am Prinzip der Wechselwirkung und des quantenfeldtheoretischen Formalismus nichts ändert.

Die Verschiebungen sind im allgemeinen so klein, dass $\delta V(\mathbf{r})$ in eine Taylorreihe bezüglich der Auslenkungen \mathbf{u}_l entwickelt werden kann:

$$\delta V(\mathbf{r}) = - \sum_{l=1}^N \mathbf{u}_l \cdot \nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) + O(u^2) \quad (8.148)$$

Die durch dieses Potenzial induzierte Wechselwirkung wird auch als Bloch-Wechselwirkung bezeichnet.

Die Hamilton-Funktion $H_{\text{WW}}(\mathbf{r}) = \delta V(\mathbf{r})$ quantisieren wir als Summe von Produkten von Phonon- und Elektron-Operatoren; dabei betrachten wir die Auslenkungen \mathbf{u}_l im Sinne der oben genannten adiabatischen Näherung als (quasi-)statisch, d. h. zeitunabhängig. Das Prinzip erläutern wir anhand des einfachen Falles nur eines Bandes und des longitudinal-akustischen Schwingungszweiges⁶⁶:

$$\mathbf{u}_l \rightarrow \hat{\mathbf{u}}_l = \mathbf{e}_l \sum_{\mathbf{w}} \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\mathbf{w}}}} (b_{\mathbf{w}} e^{i\mathbf{w} \cdot \mathbf{R}_l} + b_{\mathbf{w}}^+ e^{-i\mathbf{w} \cdot \mathbf{R}_l}); \quad \mathbf{e}_l = \frac{\mathbf{u}_l}{|\mathbf{u}_l|} \quad (8.149)$$

$$\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) \rightarrow \nabla_{\mathbf{r}} \hat{V}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle \psi_{\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) | \psi_{\mathbf{k}'} \rangle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}'} \quad (8.150)$$

Das lokale Potenzial $V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)$ ist nicht gitterperiodisch, daher ist das Matricelement in Gleichung (8.150) nicht diagonal in \mathbf{k} .⁶⁷ Zusätzliche Informationen gewinnt man aber durch die Fourier-Darstellung (\mathbf{q} ist hier nicht auf die 1. Brillouin-Zone beschränkt!)⁶⁸

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R})}; \quad \nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = i \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{q} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R})} \quad (8.151)$$

Das Matricelement in Gleichung (8.150) erhält dadurch die Form

$$\langle \psi_{\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r} - \mathbf{R}) | \psi_{\mathbf{k}'} \rangle = i \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \mathbf{q} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} \int_{\text{Kristall}} \bar{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{q} - \mathbf{k} + \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (8.152)$$

⁶⁶ Die transversal-akustischen Phonon-Moden tragen nicht zur WW (8.148) bei; in Nolting, *Viel-Teilchen-Theorie*, 2001, § 2.3, wird der allgemeine Fall konsequent durchgerechnet.

⁶⁷ Deshalb kann es mitunter günstiger sein, Wannier- statt Bloch-Funktionen zu benutzen, vgl. Ferreira, *Formulation of the Lattice Dynamics Problem in Terms of Rigidly Moving Wannier Functions*, 1971.

⁶⁸ Diese und weitere nützliche Gittersummen finden sich z. B. in Brauer & Streitwolf, *Theoretische Grundlagen der Halbleiterphysik*, 1973, Appendix 1.

Da die Bloch-Faktoren $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ gitterperiodisch sind, ist das Integral nur dann von Null verschieden, wenn $(\mathbf{q} - \mathbf{k} + \mathbf{k}') = \mathbf{K}$, ein reziproker Gittervektor, ist. Damit wird

$$\begin{aligned} \delta \hat{V} = & -i \sum_{l\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{K}\mathbf{w}} (\mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_l) V_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_l} \int_{\text{Kristall}} \bar{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ & \times \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\mathbf{w}}}} (b_{\mathbf{w}} e^{i\mathbf{w} \cdot \mathbf{R}_l} + b_{\mathbf{w}}^+ e^{-i\mathbf{w} \cdot \mathbf{R}_l}) a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{q}-\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{K}} \quad (8.153) \end{aligned}$$

Wenn wir die l -Abhängigkeit von \mathbf{e}_l vernachlässigen und $\mathbf{e}_l = \mathbf{e}$ setzen, können wir dank der Beziehung (\mathbf{K}' ist ebenfalls ein reziproker Gittervektor)

$$\sum_l e^{-i(\mathbf{q} \mp \mathbf{w}) \cdot \mathbf{R}_l} = N \sum_{\mathbf{K}'} \delta_{\mathbf{q} \mp \mathbf{w}, \mathbf{K}'} \quad (8.154)$$

die l -Summe ausführen. In der \mathbf{w} -Summe mit $b_{\mathbf{w}}$ lässt sich \mathbf{w} durch $-\mathbf{w}$ ersetzen. Dadurch vereinfacht sich Gleichung (8.153) zu

$$\begin{aligned} \delta \hat{V} = & -i \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}\mathbf{K}\mathbf{K}'\mathbf{w}} (\mathbf{q} \cdot \mathbf{e}) V_{\mathbf{q}} \int_{\text{Kristall}} \bar{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ & \times \sqrt{\frac{N\hbar}{2M\omega_{\mathbf{w}}}} (b_{-\mathbf{w}} + b_{\mathbf{w}}^+) a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{q}-\mathbf{k}+\mathbf{k}',\mathbf{K}} \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{w},\mathbf{K}'} \quad (8.155) \end{aligned}$$

Zur Auswertung der beiden Kronecker-Symbole setzen wir $\mathbf{q} = \mathbf{q}' + \mathbf{K}''$, $\mathbf{q}' \in 1.\text{BZ}$, nebst $\sum_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{q}',\mathbf{K}''}$ (auch \mathbf{K}'' ist ein reziproker Gittervektor). Folglich sind

$$\mathbf{q}' - \mathbf{k} + \mathbf{k}' = \mathbf{K} - \mathbf{K}'' \quad \text{und} \quad \mathbf{q}' + \mathbf{w} = \mathbf{K}' - \mathbf{K}''$$

Im der linken Gleichung kann die Summe der drei reduzierten Vektoren gleich Null oder gleich dem kleinsten reziproken Gittervektor, \mathbf{K}_{\min} , sein. Mithin gelten $\mathbf{q}' = -\mathbf{w}$ und

$$\mathbf{q}' - \mathbf{k} + \mathbf{k}' = -\mathbf{w} - \mathbf{k} + \mathbf{k}' = \mathbf{K} - \mathbf{K}' = \mathbf{K}_0 \equiv \{\mathbf{0}, \mathbf{K}_{\min}\}$$

Damit bleibt in Gleichung (8.153) von den Summen über \mathbf{k}' , \mathbf{q}' , \mathbf{K} und \mathbf{K}' nur die Summe über \mathbf{K}'' übrig:

$$\begin{aligned} \delta \hat{V} = & -i \sum_{\mathbf{k}\mathbf{w}\mathbf{K}_0\mathbf{K}''} (\mathbf{K}'' - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{e} V_{\mathbf{K}''-\mathbf{w}} \int_{\text{Kristall}} \bar{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{K}''+\mathbf{K}_0) \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}+\mathbf{w}+\mathbf{K}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ & \times \sqrt{\frac{N\hbar}{2M\omega_{\mathbf{w}}}} (b_{-\mathbf{w}} + b_{\mathbf{w}}^+) a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}+\mathbf{K}_0} \quad (8.156) \end{aligned}$$

Die Faktoren vor den Operatoren fassen wir schließlich zum Wechselwirkungs-Matrixelement

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{w}}^{\mathbf{K}_0} = -i\sqrt{\frac{N\hbar}{2M\omega_{\mathbf{w}}}} \sum_{\mathbf{K}} [(\mathbf{K} - \mathbf{w}) \cdot \mathbf{e}] V_{\mathbf{K}-\mathbf{w}} \times \int_{\text{Kristall}} \bar{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{K}_0)\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}+\mathbf{w}+\mathbf{K}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (8.157)$$

zusammen und erhalten den übersichtlichen Ausdruck

$$\delta\hat{V} = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{w}\mathbf{K}_0} V_{\mathbf{k},\mathbf{w}}^{\mathbf{K}_0} (b_{-\mathbf{w}} + b_{\mathbf{w}}^+) a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}+\mathbf{w}+\mathbf{K}_0} \quad (8.158)$$

Er beschreibt die *inelastische Streuung* eines Elektrons aus dem Zustand $(\mathbf{k} + \mathbf{w} + \mathbf{K}_0)$ in den Zustand \mathbf{k} , wobei ein Phonon mit dem Impuls $-\mathbf{w}$ absorbiert oder eines mit dem Impuls \mathbf{w} emittiert wird; für die Elektronen gilt Teilchenzahlerhaltung, für die Phononen nicht! Wie bei der Elektron-Elektron-WW wird die Impulserhaltung explizit angezeigt. Wenn $\mathbf{K}_0 = \mathbf{K}_{\min} \neq \mathbf{0}$ (man spricht hier, geometrisch motiviert, von Umklapp-Prozessen, andernfalls von Normal-Prozessen), wird die Impulsbilanz durch eine Translation des gesamten Gitters hergestellt; wegen dessen großer Masse ist diese Bewegung im allgemeinen unmessbar klein.

Die Berechnung der Matrixelemente (8.157) ist ziemlich aufwendig.⁶⁹ Eine wesentliche Vereinfachung ergibt sich bei der Verwendung empirischer Parameter, insbesondere der universellen Matrixelemente (4.151)⁷⁰.

Aufgabe:* Stellen Sie einen Zusammenhang zwischen dem Typ der chemischen Bindung im Kristall und der Stärke der polaren/nichtpolaren Elektron-Phonon-WW her!

8.7.4 Diagrammtechniken zur Behandlung von Wechselwirkungen: Feynman-Graphen

Zur Veranschaulichung und Hilfe bei der Systematisierung der vielen verschiedenen Wechselwirkungsprozesse hat Feynman (1949) die nach ihm benannten Graphen ersonnen. Eine geringe Anzahl von Regeln stellt eine eindeutige Beziehung zu den entsprechenden Formeln her. Dies ist insbesondere für die Untersuchung der ansonsten sehr unübersichtlichen störungstheoretischen Ausdrücke höherer Ordnungen ungemein hilfreich. Da wir die hierfür benutzten Greenschen Funktionen nicht behandeln, gehen wir auf diese Regeln nicht näher ein⁷¹, sondern beschränken uns auf einige Grundideen der Konstruktion von Feynman-Graphen, vgl. Abb. 8.4.

⁶⁹ Eine ausführliche Diskussion der Überlappingsintegrale in Gl. (8.157) findet sich in Brauer, *Einführung in die Elektronentheorie der Metalle*, 1972.

⁷⁰ Harrison, *Electronic structure and the properties of solids*, 1980; Enders, *Acoustic and Optical Deformation Potentials in Cubic IV-VI Compounds*, 1985.

⁷¹ Siehe z. B. Penzlin, *Die Methode der Feynmanschen Graphen*, 1962; Feynman, *QED: The Strange Theory of Light and Matter*, 1986. - Diese Technik wurde inzwischen auf viele andere Gebiete übertragen und findet sich in den jeweiligen Lehrbüchern und Monographien.

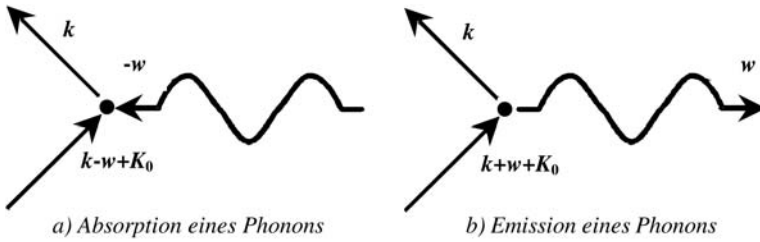


Abb. 8.4. Feynman-Graphen für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung (s. Text)

Die beiden Feynman-Graphen in Abb. 8.4 veranschaulichen die Elektron-Phonon-Streuung 1. Ordnung entsprechend dem WW-Potenzial (8.158). Es wird genau ein Phonon absorbiert (vernichtet; *a*) beziehungsweise emittiert (erzeugt; *b*). Glatte Linien repräsentieren Fermionen; wegen der Fermionenzahlerhaltung gibt es genauso viel ein- wie auslaufende Fermionen-Linien. Wellenlinien repräsentieren Bosonen; für sie gilt die Teilchenzahlerhaltung nicht, deshalb kann es unterschiedlich viele ein- und auslaufende Bosonen-Linien geben. Die Teilchenimpulse sind hier die adäquaten Quantenzahlen, mit denen die Linien gekennzeichnet werden. Es gilt stets die Erhaltung des Gesamtimpulses (die Wellenlinie für den Gitterimpuls \mathbf{K}_0 wird gewöhnlich unterdrückt, da dieses „Teilchen“ nicht an weiteren Streuprozessen teilnimmt).

Die Fermionen können reale – wie im Abb. 8.4 – und *virtuelle Übergänge* in andere Zustände vollziehen. Bei letzteren gehen sie am Ende des Streuprozesses in ihre ursprünglichen Zustände zurück (modulo Austausch gleicher Teilchen). Die Generation und nachfolgende Rekombination virtueller Elektron-Loch-Paare findet beispielsweise bei der Lichtbrechung statt, während Absorption und Erzeugung von Licht mit realen Übergängen verbunden ist.

Die Grunddiagramme können im Rahmen des physikalisch Möglichen beliebig zusammengesetzt werden und stellen dann Prozesse höherer störungstheoretischer Ordnungen dar. Die Aufsummation unendlich vieler (Teil-)Prozesse führt zur sogenannten *Renormierung* der Einteilchen-Eigenschaften und des Wechselwirkungspotenzials (dies ist insbesondere für die Berechnung von Lebensdauern und Extinktionseffekten erforderlich). Diese Partialsummen können durch hervorgehobene Linien und Vertices (Streuzentren) symbolisiert und auf analoge Weise störungstheoretisch entwickelt werden. Dank dessen können auch sehr verwickelte Viel-Teilchen-Prozesse in grafisch kondensierter Weise anschaulich und übersichtlich dargestellt werden.

Unter geeigneten Bedingungen entstehen aus der Elektron-Phonon-WW *neue Elementaranregungen*, die sogenannten Polaronen⁷². Ihren Namen verdanken sie der Vorstellung, dass ein Elektron bei seiner Bewegung durch das Kristallgitter die jeweils nächstgelegenen Gitterbausteine anzieht beziehungsweise abstößt und folglich mit einer „Polarisationswolke“ umgeben ist. Die

⁷² Landau, *Über die Bewegung des Elektrons im Kristallgitter*, 1933; Dexter & Knox, *Excitons*, 1965.

Ausbildung dieser Polarisation kostet Zeit, deshalb verlangsamt diese Wechselwirkung die Dynamik des Polarons: die effektive Masse wird zur sogenannten Polaronenmasse vergrößert („renormiert“).

Ein weiterer wichtiger Effekt der Elektron-Phonon-WW besteht in der Induktion einer effektiven, durch Phononen vermittelten Elektron-Elektron-WW. Diese kann sogar anziehend sein, die Coulomb-Abstoßung überwinden und so zu gebundenen Paaren von Elektronen, den Cooper-Paaren führen: dies ist die Grundlage der Theorie der (gewöhnlichen) Supraleitung.⁷³ Auch hier bringt die Quantenfeldtheorie nebst Besetzungszahldarstellung eindrucksvolle Vorteile in der Eleganz der Durchführung.

8.8 Beispiel: Elektron-Photon-Wechselwirkung. Polaritonen

Der Begriff der *Wechselwirkung* (WW) beinhaltet die gegenseitige Beeinflussung zweier Systeme. Im Rahmen der Quantentheorie müssen dazu beide Systeme quantentheoretisch behandelt werden; eine halbklassische Theorie vernachlässigt die Rückwirkung des Quantensystems auf das klassisch behandelte System völlig – es sei denn, man verwendet die quantenmechanischen (Fluss)Dichten als klassische Quellen für jene Systeme⁷⁴. In vielen Fällen ist diese Vereinfachung gerechtfertigt – andererseits lassen sich bestimmte *qualitative* Effekte, wie das unten zu beschreibende Anticrossing der Dispersionskurven der isolierten Systeme, im Rahmen einer halbklassischen Theorie *prinzipiell nicht* erfassen. Mit dem excitonischen Polariton werden wir im Detail betrachten, wie durch die Wechselwirkung eine neue Elementaranregung entsteht.⁷⁵

8.8.1 Maxwell-Lorentz-Theorie

Wir ergänzen jetzt in den Maxwell-Gleichungen (8.20) die Quellen, wobei wir mit Lorentz (1895, 1909) annehmen, dass diese aus frei beweglichen elektrischen Ladungen der Dichte $\rho_{\text{el}}(\mathbf{r}, t)$ und ihren Konvektionsströmen $\mathbf{j}_{\text{el}}(\mathbf{r}, t)$ bestehen:

⁷³ Die im § 6.6.3. zitierte BCS-Theorie folgt aus dem Formalismus von Feynman (*An operator calculus having applications in quantum electrodynamics*, 1951) durch Vernachlässigung der Retardierung und der Nichtlokalität in der Wechselwirkung. Sie wird in vielen Lehrbüchern und Monographien beschrieben. Eine besonders anschauliche und ausführliche Darstellung findet sich in March, Young & Sampanthar, 1967, Ch.7.

⁷⁴ Einen solchen Zugang hat Jettmann (*Konsistente Behandlung der Zeitentwicklung bei der spontanen Lichtemission freier Atome*, 1987) durchgerechnet. – Ich danke Prof. L. Fritsche für den Hinweis auf diese Problematik und die Überlassung einer Kopie dieser Arbeit.

⁷⁵ Vgl. Dirac, *The Quantum Theory of the Emission and Absorption of Radiation*, 1927.

$$\nabla \mathbf{E} = \varepsilon_0^{-1} \rho_{\text{el}}; \quad \nabla \mathbf{B} = 0; \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\dot{\mathbf{B}}; \quad \nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j}_{\text{el}} + c_0^{-2} \dot{\mathbf{E}} \quad (8.159)$$

Für die Potenziale (8.21) ergeben sich die Gleichungen

$$\Delta \Phi + \nabla \dot{\mathbf{A}} = -\varepsilon_0^{-1} \rho_{\text{el}}; \quad \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} + c_0^{-2} \ddot{\mathbf{A}} + c_0^{-2} \nabla \dot{\Phi} = \mu_0 \mathbf{j}_{\text{el}} \quad (8.160)$$

Es ist offensichtlich, dass die Eichung (8.22) *nicht* angewendet werden darf. Eine Alternative besteht in der Lorenz-Eichung⁷⁶:

$$\nabla \mathbf{A} + c_0^{-2} \dot{\Phi} = 0 \quad (8.161)$$

Ihr Vorteil gegenüber anderen weiterhin möglichen Eichungen besteht darin, dass die beiden Gleichungen (8.160) entkoppeln; man erhält für beide Potenziale inhomogene Wellengleichungen:

$$\left(\Delta - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \Phi(\mathbf{r}, t) = -\varepsilon_0^{-1} \rho_{\text{el}}(\mathbf{r}, t); \quad \left(\Delta - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -\mu_0 \mathbf{j}_{\text{el}}(\mathbf{r}, t) \quad (8.162)$$

Die Einwirkung des elektromagnetischen Feldes auf die Ladungsdichte wird durch die Lorentz-Kraftdichte (Lorentz, 1895, 1909) beschrieben:

$$\mathbf{f} = \rho_{\text{el}} \mathbf{E} + \mathbf{j}_{\text{el}} \times \mathbf{B} \quad (8.163)$$

Um sie in die Lagrangeschen Bewegungsgleichungen einzubringen, muss, da in letztere nur die Ableitungen der Lagrange-Dichte eingehen, nicht aber die Lagrange-Dichte selbst, das Wechselwirkungsglied mit den Potenzialen gebildet werden. Da die Lagrange-Dichte ein Skalar ist, besteht der einfachste Ansatz darin, das skalare Potenzial mit der Ladungsdichte und das Vektorpotenzial skalar mit der Stromdichte zu multiplizieren⁷⁷:

$$\mathcal{L}_{\text{WW}} = \mathbf{j}_{\text{el}} \cdot \mathbf{A} - \rho_{\text{el}} \cdot \Phi \quad (8.164)$$

(die möglichen numerischen Koeffizienten erweisen als +1 und -1). Aus offensichtlichen Gründen nennt man diese Wechselwirkung *minimale Kopplung*.

Wenn die Lagrange-Dichte für die geladenen Körper ohne Feld die Form (8.9) besitzt, wird mit $\mathbf{j}_{\text{el}} = \rho_{\text{el}} \dot{\mathbf{u}}$ die kanonische Impulsdichte (8.16) gleich

$$\boldsymbol{\pi}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \dot{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t) + \rho_{\text{el}}(\mathbf{r}, t) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (8.165)$$

Der kanonische Feld-Impuls (8.26) ändert sich nicht.

⁷⁶ Diese Eichung stammt nicht, wie man oftmals liest, von Hendrik Antoon Lorentz, sondern von Ludvig V. Lorenz (1867).

⁷⁷ Vgl. Larmor, *Aether and Matter*, 1900; Nelson, *Electric, Optic, & Acoustic Interactions in Dielectrics*, 1979.

Die *Hamilton-Dichte* des Gesamtsystems ist dementsprechend

$$\mathcal{H}_{\text{tot}} \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{\pi} \cdot \dot{\mathbf{u}} + \boldsymbol{\Pi} \cdot \dot{\mathbf{A}} - \mathcal{L}_{\text{tot}}(u, \Phi, \mathbf{A}) = \mathcal{T}(\boldsymbol{\pi} - \rho_{\text{el}} \mathbf{A}) + \mathcal{V}(u) + \mathcal{H}_{\text{Feld}} + \rho_{\text{el}} \Phi \quad (8.166)$$

$\mathcal{H}_{\text{Feld}}$ ist die Hamilton-Dichte des quellenfreien Feldes in Gleichung (8.27).

In der Hamilton-Dichte ist die klare Form (8.164) der Wechselwirkung leider nicht mehr offensichtlich. Die bekannte

Regel: *Der Hamiltonian eines Systems elektrische Ladungen + elektromagnetisches Feld ist gleich dem Hamiltonian der Ladungen unter dem Einfluss des Feldes plus dem Hamiltonian des freien Feldes; die Veränderung der Feldes infolge der Wechselwirkung wird „automatisch“ berücksichtigt.*

und ihre Interpretation als Erscheinungsform des 3. Newtonschen Axioms *actio = reactio* (Haken, 1973, §§ 15, 44) mag deshalb etwas obskur erscheinen. Sie findet aber in der Lagrange-Dichte (8.164) ihre natürliche Erklärung.

Für ein als punktförmig angenommenes Elektron der Ladung $-e$, das sich im Kristall-Potenzial $V_G(\mathbf{r})$ bewegt, erhält man für die Hamilton-Funktion (siehe §§ 3.1.2 und 4.6.1)

$$H_{\text{tot}} = \frac{1}{2m} (\mathbf{P} + e\mathbf{A})^2 + V_G(\mathbf{r}) - e\Phi + H_{\text{Feld}} \quad (8.167)$$

Aufgabe: Ändert die Existenz von Quellen die Anzahl der Freiheitsgrade des elektromagnetischen Feldes? (Hinweis: Sind die Funktionen $\rho_{\text{el}}(\mathbf{r}, t)$ und $\mathbf{j}_{\text{el}}(\mathbf{r}, t)$ unabhängig voneinander?)

Aufgabe:* Wie lauten die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen? Zeigen Sie ihre Äquivalenz mit den Lagrange-Gleichungen!

8.8.2 Erste Quantisierung

Bei der 1. Quantisierung wird in der Ortsdarstellung der kanonische Impuls \mathbf{P} durch den Operator $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla$ ersetzt. Das Feld werde kanonisch quantisiert. Dadurch wird die klassische Hamilton-Funktion (8.167) zum Hamilton-Operator

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \nabla^2 - ie\hbar \left(\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}} \cdot \nabla \right) + e^2 \hat{\mathbf{A}}^2 \right] + V_G - e\Phi + \hat{H}_{\text{Feld}} \quad (8.168)$$

Hierbei war wegen $\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \neq \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{\mathbf{P}}$ auf die Reihenfolge der Ausdrücke beim Ausmultiplizieren des Quadrates $(\hat{\mathbf{P}} + e\hat{\mathbf{A}})^2$ zu achten.

Oft wird der Hamiltonian (8.168) mit Hilfe der Eichung (8.22) vereinfacht. Man kann aber nur entweder das skalare Potenzial: $\Phi(\mathbf{r}, t) \equiv 0$, oder die

Divergenz des Vektorpotenzials: $\nabla \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \equiv 0$, eliminieren. Wir wählen hier die erste Option und erhalten für den Gesamt-Hamiltonian den Ausdruck

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \hat{H}_{\text{El}} + \hat{H}_{\text{Feld}} + \hat{H}_{\text{WW}}; \quad \hat{H}_{\text{El}} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_G;$$

$$\hat{H}_{\text{WW}} = \frac{-ie\hbar}{2m} (\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}} \cdot \nabla) \quad (8.169)$$

Im Unterschied zur halbklassischen Theorie führt die gleichberechtigte Behandlung von Ladungen und Feldern zu einer Modifizierung sowohl des elektronischen als auch des photonischen Energiespektrums, wie wir weiter unten sehen werden.

Aufgabe: Zeigen Sie, dass man in Gebieten mit Quellen nicht mehr $\Phi(\mathbf{r}, t) = \nabla \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \equiv 0$ erreichen kann!

