

Uni Würzburg

Skript der Theoretischen Physik für Studierende des  
Lehramts

# Klassische Mechanik und Quantenmechanik

Wolfgang Kinzel

29. Januar 2025

Gefördert von der

**WILHELM UND ELSE  
HERAEUS-STIFTUNG**



Dieses Skript entsteht gleichzeitig mit der Vorlesung und wird ständig überarbeitet. Skripte sind nie fehlerfrei. Bitte helfen Sie mit, das Skript zu verbessern. Kommentare, Verbesserungsvorschläge und Fehlermeldungen sind immer willkommen.

Besten Dank!

Wolfgang Kinzel

kinzel (at) physik uni-wuerzburg de

**Danke für Korrekturhinweise:**

Daniel Baur, Haye Hinrichsen, Laura Lauerbach, Georg Reents, Max Ernst, Andreas Bader, Maximilian Frank, Gabriel Freiherr von Eyb, Judith Fuhrmann, Michaela Kohmann, Christoph Kunkel, Lukas Lackner, Maximilian Rödel, Johannes Ruck, Burkhard Schulz, Anna-Maria Schulze, Robert Stempien, Julian Schrauth, Peter Helfrich, Larissa Lazarov, Martin Genßler, Florian Frank, Sven Yang, Nico Griesler, Robert Jawurek, Nadine Harbich, Tim Friedrich, Benjamin Schuhmann, Fabian Fischer, Jule Hack

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Theoretische Physik für das Lehramt</b>	<b>6</b>
1.1	Warum Theoretische Physik? . . . . .	6
1.2	Postulate der Theoretischen Physik . . . . .	7
1.3	Diese Vorlesung . . . . .	8
1.4	Studium . . . . .	9
<b>2</b>	<b>Klassische Mechanik</b>	<b>11</b>
2.1	Newton-Gesetze . . . . .	13
2.1.1	Bahnen . . . . .	14
2.1.2	Bewegungsgleichungen . . . . .	17
2.1.3	Kräfte . . . . .	18
2.2	Physikalische Größen und Erhaltungssätze . . . . .	20
2.2.1	Impuls . . . . .	20
2.2.2	Drehimpuls . . . . .	20
2.2.3	Arbeit und Leistung . . . . .	21
2.2.4	Kinetische Energie . . . . .	22
2.2.5	Potenzial . . . . .	23
2.2.6	Energieerhaltung . . . . .	24
2.3	Systeme von Massenpunkten . . . . .	26
2.4	Bezugssysteme . . . . .	27
2.4.1	Inertialsysteme, Galilei-Transformation . . . . .	28
2.4.2	Fallender Aufzug . . . . .	32
2.4.3	Rotierendes Bezugssystem . . . . .	33
2.5	Eindimensionale Bewegung . . . . .	37
2.5.1	$F(t)$ . . . . .	39
2.5.2	$F(x)$ . . . . .	39
2.5.3	$F(v)$ . . . . .	40
2.5.4	Lineare Kräfte . . . . .	41
2.5.5	Erzwungene Schwingungen . . . . .	43
2.5.6	Nichtlineare Dynamik . . . . .	45
2.6	Lagrange-Gleichungen . . . . .	46
2.6.1	Newton kompliziert . . . . .	47
2.6.2	Lagrange-Formalismus . . . . .	48
2.6.3	Erhaltungsgrößen . . . . .	51
2.6.4	Hamiltonsches Prinzip . . . . .	52

## Inhaltsverzeichnis

2.7	Anwendungen der Lagrange-Gleichungen . . . . .	53
2.7.1	Pendel . . . . .	54
2.7.2	Zentralkraft . . . . .	57
2.7.3	Schwingende Systeme . . . . .	60
2.8	Hamiltonsche Dynamik . . . . .	66
<b>3</b>	<b>Quantenmechanik</b> . . . . .	<b>70</b>
3.1	Postulate . . . . .	76
3.2	Schrödinger-Gleichung . . . . .	77
3.2.1	Wellenfunktion . . . . .	77
3.2.2	Überlagerung . . . . .	79
3.2.3	Rätsel . . . . .	80
3.2.4	Erweiterungen . . . . .	81
3.2.5	Freies Teilchen . . . . .	81
3.2.6	Wellenpaket . . . . .	84
3.2.7	Erwartungswerte und Schwankungen . . . . .	86
3.2.8	Orts- und Impuls-Operator . . . . .	87
3.2.9	Kommutator . . . . .	89
3.2.10	Hamilton-Operator . . . . .	89
3.2.11	Stationäre Schrödinger-Gleichung . . . . .	91
3.2.12	Zeitentwicklung . . . . .	93
3.2.13	Wahrscheinlichkeitsstrom . . . . .	94
3.2.14	Pauli-Verbot . . . . .	95
3.3	Eindimensionale QM . . . . .	98
3.3.1	Gebundene Zustände . . . . .	99
3.3.2	Streuzustände . . . . .	106
3.3.3	Tunneleffekt . . . . .	108
3.3.4	Harmonischer Oszillator . . . . .	109
3.4	Mathematische Struktur der Quantenmechanik . . . . .	116
3.4.1	Hilbertraum . . . . .	117
3.4.2	Operatoren . . . . .	118
3.4.3	Matrizenmechanik . . . . .	120
3.4.4	Messergebnisse . . . . .	121
3.4.5	Ehrenfest-Gleichungen . . . . .	122
3.4.6	Gemeinsame Eigenbasis . . . . .	123
3.5	Drehimpuls . . . . .	124
3.5.1	Eigenschaften des Drehimpulses . . . . .	125
3.5.2	Operatoralgebra . . . . .	126
3.5.3	Mittelwerte und Fluktuationen . . . . .	128
3.5.4	Wellenfunktion . . . . .	129
3.6	Wasserstoff-Atom . . . . .	130
3.6.1	Teilchen im Zentralpotenzial . . . . .	130
3.6.2	Lösung der Schrödingergleichung . . . . .	132
3.6.3	Elektron im Magnetfeld . . . . .	137

## *Inhaltsverzeichnis*

3.7	Spin . . . . .	138
3.7.1	Hilbertraum und Spinoperator . . . . .	139
3.7.2	Spinpräzession . . . . .	141
3.7.3	Spinresonanz . . . . .	143
3.7.4	Addition zweier Spins . . . . .	146
3.7.5	Drehimpuls-Addition . . . . .	149
3.8	Verschränkte Zustände . . . . .	150
3.8.1	Quantencomputer . . . . .	152
3.8.2	Vollständigkeit der Quantenmechanik . . . . .	154

# 1 Theoretische Physik für das Lehramt

## 1.1 Warum Theoretische Physik?

Muss ein Physiklehrer oder eine Physiklehrerin theoretische Physik lernen? Diese Frage wird mir gelegentlich von Studenten und Studentinnen des Lehramts gestellt. Meine Antwort dazu ist ein eindeutiges *Ja*. Nur wer Physik verstanden hat, kann sie überzeugend vermitteln.

Die Physik sucht nach universellen quantitativen Gesetzen in unserer Natur. Sie erklärt eine Vielzahl von Phänomenen und Experimenten durch einige wenige mathematische Grundgleichungen. Physik ist keine Datensammlung, sondern eine universelle Theorie, und die Sprache der Physik ist die Mathematik. Jeder Student und jede Studentin der Physik muss lernen, wie man physikalische Aussagen aus den Grundgleichungen mathematisch herleiten kann. Folglich müssen auch Lehramtsstudierende die Grundlagen der theoretischen Physik beherrschen.

Die experimentelle Physik zeigt, wie man aus Experimenten quantitative Aussagen erhält. Diese Daten werden mithilfe der physikalischen Begriffe und Modelle analysiert. Die experimentelle Physik benötigt somit ebenfalls die Sprache der Mathematik, um die Daten aus den Experimenten zu beschreiben und zu erklären. Aus der Fülle dieser zahlreichen Experimente sind die physikalischen Grundgleichungen entstanden.

Die theoretische Physik dagegen geht von diesen Grundgleichungen aus. Sie versucht, daraus mithilfe mathematischer Methoden physikalische Aussagen herzuleiten. Die Menge dieser Aussagen bildet eine Theorie, die eine Vielzahl von Experimenten und Beobachtungen erklären kann. Aus mathematischer Sicht sind diese Grundgleichungen so etwas wie Axiome, also absolute Wahrheiten, die nicht infrage gestellt werden. Allerdings gibt es in der Physik keine absoluten Wahrheiten, sondern nur Hypothesen oder Postulate, die durch Experimente widerlegt werden können.

Jede dieser Grundgleichungen hat deshalb nur einen beschränkten Gültigkeitsbereich. Die klassische Mechanik von Isaac Newton wird bei extrem schnellen Bewegungen durch die Relativitätstheorie und im mikroskopisch Kleinen durch die Quantenmechanik erweitert. Die Theorie der elektromagnetischen Wellen von James Clerk Maxwell wird bei schwachen Intensitäten der Welle und bei ihrer Wechselwirkung mit Atomen durch die Quantenelektrodynamik (Photonen) ergänzt. Die Quantenmechanik der Atome, Mo-

leküle und Festkörper wird im subatomaren Bereich durch die Quantenfeldtheorie (Quarks, Gluonen) ersetzt. Jede dieser Theorien kann in ihrem entsprechenden Gültigkeitsbereich zahlreiche Experimente und Erscheinungen beschreiben und erklären.

## 1.2 Postulate der Theoretischen Physik

Im Rahmen der Lehramtsausbildung werden wir die fünf folgenden Grundgleichungen behandeln. Im vierten Semester führen wir in die klassische Mechanik und in die Quantenmechanik ein, und im siebten Semester studieren wir die Elektrodynamik, die spezielle Relativitätstheorie und die Thermodynamik.

### Grundgleichungen der theoretischen Physik

- **Klassische Mechanik**

Newton-Gleichungen für ein Teilchen im Potenzial  $V$

$$m \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}(t) = -\nabla V(\vec{r}(t), t)$$

- **Quantenmechanik**

Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen im Potenzial  $V$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}, t) \Psi(\vec{x}, t)$$

Abstrakte Formulierung im Hilbertraum

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$$

- **Elektrodynamik**

Maxwell-Gleichungen

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \vec{E} &= \frac{\rho(\vec{x}, t)}{\varepsilon_0} \\ \nabla \cdot \vec{B} &= 0 \\ \nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \vec{B} &= \mu_0 \vec{j}(\vec{x}, t) + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}\end{aligned}$$

- **Spezielle Relativitätstheorie**

Lorentz-Transformation für die Messung des Ortes  $x'$  und der Zeit  $t'$  eines Beobachters, der sich mit der Geschwindigkeit  $v$  in  $x$ -Richtung bewegt.

$$\begin{aligned}x' &= \gamma(x - vt) \\ t' &= \gamma\left(t - \frac{xv}{c^2}\right) \\ \gamma &= \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}\end{aligned}$$

- **Thermodynamik**

- Die Entropie  $S(E, V, N)$  beschreibt thermisches Gleichgewicht.
- $dE = T dS - p dV + \mu dN$
- $\Delta S \geq 0$

### 1.3 Diese Vorlesung

In dieser Vorlesung untersuchen wir zwei dieser Grundgleichungen:

- Die Newton-Gleichung beschreibt die Bewegung von miteinander wechselwirkenden Körpern.
- Die Schrödinger-Gleichung beschreibt die Zustände und die Bewegung von Teilchen in Atomen und Molekülen.

Aus diesen zwei Grundgleichungen werden wir wichtige physikalische Aussagen herleiten. Solche Ergebnisse sind nicht nur für unser grundlegendes Verständnis der Natur

wichtig, sondern sie haben auch weitreichende Anwendungen. Die klassische Mechanik beschreibt sowohl die Bewegung der Planeten als auch den Steinwurf und das Fahrrad. Die Quantenmechanik berechnet das Energiespektrum der Atome und die Bilder der Kernspin-Tomographie. Sie ist die Grundlage der heutigen Informationstechnologie, vom Transistor, Speicherchip, Halbleiterlaser zum Smartphone.

**Dieses Skript enthält nur denjenigen Stoff, der in der Vorlesung behandelt wird.** Ich empfehle Ihnen, mithilfe von Lehrbüchern die Vorlesung zu vertiefen und zu ergänzen. Dazu eignen sich:

- Wolfgang Nolting, Grundkurs Theoretische Physik 1+2+5/1+5/2
- Fritz Haake, Einführung in die Theoretische Physik, kostenlos auf der Webseite der Vorlesung
- Peter Schmüser, Theoretische Physik für das Lehramt 2, kostenlos über die Unibibliothek
- Torsten Fließbach, Lehrbuch zur Theoretischen Physik 1+3
- Siegfried Großmann, Mathematischer Einführungskurs für die Physik
- Dieter Röß, Mathematik mit Simulationen lehren und lernen
- Weitere Lehrbücher in unserer Bibliothek unter UF,UK,...

### 1.4 Studium

Bitte nicht vergessen: Sie studieren! Das bedeutet, dass Sie Arbeit investieren müssen, um von einer Lehrveranstaltung profitieren zu können. Diese Vorlesung präsentiert neuen, umfangreichen und schwierigen Stoff in relativ kurzer Zeit. Sie müssen selbst daran arbeiten, den Vorlesungsstoff zu verstehen. Das gelingt nicht vollständig, denn Verstehen ist kein Ja-Nein-Prozess sondern ein Mehr-oder-Weniger. Erst wenn Sie etwas verstanden haben, können Sie versuchen, Aufgaben zur Vorlesung zu lösen.

Studium heißt:

- Sich Zeit für die Nacharbeitung der Vorlesung nehmen
- Den Inhalt der Vorlesung mit eigenen Worten formulieren
- Zusammenhänge erkennen

## 1 Theoretische Physik für das Lehramt

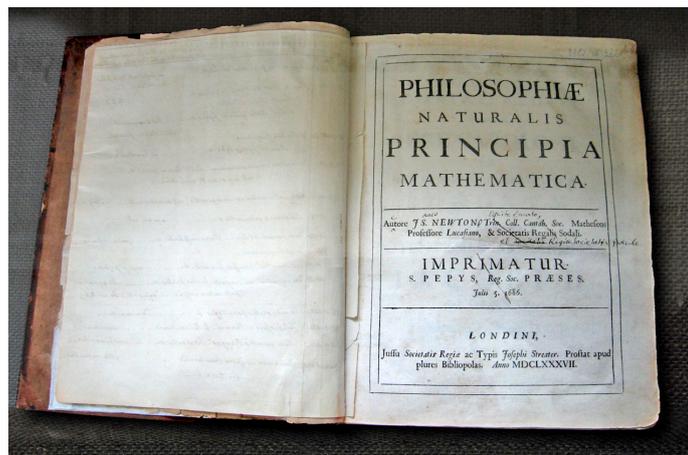
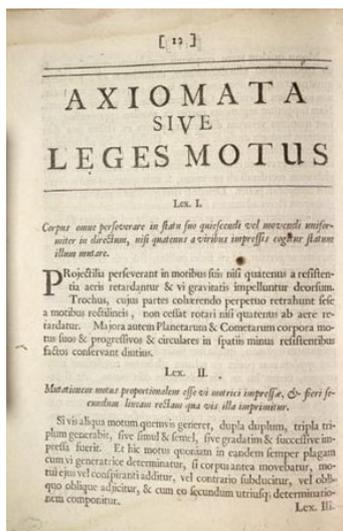
- Fragen formulieren und damit zum Dozenten und den Übungsleitern gehen
- Durch Wiederholen den Überblick behalten
- Über die Physik mit den Studienkollegen sprechen
- Den Inhalt der Vorlesung mithilfe von Lehrbüchern vertiefen
- Übungsaufgaben lösen und mit den Studienkollegen besprechen

An dieser Liste sehen Sie schon, dass sich Lehramtsstudierende mehr Zeit für das Verständnis der Physik als für das Lösen von Problemen nehmen sollten. Sie werden nicht als Forscher ausgebildet, sondern sie sollen später in der Klasse die Physik überzeugend und kompetent vermitteln und spannend gestalten.

Wir wollen Ihnen gern beim Studium helfen. Unser Ziel ist es nicht, Sie zu prüfen, sondern wir wollen Ihnen etwas beibringen und Sie vielleicht sogar für die Physik begeistern.

## 2 Klassische Mechanik

Im Jahr 1687 veröffentlichte Isaac Newton sein dreibändiges Werk *Philosophiæ Naturalis Principia Mathematica*, Mathematische Grundlagen der Naturphilosophie. Von vielen Wissenschaftshistorikern wird dieses Werk als die bedeutendste wissenschaftliche Arbeit eingestuft, die jemals erschienen ist. Denn Newton zeigte, dass sowohl die Bahnen der Planeten als auch die Bewegung von Körpern auf der Erde durch eine einzige mathematische Gleichung beschrieben werden kann, die newtonsche Bewegungsgleichung. Diese Gleichung ist deterministisch, ein Anfangszustand bestimmt die zukünftige Bahn zu allen Zeiten. Sie führt zahlreiche Phänomene der Natur auf eine universell gültige mathematische Gleichung zurück. Das ist das Ziel der Physik: Im Experiment, unter wohldefinierten Bedingungen, werden Relationen zwischen Messwerten bestimmt und durch wenige Grundgleichungen erklärt.