8.8.3 Aharonov-Bohm-Effekt *

Wir hatten im Abschnitt 4.5 gesehen, dass der Energiesatz bestimmte Anforderungen an die Modellierung auch derjenigen Felder impliziert, von denen die Gesamtenergie und die Bezugslänge *nicht* abhängen. Zu diesen Feldern gehört, in Bezug auf elektrische Ladungen, das Magnetfeld außerhalb einer unendlich langen dichtgewickelten einlagigen Spule konstanten Durchmessers d , die von einem konstanten Strom I durchflossen wird. Außerhalb der Spule verschwindet zwar die magnetische Feldstärke: $\mathbf{B}(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{0}$, nicht jedoch das Vektorpotenzial, das hier ein Gradientenfeld ist: $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \nabla \varphi_A(\mathbf{r}) \neq \mathbf{0}$. Dies ist nun genau die im § 4.5.3 betrachtete Situation mit $\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{e}{\hbar} \varphi_A(\mathbf{r})$.⁷⁸ Das heißt, dass die Wellenfunktion eines an dieser Spule vorbeifliegenden Elektrons eine Phasenverschiebung erfährt (wir kehren hier vorübergehend zur halbklassischen Betrachtungsweise zurück):

$$\psi(\mathbf{r}, t; \mathbf{A}) = \psi(\mathbf{r}, t; 0) e^{i \frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'} \quad (8.170)$$

Betrachten wir nun als Gedankenexperiment eine Doppelspalt-Interferenz-Anordnung, bei der sich eine solche Spule gut isoliert zwischen den Spalten befindet. Wenn nur Spalt 1 offen ist, sei die Wellenfunktion hinter dem Spalt

$$\psi_1(\mathbf{r}, t; \mathbf{A}) = \psi_1(\mathbf{r}, t; 0) e^{i \frac{e}{\hbar} \int_{\text{Spalt 1}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'} \quad (8.171)$$

⁷⁸ Ein ansonsten wechselwirkungsfreies Elektron, das sich mit der Geschwindigkeit \mathbf{v} *innerhalb* eines konstanten Magnetfeldes \mathbf{B} klassisch bewegt, beschreibt Schraubenlinien parallel zu \mathbf{B} mit dem Windungsradius $r_c = m|\mathbf{v} \times \mathbf{B}|/eB^2$, dem Windungsabstand $h_c = m|\mathbf{v} \cdot \mathbf{B}|/eB^2$ und der Umlaufperiode $T_c = 2\pi/\omega_c = 2\pi m/eB$ (ω_c – Zyklotronfrequenz) (Jaworski & Detlaf, *Physik griffbereit*, 1972). Mithin ist die charakteristische Länge r_c eines solchen Systems und also seine Bezugslänge x_0 energie- und feldabhängig, so dass die Überlegungen des § 4.5.3 keine Anwendung finden.

Ist dagegen nur Spalt 2 offen, sei die Wellenfunktion hinter dem Spalt

$$\psi_2(\mathbf{r}, t; \mathbf{A}) = \psi_2(\mathbf{r}, t; 0) e^{i \frac{e}{\hbar} \int_{\text{Spalt 2}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'} \quad (8.172)$$

Sind nun beide Spalte offen, haben wir für die Wellenfunktion die Summe beider:

$$\begin{aligned} \psi_{1+2}(\mathbf{r}, t; \mathbf{A}) &= \psi_1(\mathbf{r}, t; 0) e^{i \frac{e}{\hbar} \int_{\text{Spalt 1}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'} \\ &\quad + \psi_2(\mathbf{r}, t; 0) e^{i \frac{e}{\hbar} \int_{\text{Spalt 2}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'} \end{aligned} \quad (8.173)$$

$$= [\psi_1(\mathbf{r}, t; 0) e^{i \frac{e}{\hbar} \Phi_B} + \psi_2(\mathbf{r}, t; 0)] e^{i \frac{e}{\hbar} \int_{\text{Spalt 2}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'} \quad (8.174)$$

Hierin ist Φ_B der magnetische Fluss.

Das heißt, zwischen den Wellenfunktionen $\psi_1(\mathbf{r}, t; 0)$ und $\psi_2(\mathbf{r}, t; 0)$ entsteht eine *zusätzliche Phasendifferenz*, die das gewöhnliche Interferenzbild verschiebt: der *Aharonov-Bohm-Effekt*⁷⁹. Obwohl hier das Vektor-Potenzial ein *Gradientenfeld* ist, haben wir $\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \neq 0$! Das liegt daran, dass der Integrationsweg in einem topologisch *zweifach* zusammenhängenden Raum liegt: er lässt sich nicht auf einen Punkt zusammenziehen, da er um die Spule herumführt.

Nach den Ausführungen der §§ 4.5.3 f. ist der Aharonov-Bohm-Effekt ein durch die Eichsymmetrie der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung bedingter geometrischer Phaseneffekt.

Aufgabe: Zeigen Sie, dass $\int_{1-2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \Phi_B$ ist! Hinweis: Skizzieren Sie die Versuchsanordnung!

8.8.4 Zweite Quantisierung

Wir führen die 2. Quantisierung und den Übergang zur Besetzungszahl-Darstellung wie oben beschrieben durch und erhalten

- für das Elektron ohne elektromagnetisches Feld (μ, ν – geeignete Quantenzahlen):

$$\hat{H}_{\text{el}} = \sum_{\mu\nu} \langle \psi_\mu | H_{\text{el}} | \psi_\nu \rangle a_\mu^+ a_\nu \quad (8.175)$$

- für das freie elektromagnetische Feld (\mathbf{w} – Photonen-Wellenzahlvektor, $j = x, y, z$ – Polarisationsmoden-Index):

$$\hat{H}_{\text{phot}} = \sum_{j\mathbf{w}} \hbar \omega_{j\mathbf{w}} \left(b_{j\mathbf{w}}^+ b_{j\mathbf{w}} + \frac{1}{2} \right) \quad (8.176)$$

⁷⁹ Yakir Aharonov (*1932) & David Josef Bohm (1917-1992), *Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory*, 1959; *Further considerations of electromagnetic potential in the quantum theory*, 1961; Schwabl, *QM II*, 1997, §7.5.

- für das Vektorpotenzial (V – Periodizitäts-, hier das Kristallvolumen):

$$\hat{\mathbf{A}}_j = \sum_{\mathbf{w}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V \omega_{\mathbf{w}}}} [e_{j\mathbf{w}} b_{j\mathbf{w}} e^{i\mathbf{w} \cdot \mathbf{r}} + \bar{e}_{j\mathbf{w}} b_{j\mathbf{w}}^+ e^{-i\mathbf{w} \cdot \mathbf{r}}]; \quad j = x, y, z \quad (8.177)$$

Damit ergibt sich für den Hamiltonian der Wechselwirkung (WW)

$$\hat{H}_{\text{WW}} = \sum_{\mu\nu j\mathbf{w}} a_{\mu}^+ a_{\nu} (g_{\mu\nu j\mathbf{w}} b_{j\mathbf{w}} + g_{\mu\nu j\mathbf{w}}^* b_{j\mathbf{w}}^+) \quad (8.178)$$

mit den *Kopplungskonstanten*

$$g_{\mu\nu j\mathbf{w}} = \frac{-e}{2m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V \omega_{j\mathbf{w}}}} \langle \psi_{\mu} | e^{i\mathbf{w} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{e}_{j\mathbf{w}} \cdot \hat{\mathbf{P}} + \hat{\mathbf{P}} \cdot e^{i\mathbf{w} \cdot \mathbf{r}} \mathbf{e}_{j\mathbf{w}} | \psi_{\nu} \rangle \quad (8.179)$$

Entsprechend der minimalen Kopplung (8.164) ist er *trilinear* in den Elektron- und Feldoperatoren. Eine allgemeine Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}_{\text{tot}} |\{n_{\mu}\}; \{n_{wj}\}\rangle = E_{\mu;wj} |\{n_{\mu}\}; \{n_{wj}\}\rangle \quad (8.180)$$

ist nicht bekannt. Es wurden deshalb viele mehr oder weniger anwendungsspezifische Näherungsverfahren entwickelt⁸⁰. Im Rahmen dieser Darstellung wollen wir uns auf ein Beispiel beschränken, das sich konsequent durchrechnen – die Unterschiede zur halbklassischen Theorie aber klar hervortreten lässt.

Aufgabe: Zeigen Sie, dass in den Kopplungskonstanten (8.179) die Impulserhaltung steckt! Hinweis: Betrachten Sie die Summen der Impulse für jeden Summanden im Hamiltonian (8.178) einzeln!

8.8.5 Gekoppelte verschiedenartige quantenmechanische Pendel: Das excitonische Polariton

Wir wenden nun den soeben erstellten Formalismus auf die Wechselwirkung der Elektronen in einem Molekulkristall mit einem elektromagnetischen Feld an (das sie zum Teil mit erzeugen). Im Unterschied zu den gekoppelten Schwingungen der Gitterbausteine im § 6.3.1 betrachten wir jetzt die Kopplung *verschiedenartiger* Systeme. Infolge dessen treten qualitativ neue Erscheinungen im Energiespektrum, d. h. in der Dispersionsrelation des hierbei entstehenden Quasiteilchens excitonisches Polariton auf.

Um die Behandlung auf das hierfür Wesentliche zu reduzieren, nehmen wir folgendes an⁸¹:

⁸⁰ Siehe z. B. Heitler, *The Quantum Theory of Radiation*, 1954; Messiah, *Quantum Mechanics*, 1958; Cohen-Tannoudji, Dupont-Roc & Grynberg, *Atom-Photon Interactions*, 1992; Schleich, *Quantum Optics in Phase Space*, 2000.

⁸¹ Haken, *Quantenfeldtheorie des Festkörpers*, 1973, §45; siehe auch Pekar, *Theory of Electromagnetic Waves in a Crystal with Excitons*, 1958; Ders., *Dispersion of Light in the Exciton Absorption Region in Crystals*, 1958.

- Die Elektron-Elektron-WW führt zur Herausbildung von Frenkel-Excitonen (siehe § 8.5.5):

$$\hat{H}_{\text{El}} = \sum_{\mathbf{w}} E_{\mathbf{w}} B_{\mathbf{w}}^+ B_{\mathbf{w}} \quad (8.181)$$

- Die Excitonen-Dichte ist so gering, dass die Operatoren $B_{\mathbf{w}}^+$ und $B_{\mathbf{w}}$ praktisch bosonisch sind und wir die Excitonen als Quasi-Oszillatoren betrachten dürfen;
- Das elektromagnetische Feld ist transversal und linear polarisiert ($j = 1$; zudem lassen wir den Vakuum-Beitrag fort, da er in die weiteren Rechnungen nicht eingeht):

$$\hat{H}_{\text{Feld}} = \sum_{\mathbf{w}} \hbar \omega_{\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}^+ b_{\mathbf{w}} \quad (8.182)$$

- Die Kopplungskonstanten (8.179) sind in guter Näherung „excitonisch“, so dass

$$\hat{H}_{\text{WW}} = \sum_{\mathbf{w}} g_{\mathbf{w}} (B_{\mathbf{w}}^+ b_{\mathbf{w}} + B_{\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}^+) \quad (8.183)$$

wird.

Der Gesamt-Hamiltonian vereinfacht sich dank dieser Näherungen zu

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \sum_{\mathbf{w}} (E_{\mathbf{w}} B_{\mathbf{w}}^+ B_{\mathbf{w}} + \hbar \omega_{\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}^+ b_{\mathbf{w}} + g_{\mathbf{w}} B_{\mathbf{w}}^+ b_{\mathbf{w}} + g_{\mathbf{w}} B_{\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}^+) \quad (8.184)$$

Er ist *diagonal* in der verbliebenen Schwingungsquantenzahl \mathbf{w} (Photonen-Wellenvektor) und *bilinear* in den Photon- und Excitonen-Operatoren. Das erlaubt die (angestrebte) exakte Lösung der Schrödinger-Gleichung (8.180) mittels *algebraischer* Diagonalisierung in *endlich* vielen (hier: zwei) Dimensionen, wie wir im folgenden zeigen werden.

Analog zu den Transformationen (6.63) führen wir mittels der kanonischen Transformation

$$B_{\mathbf{w}} = u_{11\mathbf{w}} P_{1\mathbf{w}} + u_{12\mathbf{w}} P_{2\mathbf{w}}; \quad b_{\mathbf{w}} = u_{21\mathbf{w}} P_{1\mathbf{w}} + u_{22\mathbf{w}} P_{2\mathbf{w}} \quad (8.185)$$

neue Operatoren $P_{1,2\mathbf{w}}$ ein, die ihrerseits gemischte, das heißt excitonische und photonische Zustände repräsentieren:

$$P_{1\mathbf{w}} = \frac{u_{22\mathbf{w}} B_{\mathbf{w}} - u_{12\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}}}{u_{11\mathbf{w}} u_{22\mathbf{w}} - u_{12\mathbf{w}} u_{21\mathbf{w}}}; \quad P_{2\mathbf{w}} = \frac{u_{11\mathbf{w}} b_{\mathbf{w}} - u_{21\mathbf{w}} B_{\mathbf{w}}}{u_{11\mathbf{w}} u_{22\mathbf{w}} - u_{12\mathbf{w}} u_{21\mathbf{w}}} \quad (8.186)$$

Die Koeffizienten $u_{\mathbf{w}}$ werden hierbei derart bestimmt, dass die neuen Operatoren $P_{1,2\mathbf{w}}$ wieder bosonischen Vertauschungsrelationen genügen und der transformierte Hamiltonian diagonal in den neuen Operatoren ist:

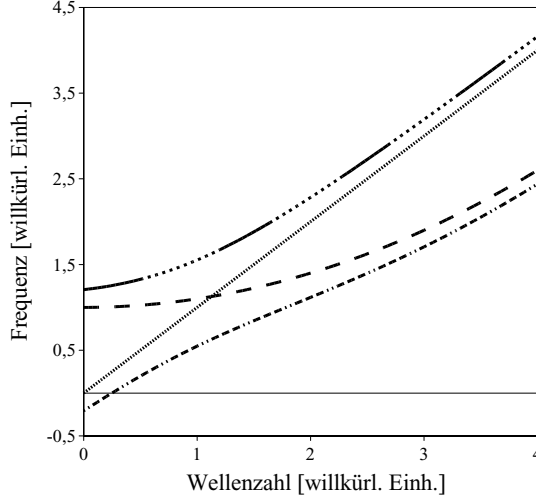


Abb. 8.5. Dispersionskurven der beiden Polaritonmoden (8.188); \cdots : ungestörte Exzitonenergie $E_{\text{exc}}(w)$; $-$: ungestörte Photonenenergie $\hbar\omega = \hbar cw$; $-\cdot-\cdot-$ ($-..-..$): größere (kleinere) Polaritonfrequenz $\hbar\Omega_{1,2}(w)$

$$\hat{H}_{\text{tot}} = \sum_{\mathbf{w}} (\hbar\Omega_{1\mathbf{w}} P_{1\mathbf{w}}^+ P_{1\mathbf{w}} + \hbar\Omega_{2\mathbf{w}} P_{2\mathbf{w}}^+ P_{2\mathbf{w}}) \quad (8.187)$$

Dadurch werden die Operatoren $P_{1,2\mathbf{w}}$ zu neuen quantenmechanischen Normal„koordinaten“, die zu neuen Elementaranregungen, den excitonischen Polaritonen gehören.

Diese neuen Elementaranregungen besitzen die Energien

$$\hbar\Omega_{1,2\mathbf{w}} = \frac{1}{2} \left(E_{\mathbf{w}} + \hbar\omega_{\mathbf{w}} \pm \sqrt{(E_{\mathbf{w}} - \hbar\omega_{\mathbf{w}})^2 + 4g_{\mathbf{w}}^2} \right) \quad (8.188)$$

Ganz charakteristisch ist hier das Auseinanderrücken (*avoided crossing* oder *anti-crossing*) der Energieniveaus $E_{\mathbf{w}}$ und $\hbar\omega_{\mathbf{w}}$, siehe Abb. 8.5.

Da die excitonische Ausbreitungsgeschwindigkeit $|\partial E_{\mathbf{w}}/\partial \hbar\mathbf{w}|$ viel kleiner als die Lichtgeschwindigkeit c ist, schneiden sich die freien, ungekoppelten Photon- und Exziton-Dispersionskurven. Durch die Wechselwirkung wird diese Überschneidung aufgehoben. Entlang der neuen Dispersionskurven tauschen die Elementaranregungen ihre Eigenschaften aus: Das Polariton mit der Dispersionskurve $\Omega_1(\mathbf{w})$ ist Photon-ähnlich für kleine Wellenzahlen und Exziton-ähnlich für große Wellenzahlen, während, umgekehrt, das Polariton mit der Frequenz $\Omega_2(\mathbf{w})$ Exziton-ähnlich für kleine und Photon-ähnlich für große Wellenzahlen ist.

Aufgabe: Erweitern Sie die Hamiltonians (8.175) und (8.178) auf den Fall N miteinander wechselwirkender Elektronen!

9. Ausblicke

9.1 Zusammenfassung unserer Begründung der Wellenmechanik aus der Klassischen Mechanik und ergänzende Bemerkungen

9.1.1 Gegenstandsbestimmung – Lösung der Schrödingerschen Probleme

Wir haben aus der Eulerschen Formulierung der Klassischen Mechanik die Quantenmechanik in Form der Schrödingerschen Wellenmechanik hergeleitet, und zwar als Mechanik für diejenigen Systeme, die in stationären Zuständen *auch* Konfigurationen x annehmen *können*, für die die potentielle Energie *größer* als die Gesamtenergie ist: $V(x) > E$. Diese *axiomatisch-deduktive* Ableitung der Wellenmechanik enthält *keinerlei* Zusatzannahmen; sie entsteht allein aus der Frage, auf welche Art und Weise die der Klassischen Mechanik *inhärente* Beschränkung $V(x) \leq E$ aufgehoben werden könne und wie diese klassisch *nicht* möglichen Zustände im Sinne von Euler zu beschreiben seien. Daraus folgt zugleich die Gegenstandsbestimmung der Quantenmechanik als Theorie derjenigen konservativen Systeme, für die die Menge der möglichen (Impuls-)Konfigurationen gleich der Lagrange-Menge ist:

$$C_{\text{möglich}} = C_{\text{möglich}}^{\text{Lagrange}}, \quad P_{\text{möglich}} = P_{\text{möglich}}^{\text{Lagrange}}$$

Hierbei ist die Quantisierung an die Existenz einer zeitunabhängigen Hamilton-Funktion gebunden – dieser Umstand mag die Probleme bei der Quantisierung gedämpfter Systeme erklären.

Auf diesem Wege werden vier von Schrödinger bereits *bei* seiner Ableitung der Wellenmechanik erkannte grundlegende methodische Probleme der Quantisierung behoben:

1. Die Quantengleichung sollte die Quantenbedingungen *in sich selbst* tragen (*Zweite Mitteilung*, S.511);
2. Es sollte spezielle mathematische Lösungsmethoden für Differentialgleichungen vom Typ der stationären Schrödinger-Gleichung geben, die dem *nicht*-klassischen Charakter des Quantisierungsproblems Rechnung tragen (*Ebda.*, S.513);

3. Die Ableitung sollte eindeutig ergeben, dass die Energie- und nicht die Frequenzwerte diskretisiert werden (*Ebda.*, SS.511, 519);
4. Die Verwendung der klassischen Ausdrücke für die potenzielle und für die kinetische Energie sollte gerechtfertigt werden (*Vierte Mitteilung*, S.113).

Der Erfolg dieses Zuganges ist hauptsächlich der Tatsache zu verdanken, dass die Eulersche Darstellung der Klassischen Mechanik die nötigen Voraussetzungen für deren Verallgemeinerungen besitzt; wir erwähnen hier nur die präzise Fassung und zentrale Stellung des Zustandsbegriffes sowie die Beschränkung der Axiome auf Aussagen zur *Zustandserhaltung*. Insofern ist die Quantenmechanik eine natürliche Verallgemeinerung nicht der Newtonschen, sondern der Eulerschen Darstellung der Klassischen Mechanik ist; sie ist eine „Umdeutung“ (Heisenberg, 1925) jener.¹

Diese Aussage widerspricht durchaus nicht der Ansicht, dass die Hamilton-Jacobi-Theorie die formale Vollendung der Klassischen Mechanik darstellt, im Gegenteil: ist es doch in der Evolution gewöhnlich so, dass neue Arten nicht aus den jeweils höchstentwickelten Formen der alten Arten entstehen, sondern aus geringer ausdifferenzierten Formen.

Ein weiterer Vorteil der Konzentration auf den Zustandsbegriff besteht darin, dass man das Problem der Ununterscheidbarkeit von Körpern (Teilchen) bereits *klassisch* diskutieren kann.

Paradoxerweise führt die ursprüngliche Erweiterung der Bewegungsmöglichkeiten in der Konsequenz auch zur Einschränkung von Bewegungsmöglichkeiten: die Menge der stationären Zustände des klassischen Oszillators ist überabzählbar unendlich und damit mächtiger als die des quantenmechanischen Oszillators, die nur abzählbar unendlich ist. Dieses Paradoxon wird in der Quantenfeldtheorie aufgehoben.

9.1.2 Undurchdringlichkeit – Tunneleffekt

Die Wellenmechanik war von de Broglie (1924) initiiert worden, um die klassischen Welle- und Teilchen-Bilder zu vereinen. Demgegenüber wird die Schrödinger-Theorie mitunter als eine reine Wellentheorie angesehen, im Rahmen derer der Teilchen-Charakter der quantenmechanischen Objekte verlorengegangen ist. Diese Interpretation scheint eine bestimmte Lokalisierung von Teilchen im Sinne der klassisch-mechanischen Raumeinnahme von Körpern kraft ihrer Undurchdringlichkeit zu unterstellen. Die Aufhebung der Undurchdringlichkeit führt jedoch nicht zu einer absoluten, undifferenzierten, qualitätslosen Durchdringbarkeit, sondern zu einer relativen, quantitativ differenzierten gleichzeitigen Einnahme derselben Raumteile durch mehr als ein

¹ Die Schwierigkeit, wenn nicht Unmöglichkeit, die Newtonsche Axiomatik systematisch zu verallgemeinern liegt, wie gesagt, daran, dass neben der Erhaltung der Zustände auch die Art und Weise der Zustandsveränderung *axiomatisch* festgelegt wird. Verallgemeinerungen sind deshalb nur bei Änderungen des Newtonschen Axiomensystems selbst möglich, was generell sehr schwierig ist, vor allem auch konzeptionell und methodisch.

Quantenteilchen. Gegen die Auffassung der Schrödinger-Gleichung als klassische Wellengleichung spricht allerdings, dass die Wellenfunktion nicht klassisch interpretierbar ist.

Hiermit hängt der Tunneleffekt zusammen. Diesen darf man sich erst recht nicht als bloßes Eindringen eines Quantenteilchens in eine „klassische Barriere“ vorstellen. Eine unüberwindliche Barriere ($V_{\text{kl}}(x) > E$) existiert nur für klassische, nicht aber für nichtklassische Systeme. Denn für die klassisch unmöglichen Konfigurationen ist zwar die klassische Lageenergie größer als die Gesamtenergie:

$$V_{\text{kl}}(x) > E \quad \text{für alle } x \in C_{\text{unmöglich}}^{\text{Leibniz}}$$

nicht aber die nichtklassische Lageenergie (4.21):

$$V_{\text{nkl}}(x) < E \quad \text{für alle } x \in C_{\text{möglich}}^{\text{Lagrange}}$$

Die Ausdehnung der Wellenfunktion in klassisch *nicht* mögliche Raumgebiete zeugt allerdings vom *nichtlokalen* Charakter der Ausbreitung von Quantenteilchen.

Der Übergang von der Quantenmechanik zur Klassischen Mechanik ist im allgemeinen Fall nur durch die Wiedereinführung der Undurchdringlichkeit befriedigend durchführbar.

*Aufgabe**: Zeigen Sie die Gültigkeit der Ungleichung $V_{\text{nkl}}(x) < E$ für den eindimensionalen Potenzialtopf der Breite $2a$ und der Tiefe V_0 ! Hinweise: Lösen Sie die Schrödinger-Gleichung für $u(\xi) = \psi(x(\xi) = a\xi)$ (vgl. § 4.3.1); normieren Sie $u(\xi)$ auf $\int_{-\infty}^{+\infty} u(\xi)^2 d\xi = 1$; zeigen Sie, dass $u(\pm 1)^2 < E/V_0$ gilt, d. h. $[\cos(q)^2 + \sin(2q)/2q] > 0$ für die geraden und $[\sin(q)^2 - \sin(2q)/2q] > 0$ für die ungeraden Lösungen, $q \equiv \sqrt{2ma^2E/\hbar^2}$ (Schwabl, QM I, § 3.4)!

9.1.3 Zustand *versus* Bewegung

Viele Übergänge von der Klassischen zur Quantenmechanik beginnen mit der Annahme, dass die klassischen Begriffe nicht mehr gültig seien, wobei vor allem der Begriff der Bahn in Frage gestellt wird.² Dadurch entsteht der Eindruck, dass der grundlegende Begriff der Klassischen Mechanik der der Bahn sei und keine fundamentalen Begriffe, wie der des Zustandes, existierten.³ Andere starten von einer Bewegungsgleichung, die jedoch keine Erhaltungsgrößen enthält, und gelangen nach mehr oder weniger formalen Umformungen zu einer Theorie, in der die Zustandserhaltung eine zentrale Rolle

² Dabei bleibt offen, weshalb die klassischen Funktionen der kinetischen und potenziellen Energie, $V(x)$ und $T(v)$, weiter verwendet werden dürfen

³ Oft wird argumentiert, dass die Heisenbergsche Unschärferelation es unmöglich mache, beim Stoß zweier Teilchen deren Bahnen zu verfolgen. Die Heisenbergsche Unschärferelation ist aber keine Voraussetzung, sondern eine Konsequenz der Schrödinger-Gleichung, so dass der klassische Bahnbegriff *vorher* aufgegeben werden muss.

spielt. Da diese naturgemäß nicht aus den Umformungen erwächst, muss sie zusätzlich postuliert werden, so dass diese zentrale Rolle sozusagen aus dem Nichts zu entstehen scheint. In der Folge enthalten derartige Übergänge letztlich unbefriedigende Sprünge bzw. *Ad-hoc*-Annahmen.