Wie alle Wissenschaftler baute auch Newton auf den Ergebnissen seiner Vorgänger auf. Schon Ptolemäus beschrieb im Jahr 150 die Bahnen der Planeten mathematisch, allerdings recht kompliziert, mit einer zentralen Erde und ineinander verschachtelten Kreisen. Kopernikus erkannte, dass die mathematische Beschreibung durch eine zentrale Sonne wesentlich einfacher wurde. Und Kepler hat schließlich gesehen, dass sich die Planeten auf elliptischen Bahnen bewegen, und er hat die berühmten Keplerschen Gesetze gefunden. Galilei hatte schon die Fallgesetze formuliert. Aber erst Newton konnte alle

## 2 Klassische Mechanik

diese Beobachtungen und Gesetze aus einer einzigen universellen Gleichung herleiten. Dabei erkannte er, dass der Raum absolut ist und Kräfte eine momentane Fernwirkung ausüben. Insbesondere war kein Äther nötig, um Kräfte zu übertragen.

Die Gleichungen von Newton sind auch heute, mehr als 300 Jahre später, gültig. Sie wurden für Gravitationskräfte entwickelt, aber sie gelten ebenso für elektrische und magnetische Kräfte. Erst etwa 220 Jahre später erkannten die Physiker jedoch, dass die Theorie von Newton erweitert werden muss. Bei hohen Geschwindigkeiten nahe der Lichtgeschwindigkeit werden Körper durch die spezielle Relativitätstheorie beschrieben, die Raum und Zeit miteinander koppelt. Im Universum gilt die allgemeine Relativitätstheorie, bei der die Massen den Raum krümmen, und in Atomen und Molekülen benötigt man die Quantenmechanik. Alle diese Theorien enthalten unter gewissen Näherungen die Newton-Gleichungen.

Die Newton-Gesetze können demnach als die Geburtsstunde der Physik angesehen werden. Vor Newton war die Beobachtung und Interpretation der Natur mehr philosophisch. Kräfte wurden als ein Mechanismus eines unbekanntes den ganzen Raum erfüllenden Mediums interpretiert. Die Kepler- und die Fallgesetze waren zwar wichtige mathematische Beschreibungen, aber ohne Zusammenhang und Verständnis. Mit den Newton-Gesetzen dagegen konnte die Bewegung von Körpern auf eine allgemein gültige deterministische Gleichung zurückgeführt werden.

Hier sind Daten von bedeutenden Wissenschaftlern, die die klassische Mechanik entwickelt haben:

- Nikolaus Kopernikus 1473-1531
- Johannes Kepler 1571-1630
- Rene Descartes 1596-1650
- Isaac Newton 1643-1726
- Joseph Louis Lagrange 1736-1813
- William Rowan Hamilton 1805-1865
- Jules Henri Poincare 1854-1912
- Albert Einstein 1879-1955
- Kolmogorov, Arnol'd, Moser, 1940
- Mitchell Feigenbaum 1970-2019

## 2.1 Newton-Gesetze

Die Newton-Gesetze wurden 1687 in lateinischer Sprache veröffentlicht und in einer schwer zu verstehenden geometrischen Sprache formuliert. Hier ist die Übersetzung des Textes:

N1 Trägheit:

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

N2 Aktion:

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

N3 Wechselwirkung:

Kräfte treten immer paarweise auf. Übt ein Körper A auf einen anderen Körper B eine Kraft aus, so wirkt eine gleich große, aber entgegen gerichtete Kraft von Körper B auf Körper A.

N4 Überlagerung:

Wirken auf einen Punkt (oder einen starren Körper) mehrere Kräfte, so addieren sich diese vektoriell zu einer resultierenden Kraft auf.

Erst einige Jahrzehnte nach der Veröffentlichung der Principia wurde die von Newton verwendete geometrische Form dieser Gesetze in die moderne Form der Infinitesimalrechnung übersetzt. Heutzutage schreiben wir die Newton-Gesetze in der folgenden mathematischen Kurzform:

$$\text{N2: } \frac{d}{dt}\vec{p} = \vec{F} \quad (2.1)$$

$$\text{N3: } \vec{F}_{12} = -\vec{F}_{21}$$

$$\text{N4: } \vec{F} = \sum_{j=1}^N \vec{F}_j$$

## 2 Klassische Mechanik

Dabei ist  $\vec{p} = m\vec{v} = m\dot{\vec{r}}$  der Impuls eines Teilchens mit der Masse  $m$ . Wenn auf das Teilchen keine Kräfte wirken, dann erhalten wir das erste Gesetz N1 aus dem zweiten N2 mit  $\vec{F} = 0$ .

Diese Kurzform reicht natürlich nicht aus, um die dahinter liegende Mathematik zu verstehen. Deshalb betrachten wir diese Gesetze im Folgenden etwas genauer, bevor wir daraus physikalische Aussagen herleiten werden.

### Bemerkungen

Ist die Kraft die Ursache einer Bewegung? Diese Frage wird von vielen Leuten, auch Physik- Studenten, positiv beantwortet. Das stimmt aber nicht. Denn Newton sagt uns, dass eine Kraft die Bewegung *ändert*. Auch ohne jede Ursache kann sich ein Körper gleichförmig relativ zum Beobachter bewegen. Das stimmt nicht mit unseren Beobachtungen im Alltag überein. Ohne Antrieb kommt ein Auto irgendwann zur Ruhe. Ein Ball bleibt schließlich irgendwo liegen. Heute lernen wir, dass Reibungskräfte die Körper abbremsen. Doch ohne dieses Wissen ist das erste Newton-Gesetz nicht offensichtlich.

Sind die Newton-Gesetze Axiome? Streng genommen nein, denn in der Physik gibt es keine absoluten Wahrheiten sondern nur Hypothesen, deren Gültigkeitsbereich durch Experimente bestimmt wird. Allerdings gibt es Hypothesen, die so grundlegend sind, einen weiten Bereich der Natur erklären und durch unzählige Experimente bestätigt wurden, dass sie oft als Axiome betrachtet werden. Die Newton-Gesetze gehören dazu.

Sind die Newton-Gesetze überhaupt Gesetze, oder nur Definitionen von physikalischen Begriffen? Nun, beides ist richtig. Das zweite Newtongesetz definiert sowohl die träge Masse als Widerstand gegen eine Beschleunigung als auch die Kraft. Aber es ist ebenfalls ein Gesetz. Denn N2 sagt uns beispielsweise, dass für eine konstante Kraft der zurückgelegte Weg eines Körpers proportional zum Quadrat der Zeit wächst.

### 2.1.1 Bahnen

Die Newton-Gesetze gehen davon aus, dass der physikalische Raum ein euklidischer Vektorraum ist, also ein dreidimensionaler Vektorraum über den reellen Zahlen mit einem Skalarprodukt, isomorph zum  $\mathbb{R}^3$ . Die Gesetze beschreiben die Bewegung eines Körpers, der näherungsweise durch ein punktförmiges Teilchen aufgefasst werden kann. Der Ort jedes Teilchens wird zur Zeit  $t$  durch einen Vektor  $\vec{r}(t)$  dargestellt. Dabei ist die Zeit  $t$  ein Parameter, der an jedem Ort denselben Wert hat und für zeitliche Abstände mehrerer Ereignisse additiv ist. Physikalisch gesehen messen wir nicht den Ort sondern den Abstand zwischen zwei Punkten. Um die Bahn  $\vec{r}(t)$  zu messen, benötigen wir demnach einen Koordinatenursprung in dem dreidimensionalen physikalischen Raum, und der Vektor  $\vec{r}$

ist der Abstandsvektor zwischen dem Ursprung und dem Ort des Teilchens.

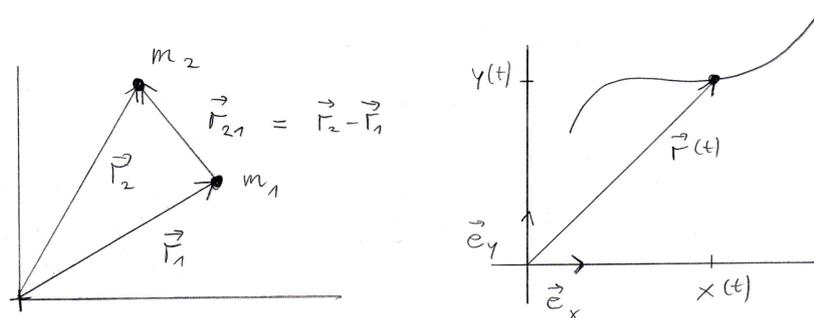


Abbildung 2.1: Vektoren beschreiben Abstände zwischen punktförmigen Teilchen. Die Bahn eines Teilchens wird durch den Abstandsvektor  $\vec{r}(t)$  zum Koordinatenursprung festgelegt.

### Ortsvektor

Jeder Vektor kann als Linearkombination einer dreidimensionalen orthonormalen Basis dargestellt werden. Wir wählen demnach drei zueinander senkrecht stehende Einheitsvektoren

$$(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z) \quad \text{oder} \quad (\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3) \quad \text{mit} \quad \vec{e}_j \cdot \vec{e}_k = \delta_{jk}$$

und erhalten damit die Bahn eines Teilchens als

$$\vec{r}(t) = x(t) \vec{e}_x + y(t) \vec{e}_y + z(t) \vec{e}_z = \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \\ z(t) \end{pmatrix}$$

Mathematisch gesehen ist diese Gleichung nicht ganz korrekt, denn links steht ein Vektor des abstrakten Vektorraumes während auf der rechten Seite dessen Koordinaten bezüglich des Bezugssystems, Koordinatenursprung plus Basis, stehen. Aber im folgenden werden wir beide Notationen parallel zueinander verwenden.

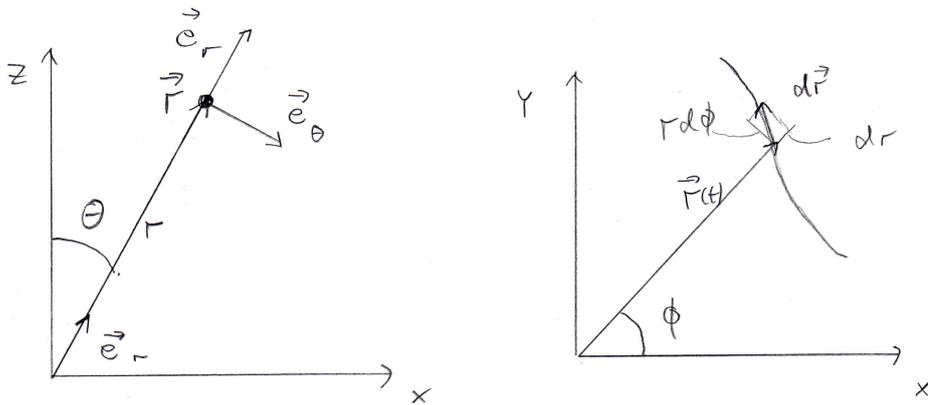
Oft ist es allerdings nützlich, die Bahn durch Kugelkoordinaten  $(r, \theta, \varphi)$  zu beschreiben. Dazu benötigen wir drei orthogonale Einheitsvektoren,  $\vec{e}_r(t), \vec{e}_\theta(t), \vec{e}_\varphi(t)$ , die sich mit dem Teilchen zeitlich ändern. Die Koordinate  $r$  beschreibt den Abstand zum Ursprung,  $\theta$  beschreibt den Winkel zur z-Achse und  $\varphi$  beschreibt den Winkel um die z-Achse. Damit erhalten wir

$$\vec{r}(t) = r(t) \vec{e}_r(t)$$

### Geschwindigkeit

Die Geschwindigkeit  $\vec{v}$  eines Teilchens ist die zeitliche Ableitung der Bahn,  $d\vec{r} = \vec{v} dt$ . Für Physiker ist  $d\vec{r}$  eine winzig kleine Änderung des Ortsvektors  $\vec{r}(t)$ , für Mathematiker dagegen ist  $d\vec{r}$  ein Differenzial der Funktion  $\vec{r}(t)$ , also die beste lineare Abbildung an einem Ort der Bahn. In kartesischen Koordinaten erhalten wir damit

$$\vec{v}(t) = \frac{d\vec{r}}{dt} = \dot{x} \vec{e}_x + \dot{y} \vec{e}_y + \dot{z} \vec{e}_z = \begin{pmatrix} \dot{x}(t) \\ \dot{y}(t) \\ \dot{z}(t) \end{pmatrix}$$



In Kugelkoordinaten ist die Geschwindigkeit komplizierter, denn die Basisvektoren bewegen sich ebenfalls. Wir wollen die Bahn nur in der  $xy$ -Ebene betrachten,  $\theta = \pi/2$ . Die Bahn wird also nur durch die beiden Polarkoordinaten  $r(t), \varphi(t)$  beschrieben. Eine kleine Änderung der Bahn hat eine Komponente in  $r$ - und eine in  $\varphi$ -Richtung. Beide Änderungen müssen allerdings Längen sein, wir finden die Werte  $dr$  und  $r d\varphi$ . Somit erhalten wir

$$\begin{aligned} \vec{r}(t) &= r(t) \vec{e}_r(t) & (2.2) \\ d\vec{r} &= dr \vec{e}_r + r d\varphi \vec{e}_\varphi \\ \vec{v}(t) &= \dot{r} \vec{e}_r + r\dot{\varphi} \vec{e}_\varphi \\ \vec{v} \cdot \vec{v} &= v^2 = \dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2 \end{aligned}$$

Diese Gleichungen sollten Sie auswendig kennen, denn sie treten in vielen Beispielen auf. Die dreidimensionalen Gleichungen dagegen können Sie entsprechenden Formelsammlungen entnehmen.

## Beschleunigung

Ohne Herleitung geben wir hier die Beschleunigung in der Ebene an,

$$\vec{a}(t) = \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \begin{pmatrix} \ddot{x}(t) \\ \ddot{y}(t) \\ \ddot{z}(t) \end{pmatrix} = (\ddot{r} - r\dot{\varphi}^2) \vec{e}_r + (r\ddot{\varphi} + 2\dot{r}\dot{\varphi}) \vec{e}_\varphi$$

Bei solchen Formeln ist es immer nützlich, die physikalischen Dimensionen zu kontrollieren. Beschleunigung hat die Dimension Länge geteilt durch Zeit<sup>2</sup>, jeder Punkt in der Formel hat die Dimension 1/Zeit.  $r$  hat die Dimension Länge und  $\varphi$  ist dimensionslos, ebenso wie die Einheitsvektoren. Und Sie dürfen natürlich nur Größen mit derselben Dimension addieren. Hoffentlich stimmt das in der vorigen Formel.

## Kreisbewegung

Bewegt sich das Teilchen mit konstanter Winkelgeschwindigkeit  $\dot{\varphi} = \omega$  auf einem Kreis, so gilt  $r(t) = r = \text{konst.}$ ,  $\dot{r} = \ddot{r} = \dot{\varphi} = 0$ . Damit erhalten wir die Geschwindigkeit und die Radialbeschleunigung als

$$\vec{v}(t) = r\omega \vec{e}_\varphi, \quad v^2 = r^2\omega^2, \quad \vec{a}(t) = -r\omega^2 \vec{e}_r$$

Die Geschwindigkeit zeigt somit nur in die  $\varphi$ -Richtung, während die Radialbeschleunigung zum Zentrum gerichtet ist.

### 2.1.2 Bewegungsgleichungen

Was bedeutet das Newton-Gesetz N2 mathematisch? Wenn wir die Bahn einsetzen, so erhalten wir für die Bewegung eines Teilchens die Gleichung

$$m \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \vec{F} \left( \vec{r}(t), \frac{d\vec{r}}{dt}(t), t \right) \quad (2.3)$$

Dabei kann die Kraft vom Ort abhängen und sich zeitlich ändern, sie kann jedoch ebenfalls die Geschwindigkeit enthalten, wie bei der Bewegung einer Ladung im Magnetfeld oder durch Reibung.

Die Bewegung  $\vec{r}(t)$  eines Teilchens wird somit durch drei gekoppelte **nichtlineare gewöhnliche Differenzialgleichungen zweiter Ordnung** beschrieben. Das Ziel der klassischen Mechanik ist es nun, diese Differenzialgleichungen zu lösen. In der Mathematik haben Sie gelernt, dass die Lösung einer gewöhnlichen Differenzialgleichung zweiter Ordnung durch zwei Anfangsbedingungen eindeutig bestimmt wird. Hier benötigen wir

## 2 Klassische Mechanik

demnach sechs Anfangsbedingungen, beispielsweise den Ort und die Geschwindigkeit zu einer festen Zeit,  $\vec{r}(0), \vec{v}(0)$ , um die Bahn  $\vec{r}(t)$  eindeutig festzulegen.

Wenn mehrere Teilchen miteinander wechselwirken, beispielsweise Planeten im Sonnensystem oder Moleküle im Gas, gibt das Newton-Gesetz  $6N$  gekoppelte Differentialgleichungen, wobei  $N$  die Anzahl der Teilchen ist.

Wie werden solche Gleichungen gelöst? In dieser Vorlesung werden Sie dazu einige analytische Methoden kennen lernen. Allerdings sind die exakten Lösungen auf ein oder zwei Teilchen beschränkt. Schon drei Teilchen können ganz komplizierte Bahnen ergeben, beispielsweise chaotische Bewegung. Einige hundert Teilchen können nur noch näherungsweise im Computer simuliert werden. Dazu werden Raum und Zeit diskretisiert, und aus der Differentialgleichung wird eine Differenzgleichung. Die numerischen Tricks dazu finden Sie unter dem Begriff *Molekulardynamik*.

### 2.1.3 Kräfte

Woher bekommt man die Kräfte, die in den Newton-Gesetzen enthalten sind? Die Kräfte der klassischen Mechanik wurden aus der Interpretation entsprechender Experimente bestimmt. Die Bewegung der Planeten führte zur Gravitationskraft, die Anziehung und Abstoßung elektrischer Ladungen lieferte die Coulomb-Kraft und elektrische Ströme – bewegte Ladungen – werden durch die Lorentzkraft beschrieben.