In dem hier vorgestellten Zugang werden derartige Sprünge vermieden, mithin der Übergang von der Klassischen zur Quantenmechanik auf ganz „natürliche“ Weise, mithin *deduktiv* durchgeführt. Er kann nicht zuletzt deshalb als Fortsetzung des Schrödingerschen Programms verstanden werden.

9.1.4 Innere und äußere Parameter

Beim Übergang von der Klassischen zur Quantenmechanik wandelt sich die Energie von einer externen zu einer internen Zustandsgröße: durch die Einnahme des gesamten Konfigurationsraumes gibt es nämlich gar keine externen Zustandsgrößen mehr. Deshalb geschieht die Anregung eines Quantensystems durch äußere Ursachen parametrisch.⁴

Verallgemeinert heißt dies: Wenn es nur noch innere Zustände gibt, dann gibt es ausschließlich parametrische Anregung. Folglich

- ist die Bewegungsgleichung homogen in der Wellenfunktion ψ ;
- bleibt die Amplitude der Wellenfunktion ψ in der Bewegungsgleichung *prinzipiell* unbestimmt.

Regel: *Das Verhältnis von inneren und äußeren Zuständen und Parametern erweist sich als ein Schlüssel zur Unterscheidung von Klassischer Mechanik und Quantenmechanik sowie zum Verständnis der Quantenmechanik überhaupt.⁵ Die Quantenmechanik ist nichtklassische Punktmechanik, nicht nichtklassische Kontinuummmechanik.*

Im Unterschied zu den klassischen Wellengleichungen rührt die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung nicht von partiellen Differentialgleichungen von 1. Ordnung in der Zeit her.⁶

⁴ Schrödinger hebt vor allem diesen „*Mangel an Analogie*“ (*Vierte Mitteilung*, S.115) zwischen der klassischen externen und der wellenmechanischen parametrischen Anregung hervor, um die Besonderheit der quantenmechanischen Zeitabhängigkeit zu betonen. Zur Ausnahme verschobener Quantenoszillator siehe § 6.2.4.

⁵ Dieses Verhältnis könnte auch für andere Disziplinen hilfreich sein. So betont Sommerfeld (*Elektrodynamik*, 2001, S.290), dass es die *inneren* Eigenschaften einer Fläche waren, die Gauß (1827) zum Linienelement und zum invarianten Krümmungsmaß führten, auf denen Riemann (1854) und schließlich Einstein (1977) aufbauten.

⁶ In der Transporttheorie sind dies die „Materialgleichung“, die die Kräfte mit den Flüssen verbindet, und die Kontinuitätsgleichung als Erhaltungssatz für die transportierte „Substanz“; in der Elektrodynamik die Beziehungen zwischen den elektrischen und magnetischen Feldern.

Die Homogenität der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung ermöglicht das *Superpositionsprinzip*, das bei der Anwendung des Formalismus eine große Rolle spielt und deshalb von einigen Autoren sogar an die Spitze eines axiomatischen Aufbaus der Quantenmechanik gestellt wird. Im Rahmen unseres Zuganges ist es ein abgeleitetes Merkmal der Theorie.

9.1.5 Symmetrie

Die neue Bedeutung des Betrages der Wellenfunktion, $|\psi_E(x)|$, eröffnet infolge seines Bezugs zur Begrenzungsfunktion $F_E(x/x_0)$ einen natürlichen Zugang zur Eichinvarianz und zur geometrischen Phase nebst eines Kriteriums, wann eine Phase dynamisch und wann geometrisch ist.

Beim Vektor-Potenzial $\mathbf{A} = \nabla \times \mathbf{Z} + \nabla\varphi$ kann der Gradientenanteil $\nabla\varphi$ in eine geometrische Phase ohne Einfluss auf das Energiespektrum wegtransformiert werden. Das Energiespektrum hängt nur vom Wirbelanteil $\nabla \times \mathbf{Z}$, mithin von der magnetischen Feldstärke \mathbf{B} ab. Genauer, da sich der Wirbelanteil nicht umeichen lässt, müssen sogar das Energiespektrum (dies im Unterschied zur Klassischen Mechanik) und der Bezugsparameter x_0 (Zyklotronradius) von \mathbf{B} abhängen.

Wir vermuten, dass hier noch weiter gehende Schlussfolgerungen möglich sind.

9.1.6 Kausalität und Determinismus

Die Schrödinger-Gleichung ist ebenso *kausal* und *deterministisch* wie die Newtonsche Bewegungsgleichung; eine relativistische Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung wäre sonst unmöglich. Die Unterschiede zwischen den Theorien folgen allein aus den Eigenschaften der Körper (Teilchen) und den Zustandsbeschreibungen. Bei gegebenen inneren und äußeren Potenzialen lässt sich die Wellenfunktion für alle Zeiten aus ihrem Anfangswert berechnen.⁷

Klassische Bahnen lassen sich aus ihr allerdings nicht eindeutig und nicht kausal bestimmen, und daraus ist oft der Schluss gezogen worden, dass die Quantenmechanik insgesamt nicht deterministisch und nicht kausal sei. Wenn jedoch die Begriffe Kausalität und Determinismus von ihrer Bindung an *klassische* Zustandsänderungen gelöst werden, behalten sie ihre Bedeutung für die Quantenmechanik bei: Auch die Quantenmechanik ist eine exakte Naturwissenschaft, da jeder mit der nötigen Ausstattung Ausgerüstete ihre Gesetze nachprüfen kann. Da dies unzählige Male mit den gleichen Ergebnissen geschehen ist, besteht kein Zweifel daran, dass diese Gesetze unabhängig davon gelten, ob man sie und wer sie überprüft.⁸

⁷ Vgl. Born, *Quantenmechanik der Stoßvorgänge*, 1926, Einleitung.

⁸ Wie alle übrigen Naturgesetze gehören sie zur Aussagenlogik, und ihre Gültigkeit ist unabhängig davon, ob sie bekannt sind, beobachtet und korrekt formuliert werden, oder nicht.

Mit anderen Worten, die Begriffe Indeterminismus und Akausalität beziehen sich nur auf die unzulässige Verwendung klassisch-mechanischer Begriffe im Rahmen der Quantenmechanik, nicht aber auf die Bewegung der Quantenobjekte selbst. Tatsächlich treten „Unbestimmtheiten“ nicht hinsichtlich der (quantenmechanischen) Zustände quantenmechanischer Objekte auf, sondern hinsichtlich gewisser Beobachtungen.⁹

Die Heisenbergsche Unbestimmtheits-Relation erlaubt somit die Unterscheidung zwischen Erhaltungsgrößen und Nicht-Erhaltungsgrößen. In der Klassischen Mechanik sind nur der Impuls oder die Geschwindigkeit, nicht aber der Ort Erhaltungsgrößen und damit Zustandsgrößen im Sinne des 1. Newtonschen Axioms. Der Ort q muss deshalb durch Erhaltungsgrößen wie die Energie E oder der Impuls p bestimmt werden. Wenn sich der Ort zeitlich ungleichmäßig ändern soll, können nicht E und p zugleich Erhaltungsgrößen sein. Zum Beispiel kann sich q beim harmonischen Oszillator im Zustand E wegen $q^2 = E - p^2$ (in dimensionslosen Variablen) nur ändern, wenn auch p sich ändert, mithin keine Erhaltungsgröße ist. Beim freien Teilchen wird wegen $E = p^2$ der Ort durch die Energie überhaupt nicht bestimmt.

Diese Aussagen sind allerdings von der Feststellung zu unterscheiden, dass zu jeder Zeit die Größen p und q kraft der Relation $q^2 = E - p^2$ einen bestimmten Wert haben können. Diese bestimmten Werte ergeben sich aber nur deshalb, weil p und q als Funktionen einer *weiteren*, *Nicht-Zustands*(Erhaltungs)größe (nämlich der Zeit oder der Wegstrecke) parametrisiert werden können. Letztere ist ebenfalls von der Energie unabhängig. Mit anderen Worten, die Zeit kann *beliebige* Werte annehmen, weil E eine Erhaltungsgröße ist.

Diese Zusammenhänge gehen in der Quantenmechanik verloren. Die Beziehung zwischen den Konfigurationen und den Impuls-Konfigurationen eines Systems ist nicht punktweise vermittelt, sondern jeder einzelnen Konfiguration sind jeweils *alle* Impuls-Konfigurationen zugeordnet, und umgekehrt.

9.1.7 Verborgene Parameter

Aus unserem Zugang ergeben sich keinerlei Hinweise auf zusätzliche, „verborgene“ Parameter, da neue Größen nur dann eingeführt wurden, wenn dies unumgänglich war; diese sind sämtlich klar definiert bzw. eindeutig bestimmt. Es gibt ganz sicher keine zusätzlichen Parameter, die das energetische Spektrum beeinflussen: andernfalls wäre dieses nicht auf die bekannte Weise diskret.

Letztlich kann auch diese Frage nur mittels der Übereinstimmung der Theorie mit dem Experiment geklärt werden. Dazu ist anzumerken, dass in der Klassischen Mechanik die „theoretisch beliebig genaue“ gleichzeitige Messung von Ort und Impuls unter Zuhilfenahme von Mitteln und Methoden erfolgt,

⁹ Vgl. auch die geistreiche Beschreibung des Begriffswandels von der Unbestimmtheits-Beziehung zum Unbestimmtheits-Prinzip in Graßmann, *Das Top Quark, Picasso und Mercedes-Benz*, 1997, S.123ff.

die *außerhalb* ihrer selbst liegen. Dies ist in der Quantenphysik (bisher) nicht möglich. Vermutlich werden nur Messmethoden jenseits der heutigen Quantenphysik das Innere einer Phasenraumzelle beleuchten können.

9.2 Offene Fragen – Anregungen

Wenn die Leserin oder der Leser den Eindruck gewonnen hat, dass weder die Quantentheorie im allgemeinen, noch ihre Anwendung in der Festkörperphysik im speziellen weitgehend „abgegraste“ Felder sind, in denen keine gravierenden Probleme mehr offen und demzufolge spektakuläre Entdeckungen nicht mehr zu erwarten sind, dann haben wir eines unserer Ziele erreicht.¹⁰ Einige dieser offenen und zugleich mit den heutigen mathematisch-physikalischen Werkzeugen lösbar erscheinenden Fragen wollen wir zum Abschluss anführen.

9.2.1 Kraft und Bahn – Bohmsche Mechanik

Heisenberg (1925) und Schrödinger (1926) haben mit dem 2. Newtonschen Axiom nicht nur den Zusammenhang zwischen Kraft und Bahnbewegung aufgegeben, sondern auch die klassischen Kraft- und Bahnbegriffe selbst. Infolgedessen macht die Quantenmechanik über die *einzelnen* Konfigurationen x und die *einzelnen* Impuls-Konfigurationen p eines Systems keinerlei Aussagen. Die Experimente zeigen aber, dass ein Quantensystem/-teilchen sich nicht in allen Konfigurationen gleichzeitig aufhält. Hiermit hängt das berühmte Problem des Kollapses der Wellenfunktion zusammen (das aber jenseits der linearen Schrödinger-Gleichung und damit jenseits des Horizontes dieses Buches liegt).

Es ist andererseits sogar weit verbreitet, den Ausdruck $-\nabla V(x)$ weiterhin als Kraft anzusehen – ohne natürlich eine Beschleunigung $\frac{d^2}{dt^2}x(t)$ mit ihr zu verbinden. Auch die Teilchenbahnen in Nebelkammern erinnern an klassische Bahnen. Daher entsteht die Frage, ob diese Konzepte in irgend einer Form weiter bestehen?

Tatsächlich ist es für die Ableitung der nichtklassischen Darstellung (4.23) der Energie vor allem notwendig, die Verbindung zwischen Kraft und Bahn in Form des 2. Newtonschen Axioms aufzugeben, während die Konzepte Kraft und Bahn möglicherweise in modifizierter Form fortbestehen. Ohne diese Verbindung zwischen Kraft und Bahn kann man vielleicht die Menge aller Konfigurationen (C_{all}) als nichtklassische Bahnparameter behandeln.

Auch Born hat anfänglich die Existenz von Bahnen nicht ausgeschlossen:

„Ich möchte versuchen, hier eine ... Interpretation [der Wellenfunktion] zu geben. ... Dabei knüpfe ich an eine Bemerkung Einsteins

¹⁰ Auch die Grundgleichungen sind solange zu hinterfragen, wie nicht bekannt ist, *warum* sie funktionieren (Graßmann, *Das Top Quark, Picasso und Mercedes-Benz*, 1997, S.121) bzw. *warum* sie so sind wie sie sind (vgl. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields*, 2005, Bd.1, S. xx f.).

über das Verhältnis von Wellenfeld und Lichtquanten an; er sagte etwa, daß Wellen nur dazu da seien, um den korpuskularen Lichtquanten den Weg zu weisen, und er sprach in diesem Sinne von einem ‚Gespensterfeld‘. Dieses bestimmt die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Lichtquant ... einen bestimmten Weg einschlägt. ... Und hier [in der Quantenmechanik] liegt es nahe, die de-Broglie-Schrödingerschen Wellen $[\psi]$ als das ‚Gespensterfeld‘ oder besser ‚Führungsfeld‘ anzusehen. ... Im übrigen wird für das Einschlagen einer bestimmten Bahn nur eine Wahrscheinlichkeit durch die Werteverteilung der Funktion ψ bestimmt.“¹¹

Ein solches Programm wird in der Bohmschen Mechanik¹² detailliert ausgeführt. In ihr verändern sich die Teilchenorte gemäß der Vorschrift

$$\frac{d}{dt}x(t) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \{ \nabla \ln \psi(x(t), t) \} \quad (9.1)$$

Damit werden die klassischen Wellen- und Teilchenaspekte in expliziter Form (und nicht nur interpretatorisch) vereinigt. Allerdings liefert diese Gleichung in allen Situationen $\dot{x}(t) \equiv 0$, in denen die Wellenfunktion reellwertig gewählt werden kann. Dies ist in der Regel für Freiheitsgrade mit gebundener stationärer Bewegung der Fall, z. B. für lineare Oszillatoren.

Andererseits werden in der Wellenmechanik die Konfigurationen im Orts- und im Impulsraum symmetrischer behandelt. Von diesem Gesichtspunkt aus wäre anstelle des Postulates (9.1) das Gleichungspaar

$$p(x, t) = \operatorname{Im} \{ \hbar \nabla \ln \psi(x(t), t) \}; \quad x(p, t) = -\operatorname{Im} \{ \hbar \nabla_p \ln \phi(p, t) \} \quad (9.2)$$

zu betrachten. Allerdings liefert es für freie Teilchen (vergleiche § 4.3.6) und für stationäre Zustände unbefriedigende Ergebnisse.

¹¹ Born, *Zur Quantenmechanik der Stoßvorgänge*, 1926 (zit. nach Daumer, *Quantenmechanik und Determinismus*, 1997, S.173f.). – Diesen Gedankengang variiert Born in *Quantenmechanik der Stoßvorgänge*, 1926, wo er außerdem schreibt, „Die Bahnen dieser Korpuskeln sind nur so weit bestimmt, als Energie- und Impulssatz sie einschränken ...“ (Einleitung). – Die gleiche Situation liegt in der Klassischen Mechanik vor, wenn Ort und Impuls nicht punktweise einander zugeordnet werden.

¹² D. Bohm, *A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of ‘Hidden’ Variables*, 1952. – Siehe auch Bell, *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics*, 2004; Bräuer, *Die fundamentalen Phänomene der Quantenmechanik und ihre Bedeutung für unser Weltbild*, 2000, Kap.8; Dürr, *Bohmsche Mechanik als Grundlage der Quantenmechanik*, 2001; Goldstein, *Bohmian Mechanics*, 2002; Dürr, Goldstein, Tumulka & Zanghi, *Bohmian Mechanics and Quantum Field Theory*, 2004; Holland, *The Quantum Theory of Motion*, 1993. – Die Bezeichnung „verborgene Parameter“ erweckt den irritierenden Eindruck der Einführung zusätzlicher Parameter. Dabei geht es „nur“ um die Um- bzw. Rückinterpretation und -parametrisierung bereits vorhandener Größen: der Konfigurationen im Ortsraum (die Impulsdarstellung der Schrödinger-Gleichung wird außen vor gelassen).

Aufgabe: Vergleichen Sie die Varianten (9.1) und (9.2) anhand der Bahnen $(\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t))$ für ein freies Teilchen und für den dreidimensionalen harmonischen Oszillator! Hinweis: Für letzteren ist

$$\psi_E(\mathbf{x}) = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \tilde{\psi}_{nl}(r, \theta) e^{im\varphi} \quad (9.3)$$

mit $\tilde{\psi}_{nl}(r, \theta)$ reellwertig;

$$\nabla\psi = \frac{\partial\psi}{\partial r} \mathbf{e}_r + \frac{\partial\psi}{r\partial\theta} \mathbf{e}_\theta + \frac{\partial\psi}{r\sin\theta\partial\varphi} \mathbf{e}_\varphi \quad (9.4)$$

(Dürr, 2001, § 8.2); analog für $\phi_E(\mathbf{p})$.

Aufgabe:* Ist der Bohmsche Grundzustand ein Zustand der Ruhe? Hinweise: Im Grundzustand ist $\psi_E(x)$ reellwertig; berechnen Sie das sog. Quanten-Potenzial

$$V_{\text{qu}}(x) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\nabla^2 \psi_E(x)}{\psi_E(x)} \quad (9.5)$$

für den Grundzustand (4.67) des linearen harmonischen Oszillators und addieren Sie es zu $V(x) = \frac{1}{2}\kappa x^2$!

9.2.2 Zur Definition der Zeit

Die Zeit bleibt im Rahmen ihrer Einführung über ein externes klassisches Potenzial wie im § 4.4.3 ein klassischer Parameter. Konsequenter ist es deshalb, den dort erwähnten Grenzfall des unendlich großen externen Systems tatsächlich durchzuführen (Briggs & Rost, 2001). Die Zeit kommt dann über die klassische Definition $P = M \frac{d}{dt} X$ für den Impuls des externen Systems ins Spiel, für das der Übergang zum klassischen System auf wohldefinierte Weise durchgeführt wird.

Aufgabe: Leiten Sie das klassische externe Potenzial $V_{\text{ext}}(x, t)$ aus dem Potenzial $V(x, X)$ des Gesamtsystems ab! Hinweis: Überführen Sie die Hamilton-Funktion

$$H_{\text{tot}} = H_S + H_U + H_{\text{WW}} = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{\kappa}{2} x^2 + \frac{1}{2M} P^2 + \frac{K}{2} X^2 + \frac{\lambda}{2} (x - X)^2$$

mit $H_S = E_S \ll H_U = E_U$ in die Form

$$H'_{\text{tot}} = H'_S + H'_{\text{WW}} = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{\kappa + \lambda}{2} x^2 + \lambda x X(t)$$

9.2.3 Interner Parameter einer Welle und Feldquantisierung

In einer klassischen Welle ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit c ein *innerer* Parameter, während Frequenz f und Wellenlänge λ durch die äußere Anregung beziehungsweise durch die Randbedingungen aufgeprägt werden. Feste

Randbedingungen führen primär zu einer Diskretisierung der Wellenlänge und sekundär – kraft der Grundbeziehung $c = \lambda \cdot f$ – der Frequenz. Die Energie bleibt hierbei ein *äußerer* Parameter und damit kontinuierlich. In der Quantenmechanik betrifft dagegen die Diskretisierung die Energie als *inneren* Parameter, während die anderen Systemparameter – wie die Schwingungsfrequenz eines Oszillators – von der Diskretisierung unberührt bleiben. Angesichts dieser Unterschiede muss die Rolle der äußeren und inneren Parameter bei der Feld-Quantisierung noch genauer untersucht werden.

9.2.4 Zur Bedeutung der Potenziale

In vielen Arbeiten über das elektromagnetische Feld wird nicht auf die physikalische Bedeutung der Potenziale \mathbf{A} und φ in den Maxwellschen Arbeiten eingegangen (trotz des Schwarzschildschen Variationsprinzips¹³ und trotz des Aharonov-Bohm-Effektes). Wie verträgt sich Maxwells Ziel (1855/56), mittels des Vektorpotenzials \mathbf{A} Faradays elektrostatischen Zustand zu beschreiben, mit der Eichinvarianz in Maxwells (1864) ursprünglichen, nicht-vereinfachten System aus 20 Gleichungen? Denn eine Zustandsvariable verträgt solche Unbestimmtheit nicht. Eine genauere Bestimmung des physikalischen Gehaltes der elektromagnetischen Potenziale (siehe z. B. Konopinski, 1978) könnte vielleicht gewisse Willkürlichkeiten in der Quantisierung des elektromagnetischen Feldes ausschließen.

Diese Frage nach der Bestimmtheit physikalischer Größen erinnert an die häufig anzutreffende Aussage, in der Klassischen (nichtrelativistischen) Mechanik sei die Gesamtenergie nur bis auf eine additive Konstante festlegbar. Die Helmholtzsche Analyse der konservativen Systeme erlaubt es, diese Unbestimmtheit zu beseitigen, siehe § 3.3.3.

9.2.5 Quantisierung im Phasenraum der Potenziale

Der Bra-Ket-Formalismus für Photonen-Zustände verbirgt den Unterschied zwischen der klassischen Behandlung der räumlichen Ausdehnung und der „quantenmechanischen Umdeutung“ der Auslenkung der Normalmoden. Kann die genauere Berücksichtigung dieses Unterschiedes Fortschritte im Verständnis der quantenoptischen Erscheinungen bringen?

Überträgt man nämlich das Vorgehen für den harmonischen Oszillator unmittelbar auf die klassische Energiedichte $\frac{1}{2\epsilon_0} \mathbf{I}^2 + \frac{1}{2\mu_0} [(\nabla A_x)^2 + (\nabla A_y)^2 + (\nabla A_z)^2]$ ($\Phi \equiv 0$), so ergibt sich für die nichtklassische Energiedichte der *hypothetische* Ausdruck

¹³ Karl Schwarzschild (1873-1916), *Zur Elektrodynamik. 1.-3.*, 1903 (nach Sommerfeld, *Elektrodynamik*, S.254).

$$\frac{\int \left[(\nabla A_x)^2 + (\nabla A_y)^2 + (\nabla A_z)^2 \right] |\psi(\mathbf{A}; \mathbf{r}, t)|^2 d^3 \mathbf{A}}{2\mu_0 \int |\psi(\mathbf{A}; \mathbf{r}, t)|^2 d^3 \mathbf{A}} + \frac{\int \mathbf{\Pi}^2 |\phi(\mathbf{\Pi}; \mathbf{r}, t)|^2 d^3 \mathbf{\Pi}}{2\varepsilon_0 \int |\phi(\mathbf{\Pi}; \mathbf{r}, t)|^2 d^3 \mathbf{\Pi}} \quad (9.6)$$

Die Quantisierung fände hier im Phasenraum des Vektorpotenzials \mathbf{A} und der zu ihm kanonisch konjugierten Impulsdichte $\mathbf{\Pi}$ statt.¹⁴

Das Ziel eines solchen Zuganges besteht darin, über die raum-zeitliche Ausdehnung des elektromagnetischen Feldes freier als bisher verfügen zu können, z.B. im Sinne der Einsteinschen (1905) Vorstellung einer *räumlich granularen* Struktur des elektromagnetischen Feldes. Dabei handelt es sich freilich nicht um eine Lokalisierung im klassischen Sinne, da dies die Beschreibung der Interferenz eines Photons mit sich selbst verhindern würde.¹⁵

9.2.6 Vielteilchen-Fragen

Der Erfolg des von Newton und Euler verwendeten Zustandsbegriffes bei der Ableitung der Ein- und der Viel-Teilchen-Schrödinger-Gleichung lässt hoffen, dass dieser Zustandsbegriff auch für die Statistische Mechanik fruchtbar gemacht werden kann (Enders, 2004). Die stationären Zustände sowohl von klassischen als auch von Quantensystemen aus gleichen Körpern/Teilchen sind offenbar invariant gegenüber der Vertauschung der Bezeichnungen der Körper¹⁶. Folglich erlaubt die Kenntnis allein der Erhaltungsgrößen (Gesamtenergie, -impuls u.s.w.) auch in klassischen Systemen nicht, die in ihnen enthalten Körper voneinander zu unterscheiden.¹⁷ Die Permutationssymmetrie der Begrenzungsfunktionen ist eine Folge dieser Permutationssymmetrie der Zustände. Für die Wellenfunktionen ergeben sich nicht nur symmetrische (Bosonen) und antisymmetrische (Fermionen), sondern auch weniger symmetrische Lösungen (Anyonen).

¹⁴ Ähnliches scheint Jordan & Pauli (*Zur Quantenelektrodynamik ladungsfreier Felder*, 1928, § II.1) vorgeschwebt zu haben, die auch bereits vermuteten, dass dieser Ansatz zu funktionalanalytischen Ausdrücken führt.