Neben der Gravitation und der elektromagnetischen Kraft gibt es noch zwei weitere Arten von Kräften, die die Physik der Elementarteilchen beschreiben. Sie werden als schwache und starke Wechselwirkung benannt. Durch die schwache Wechselwirkung können Protonen in Neutronen zerfallen, dadurch erhält die Sonne ihre Energie. Die starke Wechselwirkung dagegen bindet die Quarks zusammen und bildet die Protonen. Allerdings werden diese Kräfte durch die Quantenfeldtheorie beschrieben, der Quantenmechanik von Materiefeldern.

### Gravitation

Elliptische Bahnen von Planeten erhalten wir aus den Newton-Gleichungen, wenn die Kraft mit dem Quadrat des inversen Abstandes abfällt:

$$\vec{F}_{12} = -\gamma \frac{m_1 m_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^3} (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (2.4)$$

Für zwei punktförmige Teilchen wächst die Gravitationskraft somit mit dem Produkt

## 2 Klassische Mechanik

der beiden Massen, sie wirkt in Richtung der Verbindung zwischen den beiden Teilchen und sie fällt mit  $1/r^2$  als Funktion des Abstandes  $r$  ab. Ihre Stärke wird durch die **Gravitationskonstante** bestimmt,  $\gamma \simeq 6.7 \cdot 10^{-11} \frac{m^3}{kg \cdot s^2}$ .

### Coulomb-Kraft

Gravitation ist eine anziehende Kraft. Die Coulomb-Kraft zwischen zwei elektrischen Ladungen dagegen kann sowohl anziehend als auch abstoßend sein. Sie hat die gleiche Form wie die Gravitationskraft:

$$\vec{F}_{12} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^3} (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (2.5)$$

Die Coulomb-Kraft wächst mit dem Produkt der beiden Ladungen  $q_1, q_2$ , und ihre Stärke wird beschrieben durch die **Coulomb-Konstante**  $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \simeq 9 \cdot 10^9 \frac{Vm}{As}$ . Gleichartige Ladungen stoßen sich ab, und entgegengesetzte Ladungen ziehen sich gegenseitig an.

### Vergleich der beiden Kräfte

Welche der beiden Kräfte, Gravitation oder Coulomb, ist stärker? Da beide Kräfte mit  $1/r^2$  abfallen, können wir ihre Stärken miteinander vergleichen. Ein Elektron hat die Masse  $m \simeq 10^{-30} kg$  und die Ladung  $q = -10^{-19} C$ . Setzen wir dies in die beiden Konstanten ein, so finden wir, dass für zwei Elektronen die Coulomb-Kraft etwa einen Faktor  $10^{42}$  mal stärker als die Gravitationskraft ist. Gravitation ist demnach extrem schwach. Das gilt natürlich nicht für zwei Planeten, bei denen nur die Schwerkraft wirkt.

### Lorentz-Kraft

Elektrische Ladungen erzeugen elektrische Felder  $\vec{E}$ , und elektrische Ströme erzeugen Magnetfelder  $\vec{B}$ . Diese beiden Felder wirken auf eine bewegte Ladung  $q$  mit der Kraft

$$\vec{F} = q\vec{E}(\vec{r}) + q(\vec{v} \times \vec{B}(\vec{r})) \quad (2.6)$$

Diese **Lorentzkraft** enthält somit nicht nur den Ort  $\vec{r}$ , sondern auch die Geschwindigkeit  $\vec{v}$  des Teilchens. Der elektrische Anteil wirkt in Richtung des elektrischen Feldes, der magnetische Anteil dagegen wirkt senkrecht zum Magnetfeld und senkrecht zur Geschwindigkeit. Wir werden später sehen, dass der magnetische Anteil keine Arbeit leistet.

## 2.2 Physikalische Größen und Erhaltungssätze

Selbst wenn wir die Bahnen der Teilchen nicht bestimmen können, so können wir dennoch quantitative Aussagen über das System machen. Das liegt daran, dass es in der Physik Erhaltungsgrößen gibt, also physikalische Größen, die sich als Funktion der Zeit nicht ändern. Die wichtigste Erhaltungsgröße ist die Energie. Sie spielt nicht nur in der klassischen Mechanik sondern in allen Bereichen der Physik und Technik eine wichtige Rolle. Energie kann nicht erzeugt oder vernichtet werden, sondern verschiedene Formen der Energie können nur ineinander umgewandelt werden.

Je nach System gibt es jedoch noch weitere Erhaltungsgrößen. Im Folgenden wollen wir diese physikalischen Größen für ein einziges Teilchen definieren und untersuchen.

### 2.2.1 Impuls

Der **Impuls** eines Teilchens ist definiert als das Produkt von Masse und Geschwindigkeit des Teilchens,

$$\boxed{\vec{p} = m\vec{v}} \quad (2.7)$$

Wenn es keine Wirkung auf das Teilchen gibt, wenn die Kräfte verschwinden,  $\vec{F} = 0$ , so bleibt nach dem Newton-Gesetz 2.1 der Impuls zeitlich konstant,  $\frac{d\vec{p}}{dt} = 0$ , es gilt Impulserhaltung.

### 2.2.2 Drehimpuls

Selbst wenn Kräfte wirken, kann der **Drehimpuls**  $\vec{l}$  eines Teilchens eine Erhaltungsgröße sein. Er ist definiert als das Vektorprodukt von Ort und Impuls. Der Drehimpulsvektor steht demnach senkrecht auf dem Ortsvektor und der Geschwindigkeit des Teilchens:

$$\boxed{\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}} \quad (2.8)$$

Welche Gleichung beschreibt die Bewegung des Drehimpulses? Dazu leiten wir mit der Produktregel das Vektorprodukt nach der Zeit ab

$$\frac{d\vec{l}}{dt} = \frac{d}{dt}(\vec{r} \times \vec{p}) = m(\underbrace{\dot{\vec{r}} \times \dot{\vec{r}}}_{=0}) + (\vec{r} \times \dot{\vec{p}}) = \vec{r} \times \vec{F}$$

## 2 Klassische Mechanik

Die rechte Seite definieren wir nun als das **Drehmoment**  $\vec{M}$  und erhalten die Bewegungsgleichung

$$\vec{M} = \vec{r} \times \vec{F} \Rightarrow \frac{d\vec{l}}{dt} = \vec{M} \quad (2.9)$$

Wenn das Drehmoment verschwindet  $\vec{M} = 0$ , so bleibt der Drehimpuls zeitlich konstant, er ist eine Erhaltungsgröße.

### Zentralkraft

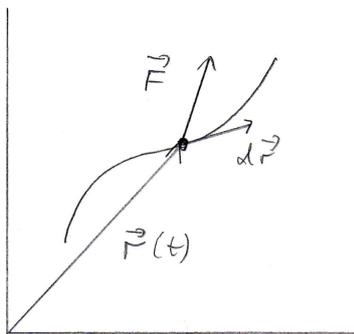
Als Beispiel für die Drehimpulserhaltung betrachten wir ein Teilchen, das sich unter einer Zentralkraft bewegt,  $\vec{F} \parallel \vec{r}$ . Damit verschwindet das Vektorprodukt  $\vec{r} \times \vec{F} = 0$ , es gibt kein Drehmoment und der Drehimpuls ändert sich nicht.

### 2.2.3 Arbeit und Leistung

Eine Form der Energie ist die Arbeit, die eine Kraft an einem Teilchen leistet. Wenn wir eine winzig kleine Änderung  $d\vec{r}$  der Bahn betrachten, so ist die Arbeit  $dW$  definiert als das Skalarprodukt

$$dW = \vec{F} \cdot d\vec{r} \quad (2.10)$$

Nur die Projektion der Kraft auf die Tangente der Bahn leistet demnach Arbeit



## 2 Klassische Mechanik

Integrieren wir diese Arbeit längs einer Bahn  $C$ , so erhalten wir

$$W = \int_C dW = \int_C \vec{F} \cdot d\vec{r} = \int_{t_a}^{t_e} \vec{F} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} dt = \int_{t_a}^{t_e} \vec{F} \cdot \vec{v} dt$$

Das Skalarprodukt von Kraft und Geschwindigkeit ist somit die geleistete Arbeit pro Zeit, die **Leistung**

$$\boxed{P = \frac{dW}{dt} = \vec{F} \cdot \vec{v}} \quad (2.11)$$

Die physikalische Dimension der Arbeit ist das **Joule**, die der Leistung ist das **Watt**.

$$[W] = \text{Joule} = \text{J} = \text{Nm} = \text{kg m}^2/\text{s}^2, \quad [P] = \text{Watt} = \text{W} = \text{J/s}$$

### Magnetfeld

Der magnetische Anteil der Lorentzkraft 2.6 leistet keine Arbeit. Denn die magnetische Kraft steht senkrecht auf der Geschwindigkeit, und somit verschwindet das Skalarprodukt zwischen Kraft und Geschwindigkeit,  $\vec{F} \cdot \vec{v} = 0$  und damit auch die Leistung  $P$ .