¹⁵ Nach Landau & Peierls (*Erweiterung des Unbestimmtheitsprinzips für die relativistische Quantentheorie*, 1931; zit. nach Kuhn & Strnad, 1995, S.150) gibt es keine Photonen-Wellenfunktion im Ortsraum. Man kann eine zeitabhängige Schrödinger-Gleichung im Impulsraum aufstellen, siehe Achieser & Berestezki, 1962, § 1 (ich danke Prof. H. Paul für den Hinweis auf diese Problematik und diese Referenz). Zur Problematik der Lokalisierung vgl. auch Mandel & Wolf, *Optical Coherence and Quantum Optics*, 1995, § 12.11.

¹⁶ Vgl. Bach, *Indistinguishable Classical Particles*, 1997, Kap.1. Hier wird nachgewiesen, dass man sorgfältigst zwischen der (Un)Unterscheidbarkeit von Körpern, Zuständen und Bezeichnungen zu differenzieren hat.

¹⁷ Von diesem Standpunkt aus ist auch ein klassisches System *holistisch* (ganzheitlich) – eine Eigenschaft, die gewöhnlich nur Quantensystemen zugeordnet wird, vgl. Görnitz, *Quanten sind anders*, 1999.

Tatsächlich entsteht in Einsteins (1907) Ableitung der Planck-Verteilung der Unterschied zwischen der klassischen und der nichtklassischen Verteilungsgesetze aus dem Unterschied zwischen den Energiespektren des klassischen (kontinuierlich) und des Quantenoszillators (diskret): die (Un)Unterscheidbarkeit spielt hier überhaupt keine Rolle.

Nichtsdestoweniger sind klassische Körper kraft des Euler-Verbots durch ihren Ort *prinzipiell* voneinander unterscheidbar – während gleiche Quantenteilchen innerhalb eines Systems *prinzipiell ununterscheidbar* sind, da ihnen überhaupt keine individuellen Eigenschaften zugewiesen werden können.¹⁸ In diesem Lichte scheint das Gibbssche Paradoxon¹⁹ zu bedeuten, dass für die statistischen Eigenschaften von Systemen nicht die (Un)Unterscheidbarkeit ihrer Teile, sondern die ihrer Zustände entscheidend ist (vgl. auch Glazer & Wark, 2001).

Es ist zumindest aus pädagogischen Gründen wünschenswert, den Zusammenhang zwischen Spin und Statistik auch auf elementarerer Stufe darzustellen als im Rahmen der relativistischen Quantenfeldtheorie (Pauli, 1940). Gibt es bestimmte „anschauliche“ Eigenschaften, die alle Bosonen beziehungsweise alle Fermionen (oder die von ihnen gebildeten Systeme) gemeinsam haben? Welche Beziehung haben diese Eigenschaften – so es sie gibt – zum Spin?

Zum Beispiel gilt für die Kommutatoren aus drei Operatoren die Jacobi-Identität – für Antikommutatoren nicht; für bosonische Felder gibt es klassische Grenzwerte für die Amplitude – für fermionische Felder nicht (Greiner, *Quantentheorie*, 1989, S.104). Im Unterschied zu den Elektronen im Atom besetzen die Schwingungsquanten im Oszillator keine Einteilchen-Zustände; ein Elektron in der Atomhülle besitzt keine Nullpunktsenergie wie ein Oszillator – letzterer keine angeregten Zustände, die vergleichbar mit denen eines Atoms sind ...

9.2.7 Schlussbemerkungen

Neben solchen mehr grundsätzlichen Problemen gibt es schließlich viele offene Fragen im Verständnis gewisser Details, die der Klärung harren.²⁰ Für die transienten optischen Eigenschaften von Halbleitern und ihre Anwendung in optoelektronischen Bauelementen besonders ausbaufähig erscheinen uns die Mehrband-Effekte und die Relaxationserscheinungen in dimensionsreduzierten Heterostrukturen. Die im Begriff des Pauling-Effektes (siehe § 8.6.4) kondensierten Erfahrungen sprechen dafür, dass ein harmonisches und proportionales Zusammenspiel von experimentellen, numerischen und grundlagenphysikalischen Aufwendungen letztlich die effektivsten Fortschritte hervorbringt.

¹⁸ Es sei angemerkt, dass auch das lateinische Wort *individuum* das Unteilbare bezeichnet.

¹⁹ Josiah Williard Gibbs (1839-1903), *Elementary Principles in Statistical Mechanics*, 1902; Schrödinger, *Statistische Thermodynamik*, 1952.

²⁰ Sie beruhen übrigens oft ebenfalls auf Lücken im Verständnis der Grundlagen.

Bibliographie

- M. Abramowitz & I. A. Stegun (Hrsg.), *Handbook of Mathematical Functions*, Washington: NBS 1964; gekürzter Nachdruck (Auswahl von M. Danos & J. Rafelski): *Pocketbook of Mathematical Functions*, Thun · Frankfurt/Main: Deutsch 1984
- A. I. Achieser & W. B. Berestezki, *Quantenelektrodynamik*, Leipzig: Teubner 1962
- Y. Aharonov & D. Bohm, *Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory*, Phys. Rev. 115 (1959) 485–491; Nachdruck in: Shapere & Wilczek, 1989, Arbeit [2.6]
- Y. Aharonov & D. Bohm, *Further considerations of electromagnetic potential in the quantum theory*, Phys. Rev. 123 (1961) 1511–1524
- D. Ahn, *Theory of Non-Markovian Optical Gain in Quantum-well Lasers*, Progr. Quantum Electron. 21 (1997) 249–287
- J. d'Alembert, *Traité de Dynamique*, 1743; dtsh.: *Abhandlung zur Dynamik* (Ostwalds Klassiker 106), Thun · Frankfurt/Main: Deutsch 1997
- J. Le Rond d'Alembert, *Reflexions sur la cause generale des vents*, Paris: David l'Aine 1747
- Zh. I. Alferov, *The Double Heterostructure: Concept and its Applications in Physics, Electronics and Technology* (Nobelpreis-Vortrag 2000); in: G. Ekspeng (Hrsg.), *Nobel Lectures in Physics 1996–2000*, 2002, S.413–438
- L. Allen & J. H. Eberly, *Optical Resonance and Two-Level Atoms*, New York: Wiley 1975; korr. Nachdruck: New York: Dover 1987
- S. L. Altmann, *Band Theory of Solids: An Introduction from the Point of View of Symmetry*, Oxford: Clarendon 1994
- P. W. Anderson, *Localized Orbitals for Molecular Quantum Theory: The Hückel Theory*, Phys. Rev. 181 (1969) 25ff.
- P. W. Anderson, *Local Moments and Localized States* (Nobelpreis-Vortrag 1977); in: S. Lundqvist (Hrsg.), *Nobel Lectures in Physics 1971–1980*, 1991, S.376–398
- J. Audretsch, *Verschränkte Welt*, Weinheim: Wiley-Vch 2002
- P. Auger, *Sur les rayons secondaire produits dans un gas par les rayons X*, Comptes rendus 180 (1925) 65–68
- P. Auger, *Sur l'effet photoélectrique composé*, J. Physique 6 (1925) 205–208
- P. Auger, *Sur le rendement de la fluorescence dans la domaine des rayons X*, Comptes rendus 182 (1926) 773–775
- A. Avogadro, *Essai d'une manière de déterminer les masses relatives des molécules élémentaires des corps, et les proportions selon lesquelles elles entrent dans les combinaisons*, J. phys. Delamétherie 73 (1811) juillet 58–76; dtsh. in: A. Avo-

- gadro & A. M. Ampère, *Die Grundlagen der Molekulartheorie* (Ostwalds Klassiker 8), Leipzig: Akad. Verlagsges. 1921
- A. Bach, *Indistinguishable Classical Particles* (Lecture Notes in Physics m44), Berlin u.s.w.: Springer 1997
- J. J. Balmer, *Notiz über die Spectrallinien des Wasserstoffs*, Verh. Naturf. Ges. Basel 7 (1885) 548–560; *Zweite Notiz über die Spectrallinien des Wasserstoffs*, Ebda. 750–752
- J. Bardeen, *Conductivity of Monovalent Metals*, Phys. Rev. 52 (1937) 688ff.
- J. Bardeen, L. N. Cooper & J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, Phys. Rev. 108 (1957) 1175ff.
- J. Bardeen & D. Pines, *Electron-phonon interaction in metals*, Phys. Rev. 99 (1955) 1140
- A. O. Barut, *Dynamical symmetry group based on Dirac equation and its generalization to elementary particles*, Phys. Rev. 135 (1964), 839ff.
- J. G. Bednorz & K. A. Müller, *Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-CuO system*, Z. Phys. 64B (1986) 189–193
- J. S. Bell, *Speakable and Unsayable in Quantum Mechanics*, Cambridge: Cambridge Univ. Press ²2004
- M. Le Bellac, *Quantum and Statistical Field Theory*, Oxford: Clarendon 1991
- Ch. H. Bennett, G. Brassard & A. K. Ekert, *Quanten-Kryptographie*, Spektrum d. Wiss. Digest-ND 3/2003, 90–98
- F. A. Berezin, *The Method of Second Quantization*, New York: Academic Press 1965
- L. Berg, *Lineare Gleichungssysteme mit Bandstruktur*, Berlin: Dtsch. Verlag Wiss. 1986
- D. Bernoulli, *Examen principorum mechanicae et demonstrationes geometricae de compositione et resolutione virium*, Comment. Acad. Petrop. (1726) Febr., 126–142
- D. Bernoulli, *Hydrodynamica, sive de viribus et motibus fluidorum commentarii*, Argentorati (Straßburg) 1738
- M. V. Berry, *Quantal phase factors accompanying adiabatic changes*, Proc. R. Soc. Lond. A 392 (1984) 45–57
- I. B. Bersuker (Hrsg.), *The Jahn-Teller-Effect. A Bibliographic Review*, New York etc.: Plenum 1984
- H. A. Bethe, *Termaufspaltung in Kristallen*, Ann. Phys. 3 (1929) 133ff.; Teil-Nachdruck in: A. P. Cracknell, *Angewandte Gruppentheorie*, S.283–326
- H. A. Bethe, *Zur Theorie der Metalle I: Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette*, Z. Phys. 71 (1931) 205–226; Nachdruck in: D. C. Mattis (Hrsg.), *The Many-Body Problem*, Singapore: World Scientific 1993 (in Engl.)
- D. Bimberg, M. Grundmann & N. N. Ledentsov, *Quantenpunkt-Laser*, Spektrum d. Wiss. Digest-ND 3/2003, 54–58
- G. L. Bir & G. E. Pikus, *Deformationseffekte in Halbleitern*, Moskau: „Nauka“ 1972 (in Russ.)
- F. Bloch, *Über die Quantenmechanik der Elektronen im Kristallgitter*, Z. Physik 52 (1928) 555–600

- F. Bloch, *Bemerkungen über die Elektronentheorie des Ferromagnetismus und der elektrischen Leitfähigkeit*, Z. Physik 57 (1929) 545–555
- F. Bloch, *The principle of nuclear induction* (Nobelpreis-Vortrag 1952); in: G. Ekspong (Hrsg.), *Nobel Lectures in Physics Vol 3 1942–1962*, 1998, S.203–216
- S. C. Bloch, *Introduction to Classical and Quantum Harmonic Oscillators*, New York: Wiley 1997
- D. I. Blochinzew, *Grundlagen der Quantenmechanik*, Frankfurt/M.: Deutsch ⁵1966
- A. N. Bogoljubow (Hrsg.), *Mechanik und Physik der zweiten Hälfte des 19. Jahrhunderts*, Moskau: „Nauka“ 1978 (in Russ.)
- N. N. Bogoljubow, *On the theory of superfluidity*, J. Phys. USSR XI (1947) 23–41; Nachdruck in: D. Pines (Hrsg.), *The Many-body Problem*, New York: Benjamin 1968
- N. N. Bogoljubow, *A new method in the theory of superconductivity. I, III*, Sov. Phys. JETP 7 (1958) 41ff; 51ff.
- N. N. Bogoljubow, *Quasimittelwerte in Problemen der statistischen Mechanik*, Preprint D-781, VIK Dubna, 1961 (in Russ.); dtsh.: Phys. Abh. SU 6 (1962) 1ff.
- A. Bohm, A. Mostafazadeh, H. Koizumi, Q. Niu & J. Zwanziger, *The Geometric Phase in Quantum Systems. Foundations, Mathematical Concepts, and Applications in Molecular and Condensed Matter Physics*, Berlin etc.: Springer 2003
- D. Bohm, *Quantum Theory*, Englewood Cliffs: Prentice-Hall 1951; Nachdruck: New York: Dover 1989
- D. J. Bohm, *A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of ‘Hidden’ Variables, I and II*, Phys. Rev. 85 (1952) 166–193
- N. Bohr, *On the Constitution of Atoms and Molecules*, Phil. Mag. 26 (1913) 1–25, dtsh. in: D. ter Haar, *Quantentheorie*, 1970, S.167–200
- N. Bohr, *Über die Quantentheorie der Linienspektren*, Braunschweig: Vieweg 1923
- N. Bohr, *Das Quantenpostulat und die neuere Entwicklung der Atomistik* (Vortrag auf dem Volta-Kongreß in Como, Sept. 1927), Naturwiss. 16 (1928) 245–257; in: Ders., *Atomtheorie und Naturbeschreibung*, 1931, S.34–59
- N. Bohr, *Atomtheorie und Naturbeschreibung*, Berlin: Springer 1931
- L. Boltzmann, *Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen*, Sitz.-Ber. Akad. Wiss. Wien (II) 66 (1872) 275–370; Nachdrucke in: *Wissenschaftliche Abhandlungen*, Bd. 1, 1909, S.237–58; S. G. Brush, *Kinetische Theorie II*, 1970, S. 115–225
- L. Boltzmann, *Wissenschaftliche Abhandlungen* (F. Hasenöhl, Hrsg.), Leipzig: Barth 1909 (3 Bde.); s. a. C. Weber, *Boltzmann’s Bibliography*, <http://faculty.washington.edu/vienna/boltzmann/boltzmannbib.htm> (18.02.2006)
- M. Bonitz, *Quantum Kinetic Theory*, Stuttgart · Leipzig: Teubner 1998
- F. Bopp, *Endliche Massenverhältnisse in nichtrenormierten Quantenfeldtheorien mit lokalen Wechselwirkungen*, in: *75 Jahre Plancksches Wirkungsquantum – 50 Jahre Quantenmechanik* (Hrsg. E. Schmutzer), Nova Acta Leopoldina 44 (1976) Suppl. 8, 203–209
- H.-H. von Borzeskowski & R. Wahsner, *Newton und Voltaire. Zur Begründung und Interpretation der klassischen Mechanik* (WTB 123), Berlin: Akademie-Verlag 1980

- M. Born, *Die Dynamik der Kristallgitter*, Leipzig: Teubner 1915
- M. Born, *Zur Quantenmechanik der Stoßvorgänge*, Z. Phys. 37 (1926) 863–867
- M. Born, *Quantenmechanik der Stoßvorgänge*, Z. Phys. 38 (1926) 803–827; Nachdruck in: G. Ludwig, *Wellenmechanik*, 1970, S. 237–259
- M. Born, *The statistical interpretation of quantum mechanics* (Nobelpreis-Vortrag 1954); in: G. Ekspong (Hrsg.), *Nobel Lectures in Physics Vol 3 1942–1962*, 1998, S.256–267
- M. Born, *Ausgewählte Abhandlungen*, Göttingen: Vandenhoeck & Ruprecht 1963 (2 Bde.)
- M. Born & M. Goeppert-Mayer, *Dynamische Gittertheorie der Kristalle*, in: H. Geiger & K. Scheel (Hrsg.), *Handbuch der Physik*, Bd.24, Berlin: Springer 1933, S.623–794
- M. Born & W. Heisenberg, *La mécanique des quanta*, in: *Électrons et Photons*, 5. Solvay-Kongress, Brüssel, 24.-29.10.1927, Institut International de Physique Solvay 1928, S.143–184
- M. Born, W. Heisenberg & P. Jordan, *Über Quantenmechanik II*, Z. Phys. 35 (1926) 557–615 („Drei-Männer-Arbeit“); Nachdruck in: B. L. van der Waerden, *Sources of Quantum Mechanics*, 1968, S.321–385 (in Engl.)
- M. Born & K. Huang, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Oxford: Oxford Univ. Press 1954
- M. Born & P. Jordan, *Zur Quantenmechanik*, Z. Phys. 34 (1925) 858–879; Nachdruck in: G. Ludwig, *Wellenmechanik*, 1970, S.210–237
- M. Born & Th. v. Kármán, *Über Schwingungen in Raumgittern*, Phys. Zs. 13 (1912) 297–309; Nachdruck in: M. Born, *Ausgewählte Abhandlungen 1*, 1963, S.244–248
- M. Born & J. R. Oppenheimer, *Zur Quantentheorie der Molekeln*, Ann. Phys. 84 (1927) 457–484
- S. N. Bose, *Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese*, Z. Phys. 26 (1924) 178–181
- L. P. Bouckaert, R. Smoluchowski & E. Wigner, *Theorie der Brillouin-Zonen und die Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktionen in Kristallen*, Phys. Rev. 50 (1937) 58–67; Nachdruck in: A. P. Cracknell, *Angewandte Gruppentheorie*, S. 346–371
- D. Bouwmeester, A. K. Ekert & A. Zeilinger (Hrsg.), *The Physics of Quantum Information. Quantum Cryptography, Quantum Teleportation, Quantum Computation*, Heidelberg u.s.w.: Springer 2000
- K. Bräuer, *Die fundamentalen Phänomene der Quantenmechanik und ihre Bedeutung für unser Weltbild. Physikalische Grundlagen der Phänomene und Gedanken berühmter Physiker, Biologen und Psychologen*, Berlin: Logos 2000
- W. Brauer, *Einführung in die Elektronentheorie der Metalle*, Leipzig: Geist & Portig²1972
- W. Brauer & H.-W. Streitwolf, *Theoretische Grundlagen der Halbleiterphysik* (WTB 119), Berlin: Akademie-Verlag 1973
- A. Bravais, *Abhandlung über die Systeme von regelmässig auf einer Ebene oder im Raum vertheilten Punkten*, 1848; Nachdruck: Leipzig: Teubner 1897 (Ostwalds Klassiker 90)

- R. Brenneke, *Die Verdienste Leonard Eulers um den Potenzialbegriff*, Z. Phys. 25 (1924) 1–6
- J. S. Briggs & J. M. Rost, *On the derivation of the time-dependent equation of Schrödinger*, Found. Physics 31 (2001) 693ff.
- L. Brillouin, *Die Quantenstatistik und ihre Anwendung auf die Elektronentheorie der Metalle*, Berlin: Springer 1931
- L. de Broglie, *Recherche sur la théorie des quanta*, Thésis, Paris 1924; Ann. Physique [10] III (1925) 22–128; dtsh. in: G. Ludwig, *Wellenmechanik*, 1970, S.85–108
- L. de Broglie, *The wave nature of the electron* (Nobelpreis-Vortrag 1929); in: G. Ekspong (Hrsg.), *Nobel Lectures in Physics Vol 2 1922–1941*, 1998, S.244–256
- L. de Broglie, *Certitude et incertitude de la science*, Paris: Gauthier-Villars 1966
- Louis de Broglie: Physicien et penseur*, Paris: Albin Michel 1953
- C. Bruder, R. Fazio & G. Schön, *The Bose-Hubbard model: from Josephson junction arrays to optical lattices*, Ann. Phys. (L.) 14 (2005) 566 – 577
- S. G. Brush, *Kinetische Theorie. Band I. Die Natur der Gase und der Wärme, Band II. Irreversible Prozesse*, Berlin: Akademie-Verlag / Oxford: Pergamon / Braunschweig: Vieweg 1970 (WTB 65, 67)
- D. Bruß, *Quanteninformaton* (Fischer Kompakt), Frankfurt am Main: Fischer 2003
- J. K. Burdett & St. Lee, *Peierls Distortions in Two and Three Dimensions and the Structure of AB Solids*, J. Am. Chem. Soc. 105 (1983) 1079–1083
- R. M. Cahn, *Historische und philosophic Aspekte des Periodensystems der chemischen Elemente*, Karlsruhe: HYLE Publ. 2002 (HYLE Studies in Hist. and Phil. of Chem. 1)
- J.-L. Calais, *Per-Olov Löwdin in Scientific Discussions*, in: *Quantum Science*, New York: Plenum 1976
- J.-L. Calais, *Is the Peierls Transition a Transition?*, Int. J. Quantum Chem. Symp. 11 (1977) 547–553
- P. Carruthers & M. M. Nieto, *Coherent States and the Forced Quantum Oscillator*, Am. J. Phys. 33 (1965) 537–544
- S. Chandrasekhar, *Newton's Principia for the Common Reader*, Oxford: Oxford Univ. Press 1995
- S. Chapman & T. G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases. An account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction, and diffusion in gases*, Cambridge: Cambridge Univ. Press 1939
- W. W. Chow, S. W. Koch & M. Sargent III, *Semiconductor-Laser Physics*, Berlin etc.: Springer 1994
- W. W. Chow, P. M. Smowton, P. Blood, A. Girndt, F. Jahnke & S. W. Koch, *Comparison of experimental and theoretical GaInP quantum well gain spectra*, Appl. Phys. Lett. 71 (1997) 157–159
- S. L. Chuang, *Physics of optoelectronic devices*, New York: Wiley 1995
- R. Clausius, *Über einen auf die Wärme anwendbaren mechanischen Satz*, Sitz.-Ber. Niederrhein. Ges. Bonn (1870) 114–119; in: S. G. Brush, *Kinetische Theorie I*, 1970, S.245–253
- W. Cochran, *Soft Modes, A Personal Perspective*, Ferroelectrics 35 (1981) 3–8

- I. B. Cohen (Hrsg.), *Isaac Newton's Papers and Letters on Natural Philosophy*, Cambridge (MA): Harvard Univ. Press 1958
- C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc & G. Grynberg, *Atom-Photon Interactions. Basic Processes and Applications*, New York etc.: Wiley 1992
- G. P. Collins, *Das kälteste Gas im Universum*, Spektrum d. Wiss. Dossier 1/2003, 32–39
- E. U. Condon, *60 Years of Quantum Physics*, Physics Today 15 (1962) 37ff.
- J. M. Cook, *The Mathematics of Second Quantization*, Trans. Am. Math. Soc. 74 (1953) 224–245
- L. N. Cooper, *Bound electron pairs in a degenerate Fermi gas*, Phys. Rev. 104 (1956) 1189ff.
- L. N. Cooper, *Microscopic Quantum Interference Effects in the Theory of Superconductivity* (Nobelpreis-Vortrag 1972); in: G. Ekspong (Hrsg.), *Nobel Lectures in Physics Vol 4 1963–1980*, 1998, S.73–93
- E. A. Cornell & C. E. Wieman, *Bose-Einstein Condensation in a Dilute Gas; The First 70 Years and Some Recent Experiments* (Nobelpreis-Vortrag 2001), <http://www.nobel.se/physics/laureates/2001/cornellwieman-lecture.html>
- E. A. Cornell & C. E. Wieman, *Die Bose-Einstein-Kondensation*, Spektrum d. Wiss. Digest-ND 3/2003, 59–63
- R. Courant & D. Hilbert, *Methoden der mathematischen Physik*, Berlin: Springer 1924/1935 (2 Bde.)
- R. A. Cowley, *Structural Phase Transitions. I*, Adv. Phys. 29 (1980) 1–110
- A. P. Cracknell, *Angewandte Gruppentheorie* (WTB 84), Berlin: Akademie-Verlag / Oxford: Pergamon / Braunschweig: Vieweg 1971
- M. Daumer, *Quantenmechanik und Determinismus*, in: G. Schaefer, *Das Elementare im Komplexen*, 1997, 4. Bereich: Physik und Philosophie, S.167–192
- P. Debye, *Zur Theorie der spezifischen Wärmen*, Ann. Phys. [4] 39 (1912) 789–839; Nachdruck in: A. Hermann (Hrsg.), *Dokumente der Naturwissenschaften*, 1967, Bd.8, S.47–97
- P. J. W. Debye, *Polare Molekeln*, Leipzig: Hirzel 1929
- R. Descartes, *Principia philosophiae*, Amsterdam 1644; dtsh: *Die Prinzipien der Philosophie*, Hamburg: Meiner 1922
- R. Descartes, *Le Monde*, 1664; dtsh.: *Le Monde ou Traité de la Lumière – Die Welt oder Abhandlung über das Licht*, Weinheim: VCH / Berlin: Akademie-Verlag 1989
- D. L. Dexter & R. S. Knox, *Excitons*, New York: Wiley 1965
- P. A. M. Dirac, *Quantum Mechanics and a Preliminary Investigation of the Hydrogen Atom*, Proc. Roy. Soc. A110 (1926) 561–579; Nachdruck in: B. L. van der Waerden, *Sources of Quantum Mechanics*, 1968, S.417–427
- P. A. M. Dirac, *On the theory of quantum mechanics*, Proc. Roy. Soc. L. A112 (1926) 661–677
- P. A. M. Dirac, *The physical interpretation of the quantum mechanics*, Proc. Phys. Soc. A113 (1927) 621–641
- P. A. M. Dirac, *The quantum theory of emission and absorption of radiation*, Proc. Roy. Soc. L. A114 (1927) 243–265; Nachdruck in: J. Schwinger (Hrsg.), *Selected Papers on Quantum Electrodynamics*, 1958, Nr.1

- P. A. M. Dirac, *Quantum mechanics of many-electron systems*, Proc. Royal Soc. L. A123 (1929) 714–733
- P. A. M. Dirac, *The basis of statistical mechanics*, Proc. Cambr. Phil. Soc. 25 (1929) 62–66
- P. A. M. Dirac, *Note on the exchange phenomena in the Thomas atom*, Proc. Cambr. Phil. Soc. 26 (1930) 376–385
- P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford: Clarendon 1930
- P. A. M. Dirac, *The Lagrangian in Quantum Mechanics*, Phys. Zs. Sowjetunion 3 (1933) H.1; Nachdruck in: J. Schwinger (Hrsg.), *Selected Papers on Quantum Electrodynamics*, 1958, Nr. 26
- P. A. M. Dirac, *Theory of electrons and positrons* (Nobelpreis-Vortrag 1933); in: G. Ekspung (Hrsg.), *Nobel Lectures in Physics Vol 2 1922–1941*, 1998, S.320–325
- E. A. Donley, B. P. Anderson & C. E. Wieman, *New Twists in Bose-Einstein Condensation*, Optics & Photonics News 12 (2001) H.10, 34–37
- Y. Dothan, M. Gell-Mann & Y. Ne’eman, *Series of hadron energy levels as representations of non-compact groups*, Phys. Lett. 17 (1965) 148ff.
- G. Dresselhaus, *Effective Mass Approximation for Excitons*, Phys. Chem. Solids 1 (1956) 14ff.
- P. Drude, *Zur Elektronentheorie der Metalle: 1. Teil*, Ann. Phys. [4] 1 (1900) 566–613; *2. Teil*, *ibid.* 3 (1900) 369–402
- P. Drude, *Lehrbuch der Optik*, Leipzig: Hirzel 1900; Nachdr.: *The Theory of Optics*, New York: Dover 1959
- I. Duck, *Discovering Quantum Mechanics Once Again*, arXiv:quant-ph/0307121
- D. Dürr, *Bohmsche Mechanik als Grundlage der Quantenmechanik*, Berlin: Springer 2001
- D. Dürr, S. Goldstein, R. Tumulka & N. Zanghi, *Bohmian Mechanics and Quantum Field Theory*, Phys. Rev. Lett. 93 (2004); arXiv:quant-ph/0303156
- R. Dugas, *L’histoire de la mécanique*, Neuchâtel: Griffon 1955; engl.: *A History of Mechanics*, New York: Dover 1988
- P. L. Dulong & A. T. Petit, *Recherches sur quelque points important de la Théorie de la Chaleur*, Ann. chim. et phys. 10 (1819) 395–413 (vgl. Cahn, 2002, SS. 32, 90); Engl.: *Annals of Philosophy* 14 (1819) 189–198 (<http://web.lemoyne.edu/~giunta/PETIT.html>, 11.02.2006)
- F. J. Dyson, *The radiation theories of Tomonaga, Schwinger, and Feynman*, Phys. Rev. 75 (1949) 486–502; Nachdruck in: J. Schwinger (Hrsg.), *Selected Papers on Quantum Electrodynamics*, 1958, Nr.24
- F. J. Dyson, *The S-matrix in quantum electrodynamics*, Phys. Rev. 75 (1949) 1736–1753; Nachdruck in: J. Schwinger (Hrsg.), *Selected Papers on Quantum Electrodynamics*, 1958, Nr.25
- F. J. Dyson, *George Green and physics*, Physics World (1993) Aug., 33–38
- H. Ehrenreich, F. Seitz & D. Turnbull (Hrsg.), *Solid State Physics*, Bd. 35 (1980)
- A. Einstein, *Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt*, Ann. Phys. 17 (1905) 132–148; Nachdrucke in: D. ter Haar, *Quantentheorie*, 1970, S.118–138; J. Stachel (Hrsg.), *Einsteins Annus mirabilis*, 2001, S.197–218

- A. Einstein, *Die Plancksche Theorie der Strahlung und die Theorie der spezifischen Wärme*, Ann. Phys. 22 (1907) 180–190, Berichtigung: Ebda. S.800
- A. Einstein, *Zum gegenwärtigen Stand des Strahlungsproblems*, Phys. Zs. 10 (1909) 185–193
- A. Einstein, *Über die Entwicklung unserer Anschauungen über das Wesen und die Konstitution der Strahlung*, Phys. Zs. 10 (1909) 817–826
- A. Einstein, *Eine Beziehung zwischen dem elastischen Verhalten und der spezifischen Wärme bei festen Körpern mit einatomigem Molekül*, Ann. Phys. [4] 38 (1912) 881–884
- A. Einstein, *Zum gegenwärtigen Stande des Problems der spezifischen Wärme*, Abhandl. Dtsch. Bunsengesell. 3 (1914) 330–364
- A. Einstein, *Strahlungs-Emission und -Absorption nach der Quantentheorie*, Verh. Dtsch. Phys. Ges. Berlin [2] 18 (1916) 318–323
- A. Einstein, *Zur Quantentheorie der Strahlung*, Mitt. Phys. Ges. (Zürich) 18 (1916) 47–62; Nachdruck in: Phys. Zs. 18 (1917) 121–128.
- A. Einstein, *Zum Quantensatz von Sommerfeld und Epstein*, Verh. Dtsch. Phys. Ges. Berlin [2] 19 (1917) 82–92
- A. Einstein, *Bietet die Feldtheorie Möglichkeiten für die Lösung des Quantenproblems?*, Sitzungsber. Preuss. Ak. Wiss. phys.-math. Kl., 13. Dez., XXXIII (1923) 359–364
- A. Einstein, *Anmerkung zu S. N. Boses Abhandlung Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese*, Z. Phys. 26 (1924) 181ff.
- A. Einstein, *Quantentheorie des einatomigen idealen Gases*, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Phys.-math. Kl. 22 (1924) 261–267; Nachdruck in: *Akademie-Vorträge*, 1978, Nr.27
- A. Einstein, *Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. Zweite Abhandlung*, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Phys.-math. Kl. 23 (1925) 3–14; Nachdruck in: *Akademie-Vorträge*, 1978, Nr.28
- A. Einstein, *Zur Quantentheorie des idealen Gases*, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Phys.-math. Kl. 23 (1925) 18–25; Nachdruck in: *Akademie-Vorträge*, 1978, Nr.29
- A. Einstein, *Einleitende Bemerkungen über Grundbegriffe*, in: *Louis de Broglie, Physicien et penseur*, 1953
- A. Einstein, *Grundzüge der Relativitätstheorie*, Berlin: Akademie-Verlag ⁵1977 (WTB 58), Anhang II. *Relativistische Theorie des nichtsymmetrischen Feldes*
- A. Einstein, *Akademie-Vorträge*, Berlin: Akademie-Verlag 1978 / Weinheim: Wiley-VCH 2005
- The Collected Papers of Albert Einstein – Gesammelte Schriften*, Princeton: Princeton Univ. Press 1987ff.
- A. Einstein, B. Podolsky & N. Rosen, *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality be considered complete?*, Phys. Rev. 47 (1935) 777–780
- G. Ekspong (Hrsg.), *Nobel Lectures in Physics 1981–1990 / 1991–1995 / 1996–2000*, Singapore: World Scientific 1993 / 1997 / 2002
- G. Ekspong (Hrsg.), *Nobel Lectures in Physics Vol 1 1901–1921, Vol 2 1922–1941, Vol 3 1942–1962, Vol 4 1963–1980*, Singapore: World Scientific 1998

- P. Enders, *Universal Tight-Binding Parameters for Cubic IV-VI Compounds*, phys. stat. sol. (b) 116 (1983) K15–K18
- P. Enders, *Structure and Bonding in Cubic IV-VI Crystals. II. Instability of the $TO(\Gamma)$ mode: Unified Universal-Parameter Treatment of the Group-V Semimetals and Cubic IV-VI Semiconductors*, phys. stat. sol. (b) 121 (1984) 39–46; *III. On the Cubic to Rhombohedral Phase Transition*, 461–470; *VI. Acoustic and Optical Deformation Potentials*, 129 (1985) 89–99; *VII. On the Influence of Defects on the Stability of the Cubic Structure*, 130 (1985) 511–516
- P. Enders, *Electronic Structure of Group-V Semimetals: Tight-Binding Parameter Estimation from Chemical Trends*, phys. stat. sol. (b) 125 (1984) K133–K135, *Errat.* 126 (1984) K177
- P. Enders, *Acoustic and Optical Deformation Potentials in Cubic IV-VI Compounds*, phys. stat. sol. (b) 132 (1985) 165–172
- P. Enders, *Huygens' principle and the modelling of propagation*, Eur. J. Phys. 17 (1996) 226–235
- P. Enders, *Enhancement and Spectral Shift of Optical Gain in Semiconductors from Non-Markovian Intraband Relaxation*, IEEE J. Quantum Electron. 33 (1997) 580–588
- P. Enders, *Equality and Identity and (In)distinguishability in Classical and Quantum Mechanics from the Point of View of Newton's Notion of State*, Proc. Int. Symp. *Frontiers of Fundamental and Computational Physics (FFP6)*, Udine (Italien), 26.-29.09.2004, B.G. Sidharth, F. Honsell & A. De Angelis (Eds.), Dordrecht: Kluwer 2006
- P. Enders, *Von der Klassischen zur Quantenphysik und zurück. Ein deduktiver Zugang*, Leopoldina-Förderpreisträger-Meeting 2004; in: *Nova Acta Leopoldina*, Suppl. 19 (2004) 54
- P. Enders & D. Suisky, *Über das Auswahlproblem in der klassischen Mechanik und in der Quantenmechanik*, Leopoldina-Förderpreisträger-Meeting 2002; in: *Nova Acta Leopoldina*, Suppl. 18 (2004) 13–17
- P. Enders & D. Suisky, *Quantization as selection problem*, Int. J. Theor. Phys. 44 (2005) 161–194
- W. Eschrig, *The Fundamentals of Density Functional Theory* (Teubner-Texte Physik 32), Stuttgart · Leipzig: Teubner 1996
- L. Euler, *Mechanica sive motus scientia analytice exposita*, 1736, in: *Opera Omnia* II, 1 und 2; dtsh.: *Mechanik oder analytische Darstellung der Wissenschaft von der Bewegung* (Übers. und hrsg. von J. P. Wolfers), Greifswald 1848/50
- L. Euler, *De motu projectorum in medio non resistente, per Methodum maximorum ac minimorum determinando*, 1743 (Anhang zu: Ders., *Methodus inveniendi lineas curvas maximi minimive proprietate gaudentes* ... , 1744)
- L. Euler, *Methodus inveniendi lineas curvas maximi minimive proprietate gaudentes, sive solutio problematis isoperimetrici latissimo sensu accepti*, Lausanne · Genf: Bousquet 1744; in: *Opera Omnia* I, 24
- L. Euler, *Réflexions sur l'espace et le temps*; in: *Opera Omnia*, Ser.II, Bd.5
- L. Euler, *Recherches sur l'origine des forces*, Mém. ac. sci. Berlin [6] (1750) 1752, 419–447; in: *Opera Omnia*, II, 5

- L. Euler, *Harmonie entre les principes généraux de repos et de mouvement de M. de Maupertuis*, in: *Opera Omnia*, II, 5, S.152ff.
- L. Euler, *Découverte d'un nouveau principe de mécanique*, 1750; in: *Opera Omnia* II, 5, S.81–108
- L. Euler, *Anleitung zur Naturlehre worin die Gründe zu Erklärung aller in der Natur sich ereignenden Begebenheiten und Veränderungen festgesetzt werden*, ca. 1750; in: *Opera Omnia*, III, 1, S.17–178; *Opera posthuma* 2, 1862, S.449–560
- L. Euler, *Dissertation sur le principe de la moindre action*, Berlin 1753
- L. Euler, *Theoria motus corporum solidorum seu rigidorum*, 1765
- L. Euler, *Lettres à une princesse d'Allemagne*, Bd.1, St. Petersburg 1768; in: *Opera Omnia*, III, 11; dtsh: *Briefe an eine deutsche Prinzessin*, Leipzig 1769
- Leonardi Euleri Opera Omnia sub auspiciis Societatis Scientiarum Helveticae*, Zürich · Basel 1911–1986
- Leonhard Euler 1707–1783. Beiträge zu Leben und Werk*, Basel u.s.w.: Birkhäuser 1983
- R. A. Ewarestow, *Quantenchemische Methoden in der Festkörpertheorie*, Leningrad: Isd. Leningr. univ. 1982 (in Russ.)
- W. Fahrner (Hrsg.), *Nanotechnology and Nanoelectronics. Materials, Devices, Measurement Techniques*, Heidelberg u.s.w.: Springer 2005
- A. E. Faraggi & M. Matone, *The Equivalence Postulate of Quantum Mechanics*, arXiv:hep-th/9809127
- E. A. Fellmann, *Leonhard Euler*, Hamburg: Rowohlt 1995
- P. de Fermat, *Abhandlungen über Maxima und Minima*, 1629; dtsh.: Ostwalds Klassiker 208
- E. Fermi, *Zur Quantelung des idealen einatomigen Gases*, Z. Phys. 36 (1926) 902–912; Nachdruck in: *Collected Papers I*, 1962, S.186–195 (in Engl.)
- E. Fermi, *Quantum theory of radiation*, Rev. Mod. Phys. 4 (1932) 87–132
- E. Fermi, *Collected Papers I*, Chicago: Univ. Chicago Press 1962
- L. G. Ferreira, *Formulation of the Lattice Dynamics Problem in Terms of Rigidly Moving Wannier Functions*, I, J. Phys. C: Solid State 4 (1971) 3ff.; II: *Electron-Phonon Interaction*, *ibid.*, 20ff.
- R. P. Feynman, *Space-Time Approach to Quantum Electrodynamics*, Phys. Rev. 76 (1949) 769–789; Nachdruck in: J. Schwinger (Hrsg.), *Selected Papers on Quantum Electrodynamics*, 1958, Nr.22
- R. P. Feynman, *Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics*, Rev. Mod. Phys. 20 (1948) 367–387; Nachdruck in: J. Schwinger (Hrsg.), *Selected Papers on Quantum Electrodynamics*, 1958, Nr.27
- R. P. Feynman, *An operator calculus having applications in quantum electrodynamics*, Phys. Rev. 84 (1951) 108–128
- R. P. Feynman, *QED: The Strange Theory of Light and Matter*, Princeton: Princeton Univ. Press 1986
- E. Fick, *Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie*, Wiesbaden: Aula ⁸1988
- G. Floquet, *Sur les Equations Différentielles Linéaires*, Ann. ENS [2] 12 (1883) 47–88

- W. A. Fock, *Näherungsmethoden zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems*, Z. Phys. 61 (1930) 126–148
- V. A. Fock, *Konfigurationsraum und zweite Quantelung*, Z. Phys. 75 (1932) 622–647
- J. Fourier, *La Théorie Analytique de la Chaleur*, Paris 1922
- R. H. Fowler, *Statistical Mechanics*, Cambridge: Cambridge Univ. Press 1929
- J. Franck & G. Hertz, *Über Zusammenstöße zwischen langsamen Elektronen und den Molekülen des Quecksilberdampfes und die Ionisierungsspannung derselben*, Verh. dtsh. phys. Ges. [2] 16 (1914) 457–467
- J. Franck & G. Hertz, *Über die Erregung der 2536-Å-Quecksilberresonanzlinie durch Elektronenstöße und die Ionisierungsspannung derselben*, Verh. dtsh. phys. Ges. [2] 16 (1914) 512–517; Nachdruck in: D. ter Haar, *Quantentheorie*, 1970, S.201–208
- J. Franck & P. Jordan, *Anregung von Quantensprüngen durch Stöße* (Struktur der Materie in Einzeldarstellungen, Bd. III), Berlin: Springer 1926
- J. Frenkel, *On the Transformation of Light into Heat in Solids*, Phys. Rev. 37 (1931) 17ff., 1276ff
- J. Frenkel, *On the Absorption of Light and the Trapping of Electrons and Positive Holes in Crystalline Dielectrics*, Phys. Zs. Sowjetunion 9 (1936) 533–536
- H. Fröhlich, *Theory of the superconducting state. I. The ground state at the absolute zero temperature*, Phys. Rev. 79 (1950) 845–856
- H. Fröhlich, *Interactions of electrons with lattice vibrations*, Proc. Roy. Soc. A 215 (1952) 291–298
- H. Fröhlich, *Localized versus Band Model of Electrons in Solids*, Helv. Phys. Acta 41 (1968) 838ff.
- P. Fulde, *Electron Correlations in Molecules and Solids*, Berlin: Springer, 2001 (korr. 2. Druck der 3. Aufl. 1995)
- G. Galilei, *Dialogo sopra i due massimi sistemi del Mondo, Tolemaico, e Copernicano*, Florenz 1632
- G. Galilei, *Discorsi e dimostrazioni matematiche, intorno à due nuove scienze attenenti alla meccanica e i movimenti locali*, Leiden 1638; dtsh.: *Unterredungen und Mathematische Demonstrationen über zwei neue Wissenszweige, die Mechanik und die Fallgesetze betreffend. 1.-6. Tag* (übers. u. hrsg. v. A. J. von Oettingen), Leipzig: Engelmann 1890–1904 (Ostwalds Klassiker 11, 24, 25) / Frankfurt a. Main · Thun: Deutsch ⁵1995; Nachdrucke: Darmstadt: Wiss. Buchges. 1973; in: Hawking, *Die Klassiker der Physik*, 2004, S.335–524 (1.-4. Tag)
- F. R. Gantmacher, *Matrizentheorie*, Berlin: Dtsch. Verlag d. Wissensch. 1986
- C. F. Gauß, *Disquisitiones generales circa superficies curvas*, 1827, in: *Ges. Werke*, Bd. IV (Wahrscheinlichkeitsrechnung und Geometrie), 1888; Nachdruck: Olms Verlag, 1981; deutsch: *Allgemeine Flächentheorie* (Ostwalds Klassiker 5), Leipzig: Engelmann 1889
- C. F. Gauss, *Über ein neues Grundgesetz der Mechanik*, Crelles J. IV (1829); in: *Ges. Werke*, Bd. V
- C. F. Gauss, *Allgemeine Lehrsätze in Beziehung auf die im verkehrten Verhältnisse des Quadrats der Entfernung wirkenden Anziehungs- und Abstoßungs-Kräfte* (1839/1840) (Ostwalds Klassiker 2), Leipzig: Engelmann ³1912

- J. D. McGervey, *Quantum Mechanics. Concepts and Applications*, San Diego u.s.w.: Academic Press 1995
- J. W. Gibbs, *Elementary Principles in Statistical Mechanics Developed with Especial Reference to the Rational Foundation of Thermodynamics* (Yale Bicentennial Publ.), New York: Scribner 1902
- D. Giulini & N. Straumann, „... ich dachte mir nicht viel dabei ... “. *Plancks ungerader Weg zur Strahlungsformel*, Phys. Bl. 56 (2000) H.12, 37–41
- R. J. Glauber, *The Quantum Theory of Optical Coherence*, Phys. Rev. 130 (1963) 2529–2539
- R. J. Glauber, *Coherent and Incoherent States of the Radiation Field*, Phys. Rev. 131 (1963) 2766–2788
- M. Glazer & J. Wark, *statistical mechanics. A Survival Guide*, Oxford: Oxford Univ. Press 2001
- Th. Görnitz, *Quanten sind anders. Die verborgene Einheit der Welt*, Heidelberg · Berlin: Spektrum 1999
- S. Goldstein, *Bohmian Mechanics*, The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Hrsg. E. N. Zalta), Winter 2002 Edition, <http://plato.stanford.edu/archives/win2002/entries/qm-bohm/>
- S. H. Gould, *Variational Methods for Eigenvalue Problems. An Introduction to the Methods of Rayleigh, Ritz, Weinstein, and Aronstajn* (Mathematical Expositions 10), Toronto: Univ. Toronto Press 1957; Nachdruck: New York: Dover 1995
- H. Graßmann, *Das Top Quark, Picasso und Mercedes-Benz oder Was ist Physik?*, Berlin: Rowohlt 1997
- G. Green, *An Essay on the Applicability of Mathematical Analysis on the Theories of Electricity and Magnetism*, Nottingham 1828; dtsh.: *Ein Versuch die mathematische Analysis auf die Theorien der Elektrizität und des Magnetismus anzuwenden* (Ostwalds Klassiker 61), Leipzig: Engelmann 1895
- W. Greiner, *Quantentheorie. Spezielle Kapitel (Theoretische Physik 4A)*, Thun · Frankfurt am Main: Deutsch ³1989
- W. Greiner & J. Reinhardt, *Feldquantisierung (Theoretische Physik 7A)*, Thun · Frankfurt am Main: Deutsch 1993
- A. Griffin, D. W. Snoke & S. Stringari, *Bose-Einstein condensation*, Cambridge: Cambridge Univ. Press 1995
- A. T. Grigorjan, *Das Anfangsstadium der Entwicklung der klassischen Mechanik*, in: *Issledowanija po istorii fiziki i mehaniki. 1985* (Untersuchungen über die Geschichte der Physik und Mechanik. 1985), Moskau: „Nauka“ 1985, S.176–223 (in Russ.)
- A. T. Grigorjan, B. N. Fradlin & W. S. Sotnikow, *Axiomatik der klassischen Mechanik*, in: *Issledowanija po istorii fiziki i mehaniki. 1986* (Untersuchungen über die Geschichte der Physik und Mechanik. 1986), Moskau: „Nauka“ 1986, S.5–37 (in Russ.)
- A. T. Grigor'jan & B. T. Kowaljow, *Daniil Bernulli*, Moskau: „Nauka“ 1981 (in Russ.)
- D. J. Gross, *Gauge Theory - Past, Present, and Future?*, Chin. J. Phys. 30 (1992) 7, 955–972

- G. Guerrerio, *Kurt Gödel. Logische Paradoxien und mathematische Wahrheit* (Spektrum der Wissenschaft. Biographie 1/2002), Heidelberg: Spektrum 2002
- S. N. Gupta, *On the elimination of divergences from classical electrodynamics*, Proc. Phys. Soc. L. 64 A (1951) 50–56
- S. N. Gupta, *Quantum Electrodynamics*, New York: Gordon & Breach 1977
- D. ter Haar, *Quantentheorie. Einführung und Originaltexte* (WTB 56), Berlin: Akademie-Verlag / Oxford: Pergamon / Braunschweig: Vieweg ²1970
- H. Haken, *Laserstrahlung – ein neues Beispiel für einen Phasenübergang*, Festkörperprobleme X (1970) 351ff.
- H. Haken, *Quantenfeldtheorie des Festkörpers*, Stuttgart: Teubner 1973
- F. D. M. Haldane, *Fractional statistics in arbitrary dimensions – A generalization of the Pauli principle*, Phys. Rev. Lett. 67 (1991) 937ff.
- B. C. Hall, *Holomorphic methods in analysis and mathematical physics*, arXiv:quant-ph/9912054
- G. Hamel, *Mechanik I: Grundbegriffe der Mechanik*, Leipzig · Berlin: Teubner 1921
- W. R. Hamilton, *Theory of Systems of Rays*, Trans. Roy. Irish Acad. 15 (1828) 69–174; Kopie: <http://www.emis.de/classics/Hamilton/PtFst.pdf>
- W. R. Hamilton, *On the Application to Dynamics of a General Mathematical Method Previously Applied to Optics*, Report 4th Meeting Brit. Ass. Adv. Sci., Edinburgh 1834, London: Murray 1835, S.513–518; Kopie: <http://www.emis.de/classics/Hamilton/BARep34A.pdf>
- W. R. Hamilton, *On a General Method in Dynamics, by which the study of motions of all free systems of attracting or repelling points is reduced to the search and differentiation of one central relation or characteristic function*, Phil. Trans. Roy. Soc. L. 124 (1834) pt. II, 247–308; korr. Kopie: <http://www.emis.de/classics/Hamilton/GenMeth.pdf>
- W. R. Hamilton, *Second Essay on a General Method in Dynamics*, *Ibid.* 125 (1835) pt. I, 95–144; in: A. W. Conway & A. J. McConnell (Hrsg.), *The Mathematical Papers of Sir William Rowan Hamilton, Vol. II: Dynamics*, Cambridge: Cambridge Univ. Press 1940; korr. Kopie: <http://www.emis.de/classics/Hamilton/SecEssay.pdf>
- W. A. Harrison, *Solid State Theory*, New York: McGraw-Hill 1970; korr. Nachdruck: New York: Dover 1980
- W. A. Harrison, *Electronic structure and the properties of solids*, San Francisco: Freeman 1980
- D. R. Hartree, *The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I. Theory and methods*, Proc. Camb. Phil. Soc. 24 (1927) 89–110; *Part II. Some results and discussion*, 111–132; *Part III. Term values and the intensities of series in optical spectra*, 24 (1928) 426–437
- H. Haug & S. W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, Singapore etc.: World Scientific, ³1994
- S. Hawking (Hrsg.), *Die Klassiker der Physik*, Hamburg: Hoffmann und Campe 2004
- W. Heisenberg, *Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen*, Z. Phys. 33 (1925) 879–893; Nachdruck in: Ludwig, *Wellenmechanik*, 1970, S.193–210

- W. Heisenberg, *Mehrkörperproblem und Resonanz in der Quantenmechanik*, Z. Phys. 38 (1926) 411–426
- W. Heisenberg, *Über die Spektren von Atomsystemen mit zwei Elektronen*, Z. Phys. 39 (1926) 499–518; Nachdruck in: W. R. Hindmarsh, *Atomspektren*, 1972, S. 276–304
- W. Heisenberg, *Schwankungserscheinungen und Quantenmechanik*, Z. Phys. 40 (1926) 501–509
- W. Heisenberg, *Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik*, Z. Phys. 43 (1927) 172–198; Nachdruck in: J. A. Wheeler & W. H. Zurek (Hrsg.), *Quantum Theory and Measurement*, 1983, S.62–84 (in Engl.)
- W. Heisenberg, *Die physikalischen Prinzipien der Quantentheorie* (Vorlesungen in Chicago, 1929), Stuttgart: Hirzel 1958; Nachdruck: Heidelberg · Berlin: Spektrum 2001
- W. Heisenberg, *Die Geschichte der Quantentheorie*, in: Ders., *Physik und Philosophie*, Frankfurt u.s.w.: Ullstein 1977, S.15–27
- W. Heitler, *The Quantum Theory of Radiation*, Clarendon, Oxford, ³1954; Nachdruck: New York: Dover 1984
- W. Heitler & F. London, *Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik*, Z. Phys. 44 (1927) 455–472
- H. Helmholtz, *Über die Erhaltung der Kraft*, Berlin: Reimer 1847; in: *Wissenschaftliche Abhandlungen I*, Leipzig: Barth 1882, S.12–75; erweiter. Nachdruck: Leipzig: Engelmann 1889 / Leipzig: Geest & Portig 1982 (Ostwalds Klassiker 1); Teilabdruck in: Brush, *Kinetische Theorie I*, 1970, Nr.7
- H. Helmholtz, *Über die Thatsachen, die der Geometrie zum Grunde liegen*, Nachr. Ges. Wiss. Gött. (1868) 9, 193–221; in: *Wissenschaftliche Abhandlungen II*, Leipzig: Barth 1883, S.618–639
- H. von Helmholtz, *Einleitung zu den Vorlesungen über Theoretische Physik* (Vorlesungen über Theoretische Physik, Bd. I/1, hrsg. von A. König & C. Runge), Leipzig: Barth 1903; Nachdruck der S.1–50 in: R. Rompe & H.-J. Treder, *Zur Grundlegung der theoretischen Physik*, 1984, S.11–62
- H. von Helmholtz, *Vorlesungen über die Dynamik discreter Massenpunkte* (Vorlesungen über Theoretische Physik, Bd. I/2, hrsg. von O. Krüger-Menzel), Leipzig: Barth ²1911
- B. Henderson & G. F. Imbusch, *Optical spectroscopy of inorganic solids*, Oxford: Clarendon 1989
- A. Hermann (Hrsg.), *Dokumente der Naturwissenschaften*, München: 1967
- A. Hermann, *Frühgeschichte der Quantentheorie (1899–1913)*, Mosbach/Baden: Physik Verlag 1969
- A. Hermann, „Ich dachte mir nicht viel dabei“, Süddeutsche Zeitung v. 9.12.2000; <http://www.roro-seiten.de/physik/extra/planck/planckartikel.html>
- D. Hilbert, *Grundzüge einer allgemeinen Theorie der linearen Integralgleichungen*, Leipzig: Teubner 1912
- W. R. Hindmarsh, *Atomspektren* (WTB 76), Berlin: Akademie-Verlag / Oxford: Pergamon / Braunschweig: Vieweg 1972
- G. Höhler, *Ferromagnetism as Einstein Condensation of Bloch Spin Waves*, Ann. Phys. 7 (1950) 93ff.