### 2.2.4 Kinetische Energie

Kräfte leisten Arbeit. Welche Bewegungsgröße ändert sich dadurch? Dazu definieren wir die **kinetische Energie** eines Teilchens

$$\boxed{T = \frac{1}{2}mv^2} \quad (2.12)$$

und leiten sie nach der Zeit ab, wieder mit der Produktregel und dem Newton-Gesetz

$$\frac{dT}{dt} = \frac{m}{2} \frac{d}{dt}(\vec{v} \cdot \vec{v}) = \frac{m}{2}(\dot{\vec{v}} \cdot \vec{v} + \vec{v} \cdot \dot{\vec{v}}) = \vec{F} \cdot \vec{v}$$

Die geleistete Arbeit wird demnach in kinetische Energie umgewandelt,

$$\boxed{\frac{dT}{dt} = P = \vec{F} \cdot \vec{v}, \quad T - W = \text{konst.}} \quad (2.13)$$

Dieses Resultat gilt für sämtliche Kräfte, auch Reibungskräfte. Allerdings ist – im Gegensatz zu  $T$  – die Größe  $W$  keine Funktion des momentanen Ortes oder der momentanen Geschwindigkeit des Teilchens, sondern sie hängt von der zurückgelegten Bahn ab. Die Differenz der kinetischen Energie zwischen zwei Punkten auf einer Bahn hängt im Allgemeinen von einem Integral über den zurückgelegten Weg zwischen den beiden Punkten ab. Für die Gravitations- oder Lorentz-Kraft geht es jedoch einfacher, durch Einführen einer potentiellen Energie.

### 2.2.5 Potenzial

Eine Kraft  $\vec{F}$  heißt **konservativ**, wenn es eine Funktion  $U(\vec{r})$  gibt, so dass die Kraft als negativer Gradient dieser Funktion geschrieben werden kann:

$$\vec{F} = -\nabla U(\vec{r}) = - \begin{pmatrix} \frac{\partial U}{\partial x} \\ \frac{\partial U}{\partial y} \\ \frac{\partial U}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

Die Funktion  $U(\vec{r})$  wird **Potenzial** genannt. Sie hat die Dimension Kraft mal Länge, sie ist also eine Energie. Im Gegensatz zur Arbeit  $W$  hängt sie nur vom Ort  $\vec{r}$  der Bahn ab.

Ob eine Kraft konservativ ist, kann durch folgende mathematische Aussage geprüft werden:  
Eine Kraft ist genau dann konservativ, wenn die Rotation der Kraft überall verschwindet,

$$\vec{F} \text{ konservativ} \Leftrightarrow \nabla \times \vec{F} = 0$$

### Potenziale der Lorentzkraft

Gibt es für die Lorentzkraft ebenfalls ein Potenzial? Die Elektrodynamik, die Theorie der elektrischen und magnetischen Felder, gibt uns Potenziale, die ein wenig komplizierter sind als der Gradient einer Funktion. Für zeitlich konstante Felder ist zwar das elektrische Feld immer noch der Gradient eines skalaren Potenzials  $\varphi$ , aber das magnetische Feld ist die Rotation eines Vektorpotenzials  $\vec{A}$ .

$$\vec{F} = -q\nabla\varphi + q(\vec{v} \times (\nabla \times \vec{A}))$$

Für zeitlich veränderliche Felder wird es noch komplizierter, zum elektrischen Anteil kommt noch die zeitliche Ableitung des Vektorpotenzials hinzu,

$$\vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

Damit werden wir uns in der zweiten Theorie-Vorlesung ausführlich beschäftigen.

## Gradient

Wir wollen die Eigenschaften des Gradienten kurz wiederholen.

- Der Vektor  $\nabla U(\vec{r})$  zeigt in die Richtung des steilsten Anstieges von  $U$  am Ort  $\vec{r}$
- Eine winzige Änderung  $dU$  in Richtung  $d\vec{r}$  ist  $dU = \nabla U \cdot d\vec{r}$
- Der Gradient liefert die beste lineare Näherung (Differential) von  $U$  am Ort  $\vec{r}$ , dargestellt durch die Taylor-Entwicklung

$$U(\vec{r} + d\vec{r}) = U(\vec{r}) + \nabla U \cdot d\vec{r} + O((d\vec{r})^2)$$

- Das Integral über  $dU$  ist unabhängig vom Weg  $C$  und liefert die Potenzialdifferenz

$$U(\vec{r}_b) - U(\vec{r}_a) = \int_{\vec{r}_a}^{\vec{r}_b} dU = \int_C \nabla U \cdot d\vec{r} = \int_{t_a}^{t_b} \nabla U \cdot \vec{v} dt = - \int_{t_a}^{t_b} \vec{F} \cdot \vec{v} dt = -W$$

Die geleistete Arbeit hängt demnach nicht mehr von der Bahn ab, sondern nur noch von der Potenzialdifferenz. Längs eines geschlossenen Weges wird keine Arbeit geleistet.

### 2.2.6 Energieerhaltung

Für ein Teilchen, das sich unter einer konservativen Kraft bewegt, gilt nun folgende wichtige Aussage:

$$E = \frac{1}{2}mv^2(t) + U(\vec{r}(t)) = \text{konstant} \quad (2.15)$$

Die Summe aus kinetischer und potentieller Energie ist zeitlich konstant.

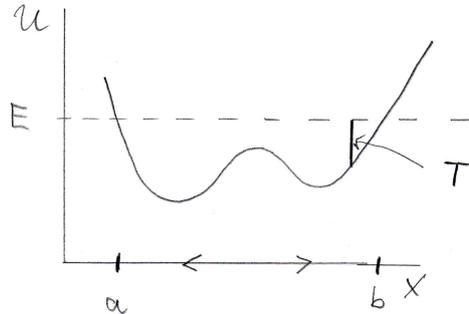
Die Größe  $E = T + U$  wird **Energie** genannt.

Wir wollen diese Aussage beweisen:

$$\begin{aligned} \frac{dU(\vec{r}(t))}{dt} &= \frac{d}{dt}U(x(t), y(t), z(t)) \stackrel{\text{Kettenregel}}{=} \frac{\partial U}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial U}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial U}{\partial z} \frac{dz}{dt} = \nabla U \cdot \vec{v} \\ &= -\vec{F} \cdot \vec{v} = -\frac{dT}{dt} \Rightarrow \frac{dE}{dt} = 0 \end{aligned}$$

## 2 Klassische Mechanik

Längs einer Bahn ist die gesamte Energie konstant, deshalb wird ständig kinetische Energie in potentielle umgewandelt und umgekehrt. Das wird in der folgenden Skizze für eine eindimensionale Bewegung mit der Energie  $E = \frac{m}{2}\dot{x}^2 + U(x)$  dargestellt:



Die kinetische Energie  $T$  wird ständig in potentielle  $U$  umgewandelt. An den Punkten  $a$  und  $b$  verschwindet die kinetische Energie, das Teilchen kommt zur Ruhe und kehrt die Bewegungsrichtung um. Das Teilchen schwingt demnach ständig zwischen den beiden Umkehrpunkten hin und her. Das können wir schon sagen, ohne die Bewegungsgleichungen wirklich lösen zu müssen. Energieerhaltung ist ein wichtiges Prinzip um Bewegungen zu beschreiben.

Das gilt nicht nur in der klassischen Mechanik, sondern in sämtlichen Bereichen der Physik. Wenn beispielsweise ein Elektron in einem Atom in einen energetisch höheren Zustand springt, so nimmt es beispielsweise die Energie dafür von einem Lichtteilchen, einem Photon auf.

### Gravitationspotential

Welches Potenzial liefert die Gravitations- oder Coulomb-Kraft 2.4? Für die Gravitation erhalten wir das Potenzial

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = -\gamma \frac{m_1 m_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (2.16)$$

Das Gravitations- und Coulomb-Potenzial hängt demnach nur vom Abstand  $r$  zwischen den beiden Teilchen ab und fällt wie  $1/r$  ab. Die Kraft als Ableitung des Potenzials fällt dagegen wie  $1/r^2$  ab.

Die Kraft auf das Teilchen am Ort  $\vec{r}_1$  ist der Gradient des Potenzials nach diesem Ort,  $\vec{F}_{12} = -\nabla_1 U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ . Diesen Gradienten berechnen wir mithilfe der Kettenregel

## 2 Klassische Mechanik

$$U = -\gamma m_1 m_2 \frac{1}{r} \circ |\vec{r}| \circ (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

Die erste Ableitung gibt  $-\frac{1}{r^2}$ , der Gradient von  $|\vec{r}|$  ist der Einheitsvektor  $\vec{r}/|\vec{r}| = \vec{e}_r$  und die letzte Ableitung liefert den Wert 1. Wenn wir in diese Ausdrücke den Wert  $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$  einsetzen, so erhalten wir die Gravitationskraft 2.4. Die Kraft auf das zweite Teilchen erhalten wir durch den Gradienten nach  $\vec{r}_2$ . Damit erhält die letzte Ableitung den Wert -1 und es folgt das dritte Newton-Gesetz  $\vec{F}_{12} = -\vec{F}_{21}$ .