- R. Holland, *The Quantum Theory of Motion. An Account for the de Broglie-Bohm Causal Interpretation of Quantum Mechanics*, Cambridge: Cambridge Univ. Press 1993
- J. Hubbard, *Electron correlations in narrow energy bands*, Proc. Roy. Soc. A 276 (1963) 238–257; 277 (1964) 237–259
- E. Hückel, *Grundzüge der Theorie ungesättigter und aromatischer Verbindungen*, 1938
- F. Hund, *Zur Deutung der Molekelspektren. I*, Z. Phys. 40 (1927) 742–764; *III. Bemerkungen über das Schwingungs- und Rotationsspektrum bei Molekeln mit mehr als zwei Kernen*, 43 (1927) 805–826
- F. Hund, *Geschichte der Quantentheorie*, Mannheim: B. I. - Wissenschaftsverlag ²1975
- K. Husimi, *Miscellanea in elementary quantum mechanics II*, Progr. Theor. Phys. 9 (1953) 381ff.
- Chr. Huygens, *De motu corporum ex percussione*, London: Royal Society, Vortrag am 4. Jan. 1669, veröff. 1703
- Chr. Huygens, *Horologium oscillatorium sive de motu pendulorum ad horologia aptato demonstrationes geometricae*, Paris 1673; in: *The complete Works of Christiaan Huygens*, Bd. XVII, Den Haag 1934
- Chr. Huygens, *Traité de la Lumière*, Leiden: van der Aa 1690, dtsh.: *Abhandlung über das Licht* (Ostwalds Klassiker 20), Thun · Frankfurt am Main: Deutsch ⁴1996
- Th. Ilfrich, *Nano und Mikrotechnik. Entwicklung der Nano- und Mikrotechnologie*, Norderstedt: BoD, 2003
- Yu. A. Il'inskii & L. V. Keldysh, *Electromagnetic Response of Material Media*, New York · London: Plenum 1994
- C. G. J. Jacobi, *Über die Reduction der Integration der partiellen Differentialgleichungen erster Ordnung zwischen irgend einer Zahl Variablen auf die Integration eines einzigen Systemes gewöhnlicher Differentialgleichungen*, Crelle's J. 17 (1937) 97ff.; in: *Gesammelte Werke*, Bd. IV, Berlin: Reimer 1886
- C. G. J. Jacobi, *Neue Methode zur Integration partieller Differentialgleichungen erster Ordnung zwischen irgend einer Anzahl von Veränderlichen* (Ostwalds Klassiker 156), Leipzig: Engelmann 1906
- C. G. J. Jacobi, *Vorlesungen über Dynamik, gehalten an der Universität Königsberg im Wintersemester 1842–1843* (hrsg. von A. Clebsch), Berlin: Reimer 1866
- H. A. Jahn, *Stability of degenerate electronic states in polyatomic molecules II. Spin degeneracy*, Proc. Roy. Soc. A164 (1938) 117–131
- H. A. Jahn & E. Teller, *Stability of degenerate electronic states in polyatomic molecules I. Orbital degeneracy*, Proc. Roy. Soc. A 161 (1937) 220–235; dtsh. in: A. P. Cracknell, *Angewandte Gruppentheorie*, 1971, S.259–282
- M. Jammer, *Concepts of Force*, Cambridge: Harvard Univ. Press 1957; Nachdruck: New York: Dover 1999
- M. Jammer, *Concepts of Mass in Classical and Modern Physics*, Cambridge: Harvard Univ. Press 1961; Nachdruck: New York: Dover 1991
- M. Jammer, *The conceptual development of quantum mechanics*, New York u.s.w.: McGraw-Hill 1967, New York: AIP ²1989

- M. Jammer, *The philosophy of quantum mechanics*, New York etc.: Wiley 1974
- M. Jammer, *Concepts of Space. The History of Theories of Space in Physics*, New York: Dover, erw. Aufl. 1993
- B. M. Jaworski & A. A. Detlaf, *Physik griffbereit. Definitionen – Gesetze – Theorien*, Berlin: Akademie-Verlag 1972
- B. Jettmann, *Konsistente Behandlung der Zeitentwicklung bei der spontanen Lichtemission freier Atome*, Diplomarbeit, Inst. f. Theor. Phys., TU Clausthal, Nov. 1987
- A. F. Joffe, *Physik der Halbleiter*, Moskau · Leningrad, 1957 (in Russ.)
- H. Jones, *The Theory of Brillouin Zones and Electronic States in Crystals*, Amsterdam: North-Holland 1960
- W. Jones & N. H. March, *Theoretical Solid State Physics, Vol.1: Perfect Lattices in Equilibrium, Vol.2: Non-equilibrium and Disorder*, New York: Wiley 1973; Nachdruck: New York: Dover 1985
- P. Jordan, *Über eine neue Begründung der Quantenmechanik*, Z. Phys. 40 (1927) 809–838
- P. Jordan, *Die Physik des 20. Jahrhunderts*, Braunschweig: Vieweg 1947
- P. Jordan & O. Klein, *Zum Mehrkörperproblem der Quantentheorie*, Z. Phys. 45 (1927) 751–765
- P. Jordan & W. Pauli, *Zur Quantenelektrodynamik ladungsfreier Felder*, Z. Phys. 47 (1928) 151–173
- P. Jordan & E. Wigner, *Über das Paulische Äquivalenzverbot*, Z. Phys. 47 (1928) 631–651; Nachdruck in: J. Schwinger (Hrsg.), *Selected Papers on Quantum Electrodynamics*, 1958, Nr. 4
- N. I. Kaganow, *Was sind Quasiteilchen?* (Kleine Naturwiss. Bibl., Physik, Bd.20), Leipzig: Teubner 1973
- H. Kalt & M. Hetterich (Hrsg.), *Optics of Semiconductors and Their Nanostructures* (Springer Series in Solid-State Sciences, 146), Heidelberg etc.: Springer 2004
- H. Kamerlingh Onnes, *Further experiments with liquid helium. D. On the change of the electrical resistance of pure metals at very low temperatures. V. The disappearance of the resistance of mercury*, Proc. Kon. Akad. Wetensch. Amsterdam 14 (1911) 113–115
- T. Kashiwa, Y. Ohnuki & M. Suzuki, *Path Integral Methods*, Oxford: Clarendon 1997 (Oxford Science Publ.)
- E. H. Kennard, *Zur Quantenmechanik einfacher Bewegungstypen*, Z. Phys. 44 (1927) 326–352
- J. Kepler, *Astronomia Nova seu Physica Coelestis*, Prag 1609; dtsh.: *Neue Astronomie*, München · Berlin 1929
- J. Kepler, *Harmonices mundi*, 1619; dtsh.: *Weltharmonik* (übers. v. M. Caspar), München 1939; Nachdrucke: München: Oldenbourg 1997; in: Hawking, *Die Klassiker der Physik*, 2004, S.533–628 (Buch V)
- W. Ketterle, *Experimental studies of Bose-Einstein condensation*, Phys. Today 52 (1999) Nr.12, 30ff.

- W. Ketterle, *When Atoms Behave as Waves: Bose-Einstein Condensation and the Atom Laser* (Nobelpreis-Vortrag 2001),
<http://www.nobel.se/physics/laureates/2001/ketterle-lecture.html>
- W. S. Kirsanow, *Die Entwicklung des Potenzialbegriffs bei L. Euler*, in: A. N. Bogoljubow (Hrsg.), *Mechanik und Physik der zweiten Hälfte des 19. Jahrhunderts*, 1978, S.141–147 (in Russ.)
- J. Klauder, *The action option and a Feynman quantization of spinor fields in terms of ordinary c-numbers*, Ann. Phys. (NY) 11 (1960) 123–168
- J. R. Klauder & E. C. G. Sudarshan, *Fundamentals of Quantum Optics*, New York: Benjamin 1968
- R. S. Knox & A. Gold, *Symmetry in the Solid State*, New York: Benjamin 1964
- W. Kohn & D. Sherrington, *Two kinds of bosons and Bose condensation*, Rev. Mod. Phys. 42 (1970) 1–11
- A. N. Kolmogoroff, *Über die analytischen Methoden der Wahrscheinlichkeitsrechnung*, Math. Ann. 104 (1931) 415ff.
- A. N. Kolmogoroff, *Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung*, Berlin: Springer 1933
- E. J. Konopinski, *What the Electromagnetic Vector Potenzial Describes*, Am. J. Phys. 46 (1978) 499–502
- N. Kopernikus, *De revolutionibus orbium caelestium*, Nürnberg 1543; dtsh.: *Über die Kreisbewegungen der Weltkörper* (übers. v. C. L. Menzzer), Thorn (Torun): Lambeck 1879; Nachdruck in: Hawking, *Die Klassiker der Physik*, 2004, S.19–326 (mit textkrit. Anm. v. M. Pössel, *Ebda.*, S.1061–1064)
- K. Kopitzki & P. Herzog, *Einführung in die Festkörperphysik* (Teubner Studienbücher Physik), Stuttgart: Teubner, 4., überarb. u. erw. Aufl. 2002
- F. Krafft (Hrsg.), *Lexikon großer Naturwissenschaftler. Vorstoß ins Unbekannte*, Weinheim: Wiley-VCH 1999
- H. A. Kramers, *La diffusion de la lumière par les atoms*, in: *Atti Congr. Int. Fisici, 10–20 Sett. 1927, Como-Pavia-Roma*, Bd. II, Bologna: Zachinelli, S.545–557
- R. de Laer Kronig, *On the theory of dispersion of X-rays*, J. Opt. Soc. Am. 12 (1926) 547–557
- T. Kugo, *Eichtheorie*, Heidelberg u.s.w.: Springer 1997
- W. Kuhn & J. Strnad, *Quantenfeldtheorie. Photonen und ihre Deutung* (vieweg studium, Aufbaukurs Physik), Braunschweig · Wiesbaden: Vieweg 1995
- J.-L. Lagrange, *Application de la méthode exposée dans le mémoire précédent à la solution de différents problèmes de dynamique*, Miscellanea Taurinensia II (1760–1761); in: *Œuvres*, Bd. I, Paris 1867
- J.-L. Lagrange, *Mécanique Analytique*, Paris: La Veuve Desaint 1788; dtsh.: *Analytische Mechanik* (hrsg. von F. W. A. Murhard), Göttingen 1797; *Analytische Mechanik* (hrsg. von H. Servus), Berlin 1887
- J.-L. Lagrange, *Abhandlungen zur Variationsrechnung* (Ostwalds Klassiker 57), Leipzig: Engelmann 1894
- M. G. C. Laidlaw & C. M. DeWitt, *Feynman functional integrals for systems of indistinguishable particles*, Phys. Rev. D 3 (1971) 1375ff.

- L. D. Landau, *Das Dämpfungsproblem in der Wellenmechanik*, Z. Phys. 45 (1927) 430–441
- L. D. Landau, *Über die Bewegung des Elektrons im Kristallgitter*, Phys. Zs. Sowjetunion 3 (1933) 664–665
- L. D. Landau & E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik*, Bd. I. Mechanik, ⁹1976; Bd. III. Quantenmechanik, ⁹1979; Bd. V. Statistische Physik, ³1971; Bd. VIII. Elektrodynamik der Kontinua, 1967, Berlin: Akademie-Verlag
- L. Landau & R. Peierls, *Erweiterung des Unbestimmtheitsprinzips für die relativistische Quantentheorie*, Z. Phys. 69 (1931) 56–69
- P. S. de Laplace, *Mécanique céleste*, Paris 1799–1825 (5 Bde.)
- P. S. de Laplace, *Essai Philosophique sur la Probabilité*, Paris 1814; dtsh.: *Philosophischer Versuch über die Wahrscheinlichkeit* (Ostwalds Klassiker 233), Leipzig 1932
- J. Larmor, *Aether and Matter: A Development of the Dynamical Relations of the Aether to Material Systems on the Basis of the Atomic Constitution of Matter, Including a Discussion of the Earth's Motion on Optical Phenomena, Being an Adams Prize Essay in the University of Cambridge*, Cambridge: Cambridge Univ. Press 1900
- M. v. Laue, *Geschichte der Physik*, Frankfurt/M.: Ullstein ⁴1959
- R. B. Laughlin, *Fractional Quantization* (Nobelpreis-Vortrag 1998); in: G. Ekspeng (Hrsg.), *Nobel Lectures in Physics 1996–2000*, 2002, S.264–286
- T. Lee, F. E. Low & D. Pines, *The Motion of Slow Electrons in Polar Crystals*, Phys. Rev. 90 (1953) 297ff.
- A. M. Legendre, *Exercices de calcul integral*, Paris 1825–1832 (3 Bde.)
- G. W. Leibniz, *Brevis demonstratio erroris memorabilis Cartesii et aliorum circa legem naturae, secundum quam volunt a Deo eandem semper quantitatem motus conservari, qua et in re mechanica abutuntur*, Acta erudit. Lipsiens. 1686
- G. W. Leibniz, *Specimen dynamicum pro admirandis naturae legibus circa corporum vires et mutuas actiones detegendis et ad suas causas revocandis*, Acta erudit. Lipsiens. April 1695; dtsh.: *Specimen Dynamicum* (Philosophische Bibliothek 339), Hamburg: Meiner 1982
- G. W. Leibniz, *Essais de Theodicée sur la bonté de Dieu, la liberté de l'homme et l'origine du mal*, Amsterdam 1710, dtsh.: Hannover 1720
- G. W. Leibniz, *Nouveaux essais sur l'entendement humain*, 1704, in: *Œuvres philosoph. latines et françaises de feu Mr. de Leibnitz*, Amsterdam · Leipzig 1765, dtsh.: Halle 1778–1780
- L. M. Leinaas & J. Myrheim, *On the theory of identical particles*, Nuovo Cim. 37b (1977) 1–23
- A. A. Lewin, *Einführung in die Quantenchemie des Festkörpers*, Moskau: Isd. Chimija 1974 (in Russ.)
- G. N. Lewis, *The conservation of photons*, Nature 118 (1926) 874–875
- Lexikon der Naturwissenschaftler* (Digitale Bibliothek 85)
- M. S. Lie, *Theorie der Transformationsgruppen*, 1888–93 (3 Bände)
- E. H. Lieb & F. Y. Wu, *The one-dimensional Hubbard model: A reminiscence*, arXiv:cond-mat/0207529

- M. Lindberg & S. W. Koch, *Effective Bloch equations for semiconductors*, Phys. Rev. B 38 (1988) 3342ff.
- F. London, *On the Bose-Einstein condensation*, Phys. Rev. 54 (1938) 947–954
- M. Longair, *Theoretical Concepts in Physics. An alternative view of theoretical reasoning in physics*, Cambridge: Cambridge Univ. Press ²2003
- H.A. Lorentz, *La théorie électromagnétique de Maxwell et son application aux corps mouvants*, Leiden: Brill 1892; Arch. néerl., T.25
- H.A. Lorentz, *Versuch einer Theorie der elektrischen und optischen Erscheinungen in bewegten Körpern*, Leiden: Brill 1895; Nachdrucke: Leipzig: Teubner 1906, Elibron Classics o. J. (www.elibron.com)
- H.A. Lorentz, *The Theory of Electrons and its Applications to the Phenomena of Light and Radiant Heat*, Leipzig: Teubner 1909; Nachdruck d. 2. Aufl.: New York: Dover 1952
- H. A. Lorentz, A. Einstein, H. Minkowski, H. Weyl, *Das Relativitätsprinzip*, Leipzig: Teubner ⁴1922 / Stuttgart: Teubner ⁷1974; Nachdruck: *The Principle of Relativity*, New York: Dover 1923 (in Engl.)
- G. Ludwig, *Wellenmechanik. Einführung und Originaltexte* (WTB 55), Akademie-Verlag, Berlin / Pergamon, Oxford / Vieweg, Braunschweig, ²1970
- H. Lübbig, *Das Wirkungsprinzip von Maupertuis und Feynmans Wegintegral der Quantenphase*, in: H. Hecht (Hrsg.), *Pierre Louis Moreau de Maupertuis. Eine Bilanz nach 300 Jahren*, Berlin: Berlin Verlag 1999, S.505ff.
- S. Lundqvist (Hrsg.), *Nobel Lectures in Physics 1971–1980*, Singapore: World Scientific 1991
- E. Mach, *Die Mechanik in ihrer Entwicklung* (hrsg. von R. Wahsner & H.-H. v. Borzeszkowski), Berlin: Akademie-Verlag 1988
- O. Madelung (Hrsg.), *Landolt-Börnstein Tables*, Bd. 17a, Heidelberg: Springer 1982
- O. Madelung, *Introduction to Solid-State Theory*, Berlin etc.: Springer ³1996
- N. Malebranche, *Die Wahrheit suchen*, in: *Gesammelte Werke*, St. Petersburg 1906 (in Russ.)
- L. Mandel & E. Wolf, *Optical coherence and quantum optics*, Cambridge etc: Cambridge Univ. Press 1995
- N. H. March, W. H. Young & S. Sampanthar, *The Many-Body Problem in Quantum Mechanics*, London: Cambridge University Press 1967; Nachdruck: New York: Dover 1995
- P. L. M. de Maupertuis, *Accord de différentes Loix de la Nature qui avoient jusqu'ici paru incompatibles* („Die Übereinstimmung der verschiedenen Gesetze der Natur, die man für unvereinbar hielt“), Lu à l' Académie des Sciences de Paris le 15 avril 1744; in: *Œuvres de Maupertuis*, Bd. IV, Lyon: Bruyset 1756, 1768, S.3–28
- P. L. M. de Maupertuis, *Loi de repos*, in: *Œuvres de Maupertuis*, Bd. IV, Lyon: Bruyset 1756, 1768
- P. L. M. de Maupertuis, *Essai de cosmologie, Système de la nature, Réponse aux objections de M. Diderot*, prés. par F. Azouvi, Paris 1984
- J. C. Maxwell, *On Faraday's lines of force*, Trans. Cambr. Phil. Soc. 10 (1855) 27ff., 1 (1856) 155ff.; dtsch.: *Über Faradays Kraftlinien* (Ostwalds Klassiker 69), Frankfurt: Deutsch ³1995/2001

- J. C. Maxwell, *On physical lines of force*, Phil. Mag. [4] 21 (1861) 161ff., 281ff., 338ff.; 23 (1862) 12ff., 85ff.; dtsh.: *Über physikalische Kraftlinien* (Ostwalds Klassiker 102), Frankfurt a. Main: Deutsch ³1995/2001
- J. C. Maxwell, *Dynamical Theory of the electromagnetic field*, Trans. Roy. Soc. CLV (1964), Pt. III; dtsh. in: R. A. R. Tricker, *Faraday und Maxwell*, 1974, S.292–306
- J. C. Maxwell, *A Treatise on Electricity & Magnetism*, Oxford: Clarendon 1891; Nachdruck: New York: Dover 1954 (2 Bde.); dtsh. in: R. A. R. Tricker, *Faraday und Maxwell*, 1974, S.239–261 (Kap.VI-VII)
- H. Minkowski, *Raum und Zeit*, 80. Vers. d. dtsh. Naturforscher u. Ärzte, Köln, 21.9.1908; Nachdruck in: *The Principle of Relativity*, New York: Dover 1923 (in Engl.)
- P. Mittelstaedt, *Klassische Mechanik* (BI-Taschenbücher), Mannheim: Bibl. Institut 1995
- J. Mehra & H. Rechenberg, *The Historical Development of Quantum Theory*, New York: Springer 1999f.; Bd. 1: *The Quantum Theory of Planck, Einstein, Bohr and Sommerfeld: Its Foundation and the Rise of Its Difficulties 1900–1925*; Bd. 2: *The Discovery of Quantum Mechanics 1925*; Bd. 3: *The Formulation of Matrix Mechanics and Its Modifications 1925–1926*; Bd. 4/1: *The Fundamental Equations of Quantum Mechanics 1925–1926*; Bd. 4/2: *The Reception of the New Quantum Mechanics 1925–1926*; Bd. 5: *Erwin Schrödinger and the Rise of Wave Mechanics*; Bd. 6: *The Completion of Quantum Mechanics 1926–1941; Epilogue: Aspects of the Further Development of Quantum Theory 1942–1999*
- J. Mertsching, *Theorie des Dielektrizitätstensors in Relaxationszeit-Approximation*, phys. stat. sol. 17 (1966) 799–806
- A. Messiah, *Quantum Mechanics*, New York: Wiley 1958 (2 Bde.); Nachdruck: New York: Dover 1999 (1 Bd.)
- H. Minkowski, *Raum und Zeit*, 80. Vers. d. dtsh. Naturforscher u. Ärzte, Köln, 21.9.1908; Phys. Zs. 10 (1909) 104ff.; Nachdruck in: H. A. Lorentz u.a., *Das Relativitätsprinzip*, V
- A. Montorsi, *The Hubbard Model*, Singapore: World Scientific 1992
- J. Moody, A. Shapere & F. Wilczek, *Adiabatic Effective Lagrangians*, in: Shapere & Wilczek, 1989, S.160–183
- O. Morsch, *Licht und Materie. Eine physikalische Beziehungsgeschichte*, Weinheim: Wiley-VCH 2003
- N. F. Mott, *The exclusion principle and aperiodic systems*, Proc. Roy. Soc. L. A 125 (1929) 220–230
- N. F. Mott, *The collision between two electrons*, Proc. Roy. Soc. L. A 126 (1930) 259–267
- N. F. Mott, *Conduction in polar crystals, pt.2*, Trans. Farad. Soc. 34 (1938) 500ff.
- N. F. Mott, *Metals, nonmetals and metal-nonmetal transitions: some recollections*, Rep. Progr. Phys. 47 (1984) 909–923
- N. F. Mott & H. Jones, *The Theory of the Properties of Metals and Alloys*, Oxford · London: Oxford University Press 1936
- N. Mukunda, L. O’Raifeartaigh & E. Sudarshan, *Characteristic noninvariance groups of dynamical systems*, Phys. Rev. Lett. 15 (1965) 1041ff.