### 2.3 Systeme von Massenpunkten

Bisher haben wir nur die Bewegung eines einzelnen Teilchens untersucht. Bei mehreren, miteinander wechselwirkenden Teilchen gibt es analoge Erhaltungsgrößen. Jedes Teilchen bewegt sich mit der Newton-Gleichung 2.3. Jedes Teilchen hat einen Impuls, einen Drehimpuls, und eine kinetische Energie. Die Kraft auf ein Teilchen am Ort  $\vec{r}_\nu$  ist nach den Newton-Gesetzen die Summe von Kräften, die von den anderen Teilchen ausgeübt werden, und zusätzlich gibt es vielleicht noch eine äußere Kraft  $\vec{F}_\nu^a$ .

$$m_\nu \frac{d^2}{dt^2} \vec{r}_\nu = \vec{F}_\nu^a + \sum_{\mu=1, \mu \neq \nu}^N \vec{F}_{\nu\mu}$$

Bei mehreren wechselwirkenden Teilchen sind jedoch nicht die einzelnen Impulse, Drehimpulse und Energien erhalten, sondern nur die Summe der entsprechenden Größen. Wenn wir die vorige Bewegungsgleichung über alle Teilchen summieren, so erhalten wir

$$\frac{d^2}{dt^2} \left( \sum_{\nu} m_\nu \vec{r}_\nu \right) = \underbrace{\sum_{\nu} \vec{F}_\nu^a}_{\vec{F}} + \underbrace{\sum_{\nu} \sum_{\mu, \mu \neq \nu} \vec{F}_{\nu\mu}}_{=0}$$

Die inneren Kräfte fallen in dieser Summe weg, denn es gibt zu jeder Kraft  $\vec{F}_{\nu\mu}$  die entgegengesetzte  $\vec{F}_{\mu\nu} = -\vec{F}_{\nu\mu}$ . Wir definieren nun die Gesamtmasse  $M$  und den Schwerpunkt  $\vec{R}$ , die Summe der Ortsvektoren gewichtet mit der Masse, und den Gesamtimpuls  $\vec{P}$ ,

$$M = \sum_{\nu} m_\nu, \quad \vec{R} = \frac{1}{M} \sum_{\nu=1}^N m_\nu \vec{r}_\nu$$

## 2 Klassische Mechanik

und erhalten eine Bewegungsgleichung für den Schwerpunkt, die nur noch die äußeren Kräfte enthält,

$$\vec{P} = M\dot{\vec{R}} = \sum_{\nu} m_{\nu}\dot{\vec{r}}_{\nu} \Rightarrow \boxed{M\ddot{\vec{R}} = \vec{F} = \frac{d}{dt}\vec{P}} \quad (2.17)$$

Der Schwerpunkt bewegt sich demnach wie eine Punktmasse mit der äußeren Kraft, die inneren Kräfte und Bewegung spielen dabei keine Rolle. Wenn es keine äußeren Kräfte gibt, folgt

Ohne äußere Kräfte bleibt der Gesamtimpuls  $\vec{P}$  konstant.

Der gesamte Drehimpuls ist definiert als

$$\vec{L} = \sum_{\nu} \vec{l}_{\nu} = \sum_{\nu} m_{\nu}(\vec{r}_{\nu} \times \vec{v}_{\nu})$$

Analog zum Impuls kann man zeigen

Ohne äußere Kräfte bleibt der Gesamtdrehimpuls  $\vec{L}$  konstant.

Falls die äußeren Kräfte und die Wechselwirkungskräfte konservativ sind, so lassen sie sich als negativer Gradient von Potenzialen  $U^a$  und  $U$  ausdrücken. Damit ist die Gesamtenergie  $E$  eine Erhaltungsgröße:

$$\boxed{E = \sum_{\nu} \frac{m_{\nu}}{2} \vec{v}_{\nu}^2 + \sum_{\nu} U^a(\vec{r}_{\nu}) + \sum_{\nu < \mu} U(|\vec{r}_{\nu} - \vec{r}_{\mu}|)} \quad (2.18)$$

Beachte, dass bei der letzten Doppelsumme die Beiträge nicht doppelt gezählt werden dürfen.

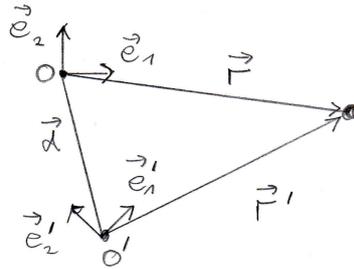
## 2.4 Bezugssysteme

Die Bewegung eines Teilchens  $\vec{r}(t)$  wird durch Koordinaten in einem Bezugssystem beschrieben, das aus drei orthonormalen Vektoren und einem Koordinatenursprung besteht. Die drei Vektoren sind mit der Rechten-Hand-Regel angeordnet.

## 2 Klassische Mechanik

Bezugssystem  $(0, \vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ ,  $\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij}$

Wir können jedoch unendlich viele solcher Bezugssysteme wählen. Beispielsweise sind die Bewegungsgleichungen im Schwerpunkt-System einfacher als im Labor-System. Wir können Experimente im fallenden Flugzeug (Parabelflug) oder im drehenden Labor (Erde) machen. Wie ändern sich die Bewegungsgleichungen, wenn wir das Bezugssystem wechseln?



In der Abbildung gibt es zwei Bezugssysteme, B und B'. Beide Beobachter messen die Bahn eines Teilchens,  $\vec{r}(t)$  und  $\vec{r}'(t)$ , mit jeweils den Koordinaten bezüglich ihrer Basisvektoren. Der Abstand zwischen den beiden Koordinaten-Nullpunkten sei  $\vec{d}(t)$ . Damit gilt offenbar die Relation

$$\vec{r}'(t) = \vec{r}(t) + \vec{d}(t) \quad (2.19)$$

Daraus folgt die Newton Gleichung

$$\vec{F}' = m \frac{d^2 \vec{r}'}{dt^2} = m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} + m \frac{d^2 \vec{d}}{dt^2} = \vec{F} + \vec{F}_s \quad (2.20)$$

Sie sehen, die Kraft kann sich durch Wechsel des Beobachters ändern. Im fallenden Aufzug oder auf der rotierenden Erde gibt es zusätzliche Scheinkräfte. Eine ruhende Ladung sieht kein Magnetfeld, aber für einen Beobachter, der sich mit konstanter Geschwindigkeit an der Ladung vorbei bewegt, hat die Ladung eine Geschwindigkeit, und somit gibt das Magnetfeld einen Beitrag zur Lorentzkraft 2.6.

### 2.4.1 Intertialsysteme, Galilei-Transformation

Das erste Newton-Gesetz sagt: ohne Ursache gibt es keine Beschleunigung. Bezugssysteme, in denen das erste Newton-Gesetz gilt, werden **Inertialsysteme** genannt. Betrachte

## 2 Klassische Mechanik

ten wir nun zwei solcher Inertialsysteme B und B'. Dann gilt

$$m \frac{d^2 \vec{r}'}{dt^2} = m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2 \vec{d}}{dt^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{d}(t) = \vec{v}_B t + \vec{d}_0$$

Das Bezugssystem B bewegt sich in B' mit konstanter Geschwindigkeit  $\vec{v}_B$ . Die entsprechenden Kräfte sind nach Gleichung 2.20 identisch, die Geschwindigkeiten eines Teilchens sind dagegen unterschiedlich:

$$\vec{v}'(t) = \vec{v}(t) + \vec{v}_B \quad (2.21)$$

Die Abbildung der Koordinaten von B und B' bezüglich ihrer Basisvektoren wird **Galilei-Transformation** genannt. Sie ist eine lineare Abbildung, die aus einer Rotation, einer konstanten Geschwindigkeit und einer konstanten Verschiebung besteht. Wenn sich beispielsweise B' in x-Richtung mit der Geschwindigkeit  $v_B$  bewegt, so gilt für  $\vec{d} = 0$

$$x' = x + v_B t, \quad t = t'$$

Beide Beobachter lesen an ihren Uhren dieselbe Zeit ab. Diese Transformation zwischen Inertialsystemen gilt für Ereignisse wie die Bahnen von Körpern oder die Bewegung von Schallwellen.