- J. Naas & H. L. Schmid, *Mathematisches Wörterbuch*, Berlin: Akademie-Verlag / Leipzig: Teubner 1974 (2 Bde.)
- L. Natanson, *Über die statistische Theorie der Strahlung*, Phys. Z. 12 (1911) 659–666
- D. F. Nelson, *Electric, Optic, & Acoustic Interactions in Dielectrics*, New York etc.: Wiley 1979
- J. v. Neumann, *Wahrscheinlichkeitstheoretischer Aufbau der Quantenmechanik*, Gött. Nachr. (1927) 245–272
- J. v. Neumann, *Thermodynamik quantenmechanischer Gesamtheiten*, Gött. Nachr. (1927) 273–291
- J. v. Neumann, *Allgemeine Eigenwerttheorie Hermitescher Funktionaloperatoren*, Math. Ann. 102 (1929) 49–131
- J. v. Neumann, *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, Berlin: Springer 1932
- I. Newton, *De gravitatione et aequipondio fluidorum; Über die Gravitation ...* (lateinisch – deutsch), Frankfurt: Klostermann 1988
- I. Newton, *Philosophiae naturalis principia mathematica*, London 1687; dtsh.: *Mathematische Prinzipien der Naturlehre* (übers. u. hrsg. v. J. Ph. Wolfers), Berlin 1872; Nachdruck in: Hawking, *Die Klassiker der Physik*, 2004, S.637–958 (Bücher I und III); *Mathematische Grundlagen der Naturphilosophie* (übers. u. hrsg. v. Ed Dellian), Hamburg: Meiner 1988; *Die mathematischen Prinzipien der Physik* (neu übers. v. V. Schüller), Berlin · New York: de Gruyter 1999
- I. Newton, *The Principia. Mathematical Principles of Natural Philosophy* (A New Translation by I. Bernhard Cohen and Anne Whitman assisted by Julia Buden, Preceded by *A Guide to Newton's Principia* by I. Bernhard Cohen), Berkeley u.s.w.: Univ. Calif. Press 1999
- I. Newton, *Opticks*, London ²1704; dtsh.: *Optik* (Ostwalds Klassiker 96), Thun · Frankfurt am Main: Deutsch ²1996; Nachdruck der 4.Aufl.: New York: Dover 1952
- E. Noether, *Invariante Variationsprobleme*, Gött. Nachr. (1918) 235–257
- W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik*, Bd.5, *Quantenmechanik*; Bd.7, *Viel-Teilchen-Theorie*, Leipzig: Teubner ²2001
- L. W. Nordheim, *Zur Theorie der thermischen Emission und der Reflexion von Elektronen an Metallen*, Z. Phys. 46 (1928) 833–855
- Y. Ohnuki & S. Kamefuchi, *Quantum Field Theory and Parastatistics*, Berlin: Springer 1982
- J. R. Oppenheimer, *On the quantum theory of electronic impacts*, Phys. Rev. 32 (1928) 361–376
- J. L. Pankove, *Optical Processes in Semiconductors*, Englewood Cliffs: Prentice-Hall 1971; korr. Nachdruck: New York: Dover 1975
- H. Paul, *Photonen. Eine Einführung in die Quantenoptik* (Teubner Studienbücher), Stuttgart · Leipzig: Teubner ²1999
- W. Pauli, *Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur der Spektren*, Z. Phys. 31 (1925) 765–783; Nachdruck in: D. ter Haar, *Quantentheorie*, 1970, S.229–253

- W. Pauli, *Quantentheorie*, in: H. Geiger & K. Scheel (Hrsg.), *Handbuch der Physik*, Bd.23, Berlin: Springer 1926, S.1–278; Nachdruck in: S. Flügge (Hrsg.), *Handbuch der Physik*, Bd. V/1, Berlin: Springer: 1958, S.136ff.
- W. Pauli, *Die Quantenmechanik des magnetischen Elektrons*, Zs. Phys. 43 (1927) 601–623
- W. Pauli, *Die allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik*, in: H. Geiger & K. Scheel (Hrsg.), *Handbuch der Physik*, Bd.24/1, Berlin: Springer ²1933
- W. Pauli, *The Connection between Spin and Statistics*, Phys. Rev. 58 (1940) 716–722
- W. Pauli, *Exclusion principle and quantum mechanics* (Nobelpreis-Vortrag 1946); in: G. Ekspong (Hrsg.), *Nobel Lectures in Physics Vol 3 1942–1962*, 1998, S.27–43
- W. Pauli, *Wave Mechanics* (Pauli Lectures on Physics 5), Cambridge, Mass.: MIT Press 1973; Nachdruck: New York: Dover 2000
- W. Pauli, *Selected Topics in Field Quantization* (Pauli Lectures on Physics 6), Cambridge, Mass.: MIT Press 1973; erweitert. Nachdruck: New York: Dover 2000
- L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals*, Ithaka (N.Y.): Cornell Univ. Press ³1960
- R. E. Peierls, *Quantum Theory of Solids*, Oxford: Clarendon 1955
- S. I. Pekar, *Lokale Quantenzustände des Elektrons im idealen Ionenkristall*, J. eksp. teor. fiz. 16 (1946) 341ff. (in Russ.)
- S. I. Pekar, *Theory of Electromagnetic Waves in a Crystal with Excitons*, Phys. Chem. Solids 5 (1958) 11ff.
- S. I. Pekar, *Dispersion of Light in the Exciton Absorption Region in Crystals*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 34 (1958) 1176ff. (in Russ.)
- F. Penzlin, *Die Methode der Feynmanschen Graphen*, Fortschr. Phys. 25 (1962) 358ff.
- A. Perelomov, *Generalized Coherent States and Their Applications*, Heidelberg · Berlin: Springer 1986
- S. Perlis, *Theory of Matrices*, Reading (MA): Addison-Wesley 1952; Nachdruck: New York: Dover 1991
- J. Piprek, *Semiconductor Optoelectronic Devices. Introduction to Physics and Simulation*, New York: Academic Press 2003
- M. Planck, *Zur Theorie des Gesetzes der Energieverteilung im Normalspektrum*, Verh. dtsh. Phys. Ges. Berlin 2 (1900) 237ff. (Vortrag v. 14.12.1900); Nachdrucke in: M. Planck, *Die Ableitung der Strahlungsgesetze*, 1997, Nr. V; G. Ludwig, *Wellenmechanik*, 1970, S.107–117
- M. Planck, *Über das Gesetz der Energieverteilung im Normalspektrum*, Ann. Phys. 4 (1901) 553–563; Nachdruck in: M. Planck, *Die Ableitung der Strahlungsgesetze*, 1997, Nr. VI
- M. Planck, *Eine veränderte Formulierung der Quantenhypothese*, Berl. Ber. (1914) 918–923
- M. Planck, *Der Ursprung und die Entwicklung der Quantentheorie* (Nobelpreis-Vortrag 1919); in: G. Ekspong (Hrsg.), *Nobel Lectures in Physics Vol 1 1901–1921*, 1998

- M. Planck, *Die Ableitung der Strahlungsgesetze. Sieben Abhandlungen aus dem Gebiete der elektromagnetischen Strahlungstheorie*, Leipzig: Geest & Portig / Frankfurt a. Main · Thun: Deutsch ³1997 (Ostwalds Klassiker 206)
- S. D. Poisson, *Traité de Mécanique*, Paris 1811, ²1833
- E. I. Rashba & M. D. Sturge, *Excitons*, Amsterdam: North-Holland 1982
- Baron Rayleigh (J. W. Strutt), *The theory of sound*, New York: Dover ²1945
- B. Riemann, *Über die Hypothesen, welche der Geometrie zugrunde liegen* (Habilitationsschrift, 1854); in: Abh. Königl. Ges. Wiss. Göttingen 13 (1868); *Gesammelte mathematische Werke*, Leipzig: Teubner ²1892, S.272ff.; Kopie: <http://www.emis.de/classics/Riemann/Geom.pdf>
- B. Riemann, *Über die Darstellbarkeit einer Function durch eine trigonometrische Reihe* (Habilitationsschrift, 1854); in: Abh. Königl. Ges. Wiss. Göttingen 13 (1868); Kopie: <http://www.emis.de/classics/Riemann/Trig.pdf>
- W. Ritz, *Über ein neues Gesetz der Serienspektren (Vorläufige Mitteilung)*, Phys. Zs. 9 (1908) 521–529
- R. Rompe & H.-J. Treder, *Zur Grundlegung der theoretischen Physik. Beiträge von H. v. Helmholtz und H. Hertz* (WTB 284), Berlin: Akademie-Verlag 1984
- E. Rosencher & B. Vinter, *Optoelectronics*, Cambridge: Cambridge Univ. Press 2002
- A. E. Ruark, *The Zeeman effect and Stark effect of hydrogen in wave mechanics: the force equation and the virial theorem in wave mechanics*, Phys. Rev. 31 (1928) 533–538
- G. Schaefer, *Das Elementare im Komplexen. Neue Wege zu einer fächerübergreifenden Allgemeinbildung um die Jahrtausendwende*, Frankfurt am Main u.s.w.: Lang 1997
- W. Schäfer & J. Treusch, *An Approach to the nonequilibrium theory of highly excited semiconductors*, Z. Phys. B 63 (1986) 407ff.
- G. Scharf, *From Electrostatics to Optics*, Berlin etc.: Springer 1994
- W. P. Schleich, *Quantum Optics in Phase Space*, Berlin: Wiley-VCH 2000
- D. I. J. & M. Millar, *The Cambridge Dictionary of Scientists*, Cambridge: Cambridge University Press 1996
- S. Schmitt-Rink, D. S. Chemla & D. A. B. Miller, *Linear and nonlinear optical properties of semiconductor quantum wells*, Adv. Phys. 38 (1989) 89ff.
- E. Schmutzer, *Symmetrien und Erhaltungssätze der Physik* (WTB 75), Berlin: Akademie-Verlag / Oxford: Pergamon / Braunschweig: Vieweg 1972
- J. Schnakenberg, *Thermodynamik und Statistische Physik*, Neuhaus: Wiley-VCH ²2002
- J. R. Schrieffer, *Superconductivity*, New York: Benjamin 1964
- E. Schrödinger, *Quantisierung als Eigenwertproblem. Erste Mitteilung*, Ann. Phys. [4] 79 (1926) 361–376; Nachdrucke in: *Abhandlungen zur Wellenmechanik*, 1927, S.1–16; G. Ludwig, *Wellenmechanik*, 1970, S.108–122; *Zweite Mitteilung*, 489–527; Nachdrucke in: *Abhandlungen zur Wellenmechanik*, S.17–55; G. Ludwig, *Wellenmechanik*, S.122–145; *Dritte Mitteilung: Störungstheorie, mit Anwendung auf den Starkeffekt der Balmerlinien*, 80 (1926) 437–490; Nachdruck in: *Abhandlungen zur Wellenmechanik*, S.85–138; *Vierte Mitteilung*, 81 (1926) 109–139;

- Nachdrucke in: *Abhandlungen zur Wellenmechanik*, S.139–169, G. Ludwig, *Wellenmechanik*, S.174–193
- E. Schrödinger, *Über das Verhältnis der Born-Heisenberg-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen*, Ann. Phys. [4] 79 (1926) 734–756; Nachdrucke in: *Abhandlungen zur Wellenmechanik*, 1927, S.62–84, G. Ludwig, *Wellenmechanik*, 1970, S.146–173
- E. Schrödinger, *Der stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik*, Naturwiss. 14 (1926) 664–666; Nachdruck in: *Abhandlungen zur Wellenmechanik*, 1927, S.56–61
- E. Schrödinger, *Abhandlungen zur Wellenmechanik*, Leipzig: Barth 1927
- E. Schrödinger, *Über Heisenbergs Unbestimmtheitsbeziehung*, Preuß. Ak. Wiss., Phys.-Math. Abt. XIX, 1930, 296–303; Nachdruck (engl.): *About Heisenberg Uncertainty Relation*, Bulg. J. Phys. 26 (1999) 193–203; arxiv:quant-ph/9903100 v2 15 Jun 2000
- E. Schrödinger, *The fundamental idea of wave mechanics* (Nobelpreis-Vortrag 1933); in: G. Eksping (Hrsg.), *Nobel Lectures in Physics Vol 2 1922–1941*, 1998, S.305–316
- E. Schrödinger, *Discussion of Probability Relations between Separated Systems*, Proc. Cambridge Philos. Soc. 31 (1935) 555–563
- E. Schrödinger, *The Factorization of the Hypergeometric Equation*, Proc. Roy. Irish Acad. A47 (1941) 53–54; Kopie: arXiv:physics/9910003
- E. Schrödinger, *Statistische Thermodynamik*, Leipzig: Barth 1952
- J. R. Schütz, *Das Prinzip der absoluten Erhaltung der Energie*, Gött. Nachr., Math.-phys. Kl. (1897) 110ff.
- F. Schwabl, *Quantenmechanik* (Springer-Lehrbuch), Berlin u.s.w.: Springer ⁴1993 (*QM I*); *Quantenmechanik für Fortgeschrittene* (Springer-Lehrbuch), Berlin u.s.w.: Springer 1997 (*QM II*)
- K. Schwarzschild, *Zur Elektrodynamik. 1.-3.*, Nachr. Königl. Ges. Wissensch. Göttingen. Math.-phys. Klasse (1903) 126–131, 132–141, 245–278
- J. Schwinger (Hrsg.), *Selected Papers on Quantum Electrodynamics*, New York: Dover 1958
- K. Seeger, *Semiconductor Physics*, Heidelberg u.s.w.: Springer ⁹2004
- J. Shah, *Ultrafast Spectroscopy of Semiconductors and Semiconductor Nanostructures*, Berlin etc.: Springer ²1999
- A. Shapere & F. Wilczek, *Geometric Phases in Physics* (Adv. Ser. Math. Phys. 5), Singapore etc.: World Scientific 1989
- B.G. Sidharth & A. de Angelis (Eds.), *Frontiers of Fundamental Physics. Proceedings of the Sixth International Symposium "Frontiers of Fundamental and Computational Physics"*, Udine, Italy, 26–29 September 2004, Springer 2006
- M. P. Silverman, *More Than One Mystery. Explorations in Quantum Interference*, New York etc.: Springer 1995
- K. Simonyi, *Kulturgeschichte der Physik*, Leipzig u.s.w.: Urania 1990
- J. C. Slater, *The Theory of Complex Spectra*, Phys. Rev. 34 (1929) 1293–1322
- J. C. Slater & G. F. Koster, *Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem*, Phys. Rev. 94 (1954) 1498–1524

- A. Sommerfeld, *Atombau und Spektrallinien*, Braunschweig: Vieweg 1919–29 (2 Bände)
- A. Sommerfeld, *Vorlesungen über theoretische Physik, Bd. I Mechanik*, Leipzig 1955 / Thun · Frankfurt a. Main: Deutsch, ⁸1994; *Bd. III Elektrodynamik*, Frankfurt a. Main: Deutsch ⁴2001
- A. Sommerfeld & H. Bethe, *Elektronentheorie der Metalle*, in: H. Geiger & K. Scheel (Hrsg.), *Handbuch der Physik* XXIV/2, Berlin: Springer 1933
- K. S. Song & R. T. Williams, *Self-trapped excitons*, Berlin: Springer 1993
- A. Speiser, *L. Euler. Das Relativitätsprinzip und die Grundlagen der Klassischen Mechanik*, in: A. N. Bogoljubow (Hrsg.), *Mechanik und Physik der zweiten Hälfte des 19. Jahrhunderts*, 1978, S.134–140 (in Russ.)
- J. Stachel (Hrsg.), *Einsteins Annus mirabili. Fünf Schriften, die die Welt der Physik revolutionierten* (rororo Sachbuch 60934), Reinbek: Rowohlt 2001
- E. V. Stefanovich, *Relativistic Quantum Dynamics. A Non-Traditional Perspective on Space, Time, Particles, Fields, and Action-at-a-Distance*, 2004/2005, arXiv:physics/0504062 v2
- H. Stolz, *Einführung in die Vielelektronentheorie der Kristalle*, Berlin: Akademie-Verlag 1974
- M. Stone, *The Physics of Quantum Fields*, New York: Springer 2000
- D. J. Struik, *Abriss der Geschichte der Mathematik*, Berlin: Dtsch. Verlag d. Wiss. ³1965
- D. Suisky & P. Enders, *Leibniz' foundation of mechanics and the development of 18th century mechanics initiated by Euler*, in: H. Poser (Ed.), *Nihil sine ratione*, Proc. VII Intern. Leibniz Congress, Berlin 2001
- D. Suisky & P. Enders, *On the derivation and solution of the Schrödinger equation. Quantization as selection problem*, Proc. 5th Int. Symp. *Frontiers of Fundamental Physics*, Hyderabad (India), 8.-11. Jan. 2003 (im Druck)
- I. Szabó, *Geschichte der mechanischen Prinzipien und ihrer wichtigsten Anwendungen* (Wissenschaft und Kultur 32), Basel u.s.w.: Birkhäuser ³1987
- E. Teller, *The Jahn-Teller Effect – Its History and Applicability*, *Physica* 114A (1982) 14–18
- W. Thompson & P. G. Tait, *Treatise on natural philosophy*, Cambridge: Cambridge Univ. Press 1879
- S. W. Tjablikow, *Quantentheoretische Methoden des Magnetismus*, Leipzig: Teubner 1968
- O. Toeplitz, *Zur Theorie der quadratischen und bilinearen Formen von unendlich vielen Veränderlichen. I. Teil: Theorie der L-Formen*, *Math. Ann.* 70 (1911) 351–376
- R. C. Tolman, *The Principles of Statistical Mechanics*, Oxford: Oxford Univ. Press 1938; Nachdruck: New York: Dover 1979
- Y. Toyozawa, *Optical Processes in Solids*, Cambridge etc.: Cambridge Univ. Press 2003
- H.-J. Treder (Hrsg.), *Newton-Studien*, Berlin: Akademie-Verlag 1978
- R. A. R. Tricker, *Die Beiträge von Faraday und Maxwell zur Elektrodynamik* (WTB 95), Berlin: Akademie-Verlag 1974

- C. Truesdell, *Essays in the History of Mechanics*, New York etc.: Springer 1968
- A. M. Tselik, *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*, Cambridge: Cambridge University Press 1996
- F. Überweg, *Grundriß der Geschichte der Philosophie*, 3. Teil: *Die Philosophie der Neuzeit bis zum Ende des XVIII. Jahrhunderts* (völlig neu bearb. v. M. Frischeisen-Köhler & W. Moog), Berlin: Mittler ¹²1924
- J. Violle, *Lehrbuch der Physik*, 2 Bde. (Bd. 1: Mechanik; Bd. 2: Akustik und Optik), Berlin: Springer 1892–93
- Voltaire, *Éléments de philosophie de Newton, mis à la portée de tout le monde*, Amsterdam: Ledet 1738; in: *Œuvres complètes de Voltaire*, Bd. 31, De l'imprimerie de la société littéraire-typographique 1784
- Voltaire, *Sammlung verschiedener Briefe des Herrn von Voltaire, die Engländer und andere Sachen betreffend*, Jena 1747
- B. L. van der Waerden, *Sources of Quantum Mechanics*, Amsterdam: North-Holland 1967; Nachdruck: New York: Dover 1968
- B. L. van der Waerden, *Eulers Herleitung des Drehimpulssatzes*, in: *Leonhard Euler 1707–1783*, 1983, S.271–282
- G. H. Wannier, *Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals*, Phys. Rev. 52 (1937) 191–197
- H. Weber, *Über die Integration der partiellen Differentialgleichung ...*, Math. Ann. I (1869) 1–36
- S. Weinberg, *The search for unity. Notes for a history of quantum field theory*, Daedalus 106 (1977) 17ff.
- S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields*, Cambridge: Cambridge Univ. Press 2005 (3 Bde.)
- C. F. v. Weizsäcker, *Komplementarität und Logik*, Naturwiss. 42 (1955) Nr. 19/20; in: Ders., *Zum Weltbild der Physik*, 1990, S.281–331
- C. F. v. Weizsäcker, *Zum Weltbild der Physik*, Stuttgart: Hirzel ¹³1990
- C. F. v. Weizsäcker, *Aufbau der Physik*, München: dtv ⁴2002 (dtv 33084)
- G. Wentzel, *Einführung in die Quantentheorie der Wellenfelder*, Leipzig: Franz Deuticke 1943
- R. Westfall, *Isaac Newton*, Heidelberg u.s.w.: Spectrum 1996
- H. Weyl, *Gravitation und Elektrizität*, S.-Ber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss. Berlin (1918) 465–480
- H. Weyl, *Raum – Zeit – Materie. Vorlesungen über allgemeine Relativitätstheorie*, Berlin: Springer 1918
- H. Weyl, *Gruppentheorie und Quantenmechanik*, Leipzig: Hirzel 1928; New York: Dover 1950 (Übers. der 2., durchgeseh. Aufl. 1931)
- J. A. Wheeler & W. H. Zurek (Hrsg.), *Quantum Theory and Measurement*, Princeton: Princeton Univ. Press 1983
- E. T. Whittaker & G. N. Watson, *A Course of Modern Analysis*, Cambridge: Cambridge Univ. Press ⁴1927; Neuaufl. 1996 (Cambr. Math. Libr. Ser.)
- E. T. Whittaker, *A Treatise on the Analytical Dynamics of Particles and Rigid Bodies*, Cambridge: Cambridge Univ. Press ⁴1947

- G. Wiedemann & R. Franz, *Über die Wärme-Leitungsfähigkeit der Metalle*, Ann. Phys. Chem. 89 (1853) 497ff.; Nachdruck in: A. Wehnelt (Hrsg.), *Über die Wärme-Leitfähigkeit der Metalle. Arbeiten von G. Wiedemann und R. Franz* (Ostwald's Klassiker 222), Leipzig 1927
- C. E. Wieman, *The creation and study of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapour*, Phil. Trans. R. Soc. L. A 355 (1997) 2247ff.
- E. P. Wigner, *Über nichtkombinierende Terme in der neueren Quantentheorie. Zweiter Teil*, Z. Physik 40 (1927) 883–892
- E. Wigner, *Über die elastischen Eigenschwingungen symmetrischer Systeme*, Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, Math. Phys. Kl. 133 (1930); Nachdruck in: A. P. Cracknell, *Angewandte Gruppentheorie*, 1971, S.223–236
- E. Wigner, *Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren*, Braunschweig: Vieweg 1931
- E. P. Wigner, *Über die Operation der Zeitumkehr*, Nachr. Akad. Wiss. Göttingen, Math.-Physik. (1932) 546–559
- E. P. Wigner, *Events, laws of nature, and invariance principles* (Nobelpreis-Vortrag 1963); in: G. Eksping (Hrsg.), *Nobel Lectures in Physics Vol 4 1963–1980*, 1998, S.6–17
- E. P. Wigner & F. Seitz, *On the Constitution of Metallic Sodium, I*, Phys. Rev. 43 (1933) 804–830, *II*, 46 (1934) 509–524
- F. Wilczek, *Magnetic flux, angular momentum and statistics*, Phys. Rev. Lett. 48 (1982) 1144ff.
- F. Wilczek, *Quantum mechanics of fractional-statistics particles*, Phys. Rev. Lett. 49 (1982) 957ff.
- F. Wilczek & B. Devine, *Longing for the Harmonies. Themes and Variations from Modern Physics*, New York · London: Norton 1988
- U. Woggon, *Optical properties of quantum dots*, Berlin: Springer 1996
- C. N. Yang, *The law of parity conservation and other symmetry laws of physics* (Nobelpreis-Vortrag 1957); in: G. Eksping (Hrsg.), *Nobel Lectures in Physics Vol 3 1942–1962*, 1998, S.393–403
- P. Yip & B. P. Agrawal, *Theory and Applications of Toeplitz matrices*, CRL Report, 1979
- W. Yourgrau & S. Mandelstam, *Variational Principles in Dynamics and Quantum Theory*, New York: Dover 1979
- A. Zee, *Fearful Symmetry. The Search for Beauty in Modern Physics*, Princeton: Princeton Univ. Press ²1999
- A. Zeilinger „Ich dachte mir nicht viel dabei“. *Max Planck und die Geburt der Quantenphysik vor hundert Jahren*, in: FAZ v. 9. Dez. 2000
- A. Zeilinger, *Quanten-Teleportation*, Spektrum d. Wiss. Dossier 1/2003, 22–31
- A. Zeilinger, *Einsteins Schleier. Die neue Welt der Quantenphysik*, München: Beck ²2003
- R. Zimmermann, *Many-Particle Theory of Highly Excited Semiconductors* (Teubner-Texte zur Physik 18), Leipzig: Teubner 1988
- D. Zwillinger, *Handbook of Differential Equations*, San Diego etc.: Academic Press ²1992

Personenverzeichnis

- Abel, Niels Henrik 197
Abramowitz 26, 79, 80, 83
Achieser 114, 221
Agrawal 28
Aharonov, Yakir 207
Ahn, D. 191, 192
d'Alembert, Jean Le Rond 4, 10, 14,
16, 17, 19, 31, 33, 157
Alferov XII
Allen 147, 191
Altmann, S.L. 103
Anderson, Phillip Warren 108, 140,
179
Audretsch 121
Auger, Pierre Victor 182
Avogadro, Amadeo 138
- Bach, A. 114, 122, 221
Bardeen, John 143, 198
Bargmann, V. 131
Barut 83
Bednorz, Johannes Georg 179
Bell 218
Bennett 172
Bentley, Richard 31
Berestezki 114, 221
Berezin 125
Berg 28
Bernoulli, Daniel 31, 36, 37, 39, 91, 158
Berry 100
Bersuker 142
Bethe, Hans Albrecht 106, 108, 109
Bimberg XII
Bir 198
Bleuler, Ernst 170
Bloch, Felix 18, 104, 105, 109
Blood 190, 193, 194
Bogoljubow, N.N. 136, 143, 179
- Bohm, David Josef 83, 100, 116, 207,
219, 218
Bohr, Niels Hendrik VII, X, 2, 18, 40,
61, 67, 69, 82, 84, 134
Boltzmann, Ludwig Eduard 149, 160
Bonitz 186
Bopp, Fritz IX
von Borczeskowski 17
Born, Max 3, 16, 27, 54, 58, 120, 121,
127, 130, 156, 166, 197, 215, 217,
218
Borzeszkowski, H.-H. v. 31
Bouckaert 106
Bouwmeester 172
Bräuer 218
Brassard 172
Brauer 199, 201
Bravais, Auguste 104
Brenneke 37
Briggs 219
Brillouin, Léon 106
de Broglie 3, 5, 7, 39, 57–59, 86, 128,
212, 218
Bruß 121, 172
Bruder 179
Burdett 142
- Calais, J.-L. 194
Carnot, Sadi 39
Carruthers 131
Chandrasekhar, S., 13
Chapman, Sydney 95
Chemla 186
Chow 186, 190, 193, 194
Chuang 184
Clausius, Rudolf 86
Cochran 141
Cohen, I.B. 13, 31

- Cohen-Tannoudji 139, 172, 208
 Collins 140
 Condon 57
 Cook 125
 Cooper, Leon Neil 143, 181
 Cornell, Eric A. 140, 141
 Coulomb, Charles Augustin 173
 Cowley 141
 Cowling, T.G. 95
 Cracknell, A.P. 97, 103

 Daumer 218
 Debye, Peter Joseph Wilhelm 139
 Descartes, René 14, 15, 17, 32, 37
 Detlaf 206
 Devine, B. 34
 Dexter, D.L. 184, 202
 Dirac, Paul Adrien Maurice 61, 90,
 117, 119, 134, 150, 151, 156, 173,
 203
 Donley 140
 Dothan 83
 Dresselhaus 185
 Drude, Paul 6, 176
 Duck 71
 Dugas VII, 39
 Dupont-Roc 139, 172, 208
 Dürr 218, 219
 Dyson, Freeman John 94, 95

 Eberly 147, 191
 Ehrenreich 108
 Einstein, Albert 1–4, 8, 48, 50, 58, 61,
 83, 84, 117, 121, 128, 140, 149, 170,
 214, 217, 221, 222
 Ekert 172
 Enders, P. XIII, 8, 36, 51, 54, 108, 114,
 122, 142, 190, 201, 221
 Epikur 31
 Euler, Leonhard VII, VIII, 1, 4, 10, 11,
 14, 16–18, 22, 30–34, 36–39, 43, 47,
 62, 83, 116, 119, 159, 170, 211, 212,
 221
 Ewarestow 107

 Fahrner XII
 Faraday, Michal 220
 Faraggi 34
 Fazio 179

 Fellmann 11
 Fermat, Pierre de 39
 Fermi, Enrico 117, 150
 Ferreira 199
 Feynman, Richard Phillips 95, 201,
 203
 Fick 102, 125, 157, 166
 Fock, Wladimir Alexandrowitsch 125,
 131
 Fourier, Jean-Baptiste Joseph Baron de
 72
 Fowler 117
 Franck 48
 Franz, Rudolph 176
 Frenkel, Jakow Iljitsch 180
 Fritsche, L. 172, 203
 Fröhlich, Herbert 108, 198
 Fulde 174

 Galilei, Galileo 14, 37, 41
 Gantmacher 28
 Gauß, Carl Friedrich 214
 Gell-Mann 83
 Gibbs, Josiah Williard 222
 Girndt 190, 193, 194
 Glauber, Roy J. 131
 Glazer 222
 Gold, A. 103
 Goldstein 218
 Görnitz 221
 Gould 28, 75, 158
 Graßmann, H. 216, 217
 Green, Georg 95
 Greiner, W. 97, 127, 132, 139, 161, 171,
 172, 222
 Griffin 140
 Grigor'jan 37
 Grundmann XII
 Grynberg 139, 172, 208
 Gupta, S.N. 170, 171

 ter Haar VII, 24, 157
 Haken, H. XI, 83, 135, 141, 148, 157,
 160, 166, 172, 181, 189, 198, 208
 Hall 131
 Hall, Edwin Herbert 153
 Hamel, G. 41, 46
 Hamilton, William Rowan 4, 5, 8, 18,
 22, 30, 39, 40, 60

- Harrison, Walter Ashby 108, 138, 141,
 168, 169, 201
 Hartree, Douglas Rayner 173
 Haug 186
 Heisenberg, Werner Karl VII, 2, 5, 40,
 54, 57–59, 61, 67, 82, 116, 117, 119,
 120, 127, 128, 133, 156, 166, 212,
 217
 Heitler 120, 156, 170, 208
 Helmholtz, Hermann Ludwig Ferdinand
 von VIII, 9, 19, 36, 39–42, 44, 57,
 60, 63–65, 77, 83, 102, 113
 Hemholz 43
 Henderson 195
 Heraklit 37
 Hermite, Charles 79
 Hertz 48
 Hetterich XII, 186
 Hilbert, David 57, 125
 Höhler 143
 Holland 218
 Hooke, Robert 19
 Huang, K. 27
 Hubbard, J. 178
 Hückel, Ernst 108
 Hund, Friedrich 76
 Husimi 135
 Huygens, Christian 13, 14, 17, 39, 54,
 170

 Il'inskii 152
 Ilfrich XII
 Imbusch 195

 Jacobi, Carl Gustav Jacob 4, 17, 30,
 37, 60
 Jahn, Hermann Arthur 142
 Jahnke 190, 193, 194
 Jammer VII, 57, 84, 122
 Jaworski 206
 Jettmann, B. 172, 203
 Joffe, Abram Fjodorowitsch 107
 Jones, W. 106, 174, 180, 198
 Jordan, P. XII, 48, 54, 58, 120, 127,
 130, 134, 145, 146, 156, 175, 221
 Joule, James 39

 Kaganow 139
 Kalt XII, 186

 Keldysh 152
 Kennard 131
 Kepler, Johannes 23, 132
 Ketterle, Wolfgang 140, 141
 Kirsanow 37
 Klauder 131
 Klein, O. 130, 175
 Knox, R.S. 103, 184, 202
 Koch 186, 190, 193, 194
 Kohn 141, 143
 Koizumi 100, 116
 Kolmogoroff, Andrej Nikolajewitsch
 95
 Konopinski 220
 Koster 107, 108
 Kowaljow 37
 Kramers, Hendrik Antoon 105
 Kronig, R. de Laer 71
 Kugo 100
 Kuhn 135, 136, 155, 170, 221
 Kummer, Ernst Eduard 79

 Lagrange, Joseph-Louis de 4, 14, 17,
 19, 22, 37, 39, 40
 Landau, Lew Dawidowitsch VII, 47,
 71, 86, 151, 196, 202, 221
 Laplace, Pierre Siman Marquis de 10,
 16, 37
 Larmor 204
 Laue, Max von 39
 Laughlin, Robert B. 116, 138
 Ledentsov XII
 Lee 142, 198
 Legendre, Adrien Marie 22, 37
 Leibniz, Gottfried Wilhelm Freiherr von
 14, 15, 17, 30, 37–40, 42, 49, 61, 83,
 122, 128
 Leinaas 116
 Lenz, Emil 39
 Lewin 107
 Lewis, Gilbert Newton 170
 Lie, Marius Sophus 148
 Lieb 178
 Löwdin, Per-Olov 194
 Lifschitz, E.M. VII, 47, 71, 86
 Lindberg 186
 Liouville, Joseph 151
 Lipschitz 102
 London 120, 140

- Longair, Malcolm 48, 161
 Lorentz, Hendrik Antoon 36, 102, 161, 203, 204
 Lorenz, Ludvig V. 204
 Low 198
 Ludwig 57

 Mach, Ernst VII, 14, 39, 42
 Madelung 108, 193
 Malebrauche, Nicole 34
 Mandel 121, 172, 191, 221
 Mandelstam 22, 38, 194
 March, N.H. 106, 174, 180, 198, 203
 Matone 34
 Maupertuis, Pierre Louis Moreau de 9, 10, 14, 32, 37
 Maxwell, J.C. XII, 160, 161, 220
 Mehra 28, 57, 118, 119, 124, 182
 Mertsching 188, 190
 Messiah 61, 208
 Miller 186
 Minkowski 42
 Mittelstaedt, P. 36
 Montorsi 178
 Moody 197
 Morsch 121, 140
 Mostafazadeh 100, 116
 Mott, Sir Nevill Francis 179
 Mukunda 83
 Müller, Karl Alex 179
 Myrheim 116

 Naas, J. 97
 Natanson, L. 124
 Ne'eman 83
 Nelson 21, 196, 204
 Nemorarius, Jordanus 46
 Neumann, John von 97, 125, 151
 Newton, Sir Isaac 4, 13–17, 30–32, 37, 40, 47, 62, 98, 170, 212, 221
 Nieto 131
 Nikolajewitsch, Andrej 95
 Niu 100, 116
 Noether, Emmy 97
 Nolting 8, 72, 125, 179, 199
 Nordheim 76

 Onnes, Kamerlingh 2
 Oppenheimer, Julius Robert 117, 197

 O'Raifeartaigh 83

 Pankove 182
 Parmenides 37
 Paul, H. 121, 170, 172, 221
 Pauli, Wolfgang 61, 91, 115, 117–119, 121, 146, 148, 171, 221
 Pauling, Linus Carl 107
 Peierls, Sir Rudolf Ernest 142, 182, 221
 Pekar 195, 208
 Penzlin 201
 Perelomov 131
 Perlis 28
 Pikus 198
 Pines 198
 Piprek 184
 Planck, Max Karl Ernst Ludwig 1–3, 57, 61, 84, 123, 156, 164, 170
 Podolsky 121
 Poisson, Siméon Denis 18
 Poncelet, Jean Victor 39

 Rashba 184
 Rechenberg 28, 57, 118, 119, 124, 182
 Reinhardt, J. 97, 127, 132, 161, 171, 172
 Riemann, Bernhard 158, 214
 Ritz, Walter 25
 Rosen 121
 Rosencher 184
 Rost 219
 Ruark 86

 Sampanthar 203
 Sargent III 186
 Schäfer 186
 Schleich 10, 149, 164, 172, 208
 Schmid, H.L. 97
 Schmitt-Rink 186
 Schmutzer, E. 97
 Schnackenberg, J. 114, 136, 140
 Schön 179
 Schrieffer, John Robert 143
 Schrödinger, Erwin IX, X, 2, 3, 5, 7–9, 22, 40, 55, 57–60, 62, 67, 69, 73, 76–78, 80, 81, 83, 87, 88, 92, 94, 96, 120, 121, 124, 127, 128, 131, 134, 155, 166, 211, 214, 217, 218, 222
 Schütz, J.R. 41

- Schwabl, F. 83, 87, 127, 136, 171, 207, 213
 Schwarzschild, Karl 220
 Seeger XII
 Segal, I. 131
 Seitz 108
 Shah 186, 188
 Shapere 55, 100, 114, 116, 197
 Sherrington 141, 143
 Silverman 121
 Simonyi, K. 15, 17, 19, 46, 54, 57
 Slater, John Clark 107, 108, 174
 Smoluchowski 106
 Smowton 190, 193, 194
 Snoke 140
 Sommerfeld, Arnold Johannes Wilhelm 16, 39, 50, 61, 108, 160, 161, 194, 214, 220
 Song 180
 Speiser 11
 Stachel 50
 Stefanovich 139
 Stegun 26, 79, 80, 83
 Stoler 136
 Stolz, H. 180, 188
 Stone, M. XI
 Streitwolf 199
 Stringari 140
 Strnad 135, 136, 155, 170, 221
 Strutt, John William (Lord Rayleigh) 77
 Sturge 184
 Sudarshan 83, 131
 Suisky XIII, 8, 36
 Szabó 38, 39
 Tait, P.G. 27
 Teller, Edward 142
 Thompson, William (Lord Kelvin) 27
 Tjablikow, W. 132, 143
 Toeplitz, Otto 28
 Tolman 151
 Treusch 186
 Tricker 161
 Truesdell, Clifford Ambrose 14
 Tsvelik, A.M. XI
 Tumulka 218
 Turnbull 108
 Vinter 184
 Voltaire, François Marie Arouet de 17
 Waerden, van der 11
 Wachsner 17, 31
 Wannier, Gregory H. 106, 184
 Wark 222
 Watson 81
 Weber, Heinrich 78
 Weinberg, Steven 155, 217
 Weizäcker, Carl Friedrich Freiherr von 15, 67
 Wenzel, W. 119, 166
 Westfall, R. 31
 Weyl, Hermann 40, 100, 114, 127, 161
 Whittaker, Sir Edmund Taylor 20, 39, 47, 78, 81
 Wiedemann, Gustav Heinrich 140, 176
 Wieman, Carl E. 141
 Wigner, Eugene Paul 9, 27, 54, 96, 97, 105, 106, 145, 146
 Wilczek, Frank 34, 55, 100, 114, 116, 197
 Williams 180
 Woggon 186
 Wolf 121, 172, 191, 221
 Wu 178
 Yang, C.N. 96
 Yip 28
 Young, Thomas 39, 158, 203
 Yourgrau 22, 38, 194
 Zanghi 218
 Zee, A. 98, 103
 Zeilinger 4, 121, 172
 Zimmermann 184
 Zwanziger 100, 116
 Zwilling 71

Sachverzeichnis

- Absorptionskoeffizient 193
Aharonov-Bohm-Effekt 103, 116, 161, 207, 220
Akausalität 216
Änderungsgleichung 36
Anregung, parametrische 25, 26, 214
anti-crossing 210
Anti-Vertauschungsregeln 168
Anti-Vertauschungsrelation 146
Anyonen XI, 116, 117, 221
Arbeit 40, 44
Arbeitsvorrat 40, 49, 102
Aufbau-Prinzip 119
Ausdehnung XI, 40, 45–47, 67, 68, 76, 82, 86, 89, 164, 220, 221
Austausch-Loch 118
Austausch-Wechselwirkung 119, 120, 174, 178
Auswahlproblem IX, 4, 36, 61, 67, 77
avoided crossing 210
Axiom 31, 33, 35, 36, 42, 43, 48, 63, 65, 67, 212
Axiomatik VIII, 30, 34, 67
- Bahn 17, 25, 39, 41, 43, 47, 57, 75, 80, 84, 97, 122, 170, 213, 217, 218
Bandstruktur 178, 179
BCS-Theorie 203
Begrenzungsfunktion 70, 71, 80, 82, 97, 98, 105, 114
Besetzung 164
Besetzungszahl 128, 130, 137, 139, 188, 195
Besetzungszahl-Darstellung 130, 145, 147, 156, 171, 207
Besetzungszahl-Operator 128, 146, 149
Bewegungsgleichung IX, 9, 18–20, 22, 23, 25, 27, 31, 36, 39, 41–43, 45, 48, 51, 53–55, 63, 83, 92, 94, 102, 151, 157, 190, 213
Hamiltonsche 102, 127
Heisenbergsche 127, 151
Lagrangesche 158
Bloch-Elektron XII, 104, 105, 118, 139, 196
Bloch-Faktoren 200
Bloch-Funktionen 108, 199, 200
Bloch-Wechselwirkung 199
Bloch-Wellenfunktion 105
Blochsches Theorem 103
Bohmsche Mechanik 218
Boltzmann-Faktor 149, 151
Born-Oppenheimer-Näherung 196, 197
Bose-Einstein-Kondensation 131, 140, 143, 184
Bose-Einstein-Statistik 117, 141
Bosonen XI, 10, 116–118, 120, 195, 202, 221, 222
Brillouin-Zone 199
- Cooper-Paaren 203
Coulomb-Enhancement 193
Coulomb-induzierte Übergänge 187, 191
Coulomb-Potenzial 173, 174
Coulomb-Wechselwirkung 119, 171, 177, 178, 182, 185, 186, 193, 196
- Darstellung
Bloch- 181, 184
Bra-Ket- 129, 169
Wannier- 180
Deformationspotenzial 108
Determinismus 215

Dichte

Hamilton- 160, 166, 205
Lagrange- 158, 161, 166, 204

Dichte-Matrix 151, 188, 190

Dichte-Operator 151

Eichinvarianz XI, 100, 101, 162, 188,
215, 220

Eichpotenzial 197

Eichsymmetrie 100, 207
lokale 102

Eichtransformation 198

Eichung 161, 172, 204, 205

Eigenschaften

qualitative 34
quantitative 34

Eigenwertproblem X, 28, 61, 77, 79, 81

Elektron-Elektron-Wechselwirkung
172, 178, 180

Elektron-Loch-Paare 182, 184, 185
virtuelle 202

Elektron-Phonon-Wechselwirkung
195, 196, 202

Elementaranregung 104

Elementaranregungen 139, 202, 210

Energie X, XI, 1, 3, 7, 8, 10, 15, 20,
22–24, 34, 37, 39–47, 52, 55, 57, 59,
60, 63, 65, 67, 68, 74, 76, 78, 80,
82–84, 89, 95, 99, 103, 123, 124,
133, 155, 157, 158, 160, 166, 179,
216, 220

nichtklassische Darstellung der 173

Energiedichte 166, 220

Energiequanten 128, 149, 164

Energiesatz 67, 82, 164, 206

Energiespektrum 215

Erhaltung des Gesamtimpulses 202

Erhaltungsgröße IX, 7, 15, 18, 21, 23,
34, 37, 42, 51, 104, 114, 213, 216,
221

Erhaltungssatz VIII, IX, 3, 7, 42, 61,
87, 96, 121, 151

Erzeugungs- und Vernichtungsoperatorn
für Phononen 137

Erzeugungsoperator 134, 168, 172

Euler-Verbot 118, 119, 222

Eulersches Ausschließungsprinzip 33,
114

Excitonen 139, 174, 180, 183

Extremalprinzip 18

Feld-Quantisierung 165

Fermi-Dirac-Statistik 117

Fermi-Diracsche-Verteilungsfunktion
150

Fermionen XI, 10, 116–118, 120, 141,
149, 195, 202, 221, 222

Feynman-Graphen 201

Floquetsches Theorem 105

Fock-Raum 125, 128

Fourier-Transformation 72, 96, 106,
113

Frenkel-Excitonen 180, 184, 209

Funktion, dielektrische 193

geometrische Phase XI

Gesamtenergie 163, 211, 220

Gewichtsfunktion 69, 70, 120

Gewinnsättigung 195

Gibbssche Paradoxon 222

Grundzustand 40

halbklassische Theorie 4

Halbleiter-Bloch-Gleichungen 186, 190

Halbleiterlasern 195

Hamilton-Funktion 22, 25–28, 53, 55,
74, 84, 97, 102, 111, 113, 135, 157,
160, 162, 163, 171, 205, 211

Hamilton-Jacobi-Theorie 34, 212

Hamilton-Operator XI, 74, 97, 167,
169, 171, 205

Hamiltonian 74, 92, 99, 101, 105, 108,
115, 121, 127, 164, 171, 177, 178

Harmonie 34, 38, 67, 68, 71

Hartree-Fock-Näherung 173, 176, 188
verallgemeinerte 190

Hilbert-Raum 125

Hubbard-Modell 178

Huygenssches Prinzip 54, 95

Hybrid-Integrale 187, 189

Hybrid-Wechselwirkung 187, 195

Impulsdichte 158, 159, 166, 167
kanonische 162

Impulserhaltung 208

Indeterminismus 216

Interband-Polarisation, kohärente 188

Interferenz 221

- kanonischer Impuls 103
- Kausalität 215
- Komplementarität 67
- Konfiguration VIII–X, 9, 41–43, 48, 49, 62, 63, 67–70, 85, 98, 122, 217
 - unmögliche 213
- Kontinuität 128
- Kopplung, minimale 204
- Korrelationen XII, 174, 177, 178
- Korrespondenzprinzip VIII
- Kraft 217
 - lebendige 40
- Kramers-Entartung 176
- Kramers-Theorem 105
- Kristallsymmetrie 108

- Länge, charakteristische 101
- Lagrange-Funktion 20, 21, 23, 100, 162, 196
- Lagrange-Gleichungen 161
- Lagrange-Menge 211
- Laser 131, 141, 165
- Leibniz-Menge 63, 64
- Leibnizsches Prinzip 41
- Leiteroperatoren 127, 164
- Leitungsband 153
- Loch 118, 152, 153, 183
- Löchern XII
- Lorenz-Eichung 204

- Materialgewinn 193
- Matrizelemente, universelle 201
- Maxwell-Gleichungen 160, 203
- Messung 216
- Mittelwerte, anormale 188
- Mittelwerte, normale 188

- Nichtzustandsgröße 92
- Noethersches Theorem 100
- Normal-Moden 171
- Normalkoordinaten 210
- Normalmoden 28, 156, 162, 165, 167
 - Entwicklung 171
- Normierbarkeit 83

- Ordnung, nichtdiagonale 190
- Ordnungsparameter 142, 143
- Ort IX, XI, 16, 19, 24, 32, 35, 43, 50, 52, 100, 118, 119

- Oszillator, verschobener harmonischer 134, 148

- Padé-Approximation 191
- Parameter
 - äußerer 9, 23, 47, 54, 69, 160, 220
 - innerer 9, 23, 26, 47, 54, 70, 78, 84, 158, 219
 - verborgener 6, 216, 218
- Pauli-Verbot 119, 123, 146, 152
- Pauling-Effekt 194
- Paulisches Ausschluss-Prinzip 174, 179
- Permutationssymmetrie 10, 23, 97, 113, 116, 117, 130, 147, 167, 221
 - der Wellenfunktion 137
- Phase
 - adiabatische 100, 198
 - dynamische 100, 215
 - geometrische 55, 100, 198, 215
- Phasen-Zustand, thermischer 149
- Phasenübergang 141, 195
- Phaseneffekt, geometrischer 207
- Phasenzustand, thermischer 150
- Phononen XII, 5, 118, 136, 137, 139, 172, 196
- Photonen 118, 136, 139, 170, 171
- Plancksche Verteilungsfunktion 149
- Polarisation, kohärente 143
- Polarisationswolke 202
- Polariton XIII, 139, 210
 - excitonisches 208, 210
- Polaron XII, 139, 195, 202
- Potenzial 37, 161
- Prinzip der kleinsten Wirkung 38, 39

- Quantenbedingung IX, X
- Quantenbedingungen 211
- Quantengraben 195
- Quantenhypothese 123
- Quantenmechanik 215
- Quantensprung 7
- Quantisierung IX, 4, 10, 27, 78, 81, 156, 161, 165, 221
 - erste 4, 205
 - kanonische 166, 170
 - zweite 4, 165, 166, 168, 172, 207
- Quasi-Mittelwert 190
- Quasiteilchen 117, 139, 195

- Randbedingungen 80, 83, 131, 156, 164
- Relaxationszeit-Näherung 190
- Renormierung 189, 202
- Rotating Wave Approximation 190
- Ruhe 33, 35, 43, 45, 47, 74, 83, 84, 86, 102
- Schrödinger-Gleichung IX–XI, 8, 9, 62, 76, 78, 81, 83, 88, 98, 100, 104, 137, 169, 176, 185
 - N-Elektronen 173
 - nichtstationäre, siehe zeitabhängige
 - stationäre 97, 163, 196
 - zeitabhängige 94–96, 101, 166, 207
- Spin 118, 147, 148, 173, 179
- Streuung 175
- Superposition 69
 - prinzip 54, 215
- Supraleitfähigkeit 143, 177
- Supraleitung 179, 195, 198, 203
- Symmetrie XI, 21, 89, 96, 97, 99, 102, 103, 114, 132, 176
- System, konservatives 30, 40, 43
- Theorie, halbklassische 203, 206
- Tight-Binding-Methode 108
- Toeplitz-Matrix 28
- Trägheit 32, 34
- Transformation, kanonische 132, 209
- Transformation, unitäre 132
- Tunneleffekt VIII, XI, 8, 76, 213
- Übergänge von der Klassischen zur Quantenmechanik 213
- Überlappungsintegrale 201
- (Un)Unterscheidbarkeit VIII, 23, 122, 124, 221, 222
- Undurchdringlichkeit 33, 34, 49, 51, 118, 212
- Unschärferelation VIII, 213
- Ursache, äußere 92
- Vakuum 162
- Valenzband 153
- Variable
 - dynamische 155
 - unabhängige dynamische 24, 32, 95, 162
- Variationsprinzip 18
- Vektorpotenzial 103, 161, 170, 204, 206, 207, 215, 220
- Vernichtungsoperator 134, 168, 172
- Verschiebungsoperator 132
- Verschränkung 121
- Vertauschungsrelation 125, 126, 129, 137, 146, 148, 156, 165, 170, 171, 195, 209
- Wannier-Funktionen 106, 108, 199
- Wannier-Mott-Exciton 184, 185
- Wechselwirkung 203
 - Deformationspotenzial- 198
 - Fröhlich- 198
- Welle-Teilchen-Dualismus VIII, XI, 4, 5, 62
- Wellenfunktion XI, 4, 9, 59, 73, 75, 76, 77, 88, 91, 92, 96–99, 105, 115, 116, 121, 124, 152, 166, 170, 180, 196, 206, 217
 - stationäre 128
- Wellengleichungen, für die Potenziale 204
- Wellenmechanik 211
- Weyl-Ordnung 127
- Wignersches Theorem 115
- Wirksamkeit 37, 38, 63
- Wirkung 22, 24, 30, 37–39, 59, 61, 84, 89, 96, 161
- Zeit 18, 219
- Zustand IX, XI, 2–5, 7, 14, 15, 23, 30, 32, 33, 34, 36, 43, 46, 49, 65–67, 74–76, 82–84, 98, 116, 119, 121, 124, 129, 130, 152, 166, 179, 213
 - kohärenter 127, 131, 133, 141, 149
 - stationärer 111, 221
- Zustands(ver)änderung 7, 15, 18, 32, 33, 35, 36, 51, 53, 90, 92, 93
- Zustandsänderungsgleichung X, 48
- Zustandserhaltung 9, 11, 30, 33, 34, 43, 50, 54, 62, 212, 213
- Zustandsfunktion 35, 52, 90, 92, 97
- Zustandsgleichung IX, X, 29, 83, 112, 163
- Zustandsgröße 7, 9, 18, 35–37, 43, 53, 92, 103
- Zwei-Teilchen-Schrödinger-Gleichung 112
- Zwei-Teilchen-Begrenzungsfunktion 112