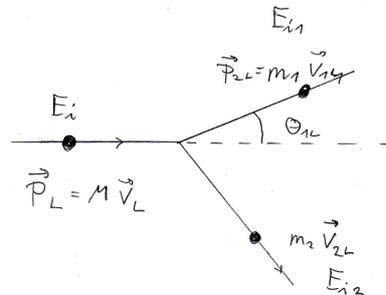
Experimente haben jedoch gezeigt, dass die Transformation nicht für Lichtblitze gilt. Licht breitet sich immer mit der Lichtgeschwindigkeit  $c$  aus, unabhängig von der Bewegung des Beobachters relativ zur Lichtquelle. Für die Front eines Lichtblitzes gilt  $v = v' = c$ , während aus Galilei Transformation  $v = v' - v_B$  folgt. Albert Einstein hat dieses Rätsel gelöst, indem er gefolgert hat, dass die beiden Beobachter unterschiedliche Zeiten an ihren Uhren ablesen,  $c = \frac{dx}{dt} = \frac{dx'}{dt'} = c'$ . Es gibt eine lineare Transformation von *Raum und Zeit*, die **Lorentztransformation**

$$\begin{aligned} x' &= \gamma (x - vt) \\ t' &= \gamma \left( t - \frac{x v}{c^2} \right) \\ \gamma &= \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \end{aligned}$$

Das sind die Gleichungen der **speziellen Relativitätstheorie**. Diese Abbildung zwischen den Koordinaten der beiden Beobachter führt zu überraschenden Erkenntnissen: Längen schrumpfen, Zeitintervalle werden länger und Gleichzeitigkeit ist sinnlos. Wir werden diese Eigenschaften in der zweiten Vorlesung näher untersuchen. In diesem Semester bleiben wir bei der Galilei Transformation, die für Geschwindigkeiten gilt, die relativ klein zur Lichtgeschwindigkeit sind, so dass wir relativistische Korrekturen vernachlässigen können.

**Zerfall eines Teilchens**

Als Beispiel für die Nützlichkeit der Galilei Transformation betrachten wir den Zerfall eines Atomkerns, der sich im Labor mit konstanter Geschwindigkeit bewegt.

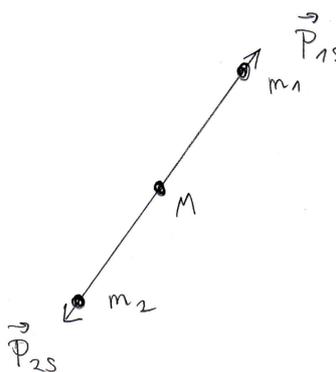


Wir wollen die Verteilung der kinetischen Energie der beiden Bruchstücke berechnen, die wir im Labor messen. Dabei verwenden wir zwei Erhaltungsgrößen: Energie und Impuls. Der Atomkern besitzt eine innere Energie  $E_i$ , die bei dem Zerfall teilweise in kinetische Energie der beiden Bruchstücke umgewandelt wird. Die beiden Erhaltungsgrößen lauten demnach

$$\frac{p^2}{2M} + E_i = \frac{p_1^2}{2m_1} + E_{i1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + E_{i2}, \quad \vec{p} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$$

Diese Gleichungen gelten in sämtlichen Inertialsystemen. Wie berechnen wir nun die Verteilung der kinetische Energie  $T_1 = p_1^2/2m_1$  des Teilchens mit der Masse  $m_1$ ? Dazu ist es hilfreich, wenn wir die vorigen Erhaltungsgrößen im Schwerpunktsystem betrachten. Denn im Schwerpunktsystem bewegt sich der Atomkern nicht,  $\vec{p}_S = 0$ , und daraus folgt

$$\vec{p}_{1S} = -\vec{p}_{2S} \quad \Rightarrow \quad |\vec{p}_{1S}| = |\vec{p}_{2S}| = p_S$$



## 2 Klassische Mechanik

Der Energiesatz lautet damit

$$E_i = \frac{p_S^2}{2m_1} + E_{i1} + \frac{p_S^2}{2m_2} + E_{i2} \Rightarrow \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)p_S^2 = 2 \underbrace{(E_i - E_{i1} - E_{i2})}_{\Delta E_i} > 0$$

Mit der reduzierten Masse  $m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  erhalten wir somit

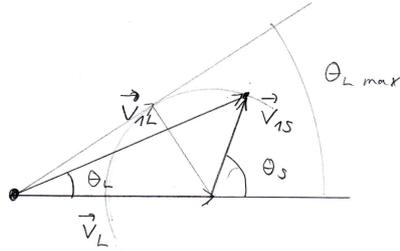
$$\boxed{p_S = \sqrt{2m\Delta E_i}, \quad T_{1S} = \frac{p_S^2}{2m_1}} \quad (2.22)$$

Die Änderung der inneren Energie wird somit in kinetische Energie der beiden Bruchstücke umgewandelt, und im Schwerpunktsystem gibt es nur einen festen Wert der kinetischen Energie  $T_{1S}$ .

Allerdings sieht das im Labor ganz anders aus, denn dort beobachtet man eine breite Verteilung der kinetischen Energie. Woran liegt das?

Die Geschwindigkeit des Atomkerns  $\vec{v}_L$  ist die Geschwindigkeit des Schwerpunktsystems B=S im Laborsystem B',  $\vec{v}_B = \vec{v}_L$ . Die Gleichung 2.21 wird damit zu

$$\vec{v}_{1L} = \vec{v}_{1S} + \vec{v}_L$$



Damit berechnen wir die kinetische Energie des Teilchens mit der Masse  $m_1$  im Laborsystem:

$$T_{1L} = \frac{m_1}{2} v_{1L}^2 = \frac{m_1}{2} (\vec{v}_{1S} + \vec{v}_L)^2 = \frac{m_1}{2} (v_{1S}^2 + v_L^2 + 2v_{1S}v_L \cos \theta_s)$$

Im Schwerpunktsystem zeigt die Geschwindigkeit  $\vec{v}_{1S}$  mit gleicher Wahrscheinlichkeit in sämtliche Richtungen, deshalb ist die Größe  $\cos \theta_S$  zwischen +1 und -1 verteilt.

Die kinetische Energie ist demnach verteilt zwischen den Werten

$$T_{\min} = \frac{m_1}{2} (v_L - v_{1S})^2 < T_{1L} < T_{\max} = \frac{m_1}{2} (v_L + v_{1S})^2$$

## 2 Klassische Mechanik

Man kann sogar die Verteilung berechnen, denn sie ist die Verteilung von  $\cos \theta$  für einen gleichverteilten Vektor auf der dreidimensionalen Einheitskugel. Das Ergebnis finden Sie in den Lehrbüchern über Stochastik: der Wert von  $\cos \theta$  ist gleichverteilt. Im Experiment erhalten wir also eine konstante Verteilung der kinetischen Energie  $T_{1L}$  zwischen den Werten  $T_{\min}, T_{\max}$ .

Mit etwas mehr Aufwand lässt sich die Winkelverteilung der Masse  $m_1$  berechnen. Aus der obigen Skizze können wir jedoch Folgendes feststellen: Im Fall hoher Geschwindigkeiten des einfahrenden Atomkerns,  $v_L > v_{1S}$ , gibt es im Labor einen maximalen Ablenkungswinkel

$$\max(\sin \theta_L) = \frac{v_{1S}}{v_L}$$

### 2.4.2 Fallender Aufzug

Kann man auf der Erde die Schwerkraft ausschalten? In der Tat gibt es Experimente, die fast ohne Schwerkraft durchgeführt werden. Entweder wird das Labor fallen gelassen, beispielsweise im 110 m hohen Bremer Fallturm, oder ein Airbus A300 fliegt parabelförmig auf die Erde zu. Im ersten Fall dauert das Experiment 5, im zweiten Fall 22 Sekunden. Im Fallturm fliegen keine Studenten mit, wogegen Würzburger Studenten schon einen Parabelflug mitgemacht haben, natürlich nur nach Tests, Training und mit Medikamenten gegen Übelkeit.

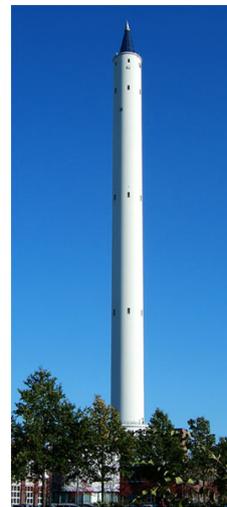


Abbildung 2.2: Parabelflug und Fallturm. Quelle: Wikipedia

Die Newton-Gleichungen dazu haben wir schon kennen gelernt. Auf das Labor, dem Bezugssystem  $B'$ , wirkt die Schwerkraft  $-mg\vec{e}_z$ . Die Erde ist das Bezugssystem  $B$ , und

## 2 Klassische Mechanik

der Abstandsvektor zum Labor ist  $-\vec{d}$ . Für den freien Fall gilt demnach  $m \frac{d^2(-\vec{d})}{dt^2} = -mg\vec{e}_z$ . Damit wird die Gleichung 2.20 zu

$$\vec{F}' = -mg\vec{e}_z + mg\vec{e}_z = 0$$

Zu dieser Kraft werden weitere Kräfte addiert, die auch im Bezugssystem B wirken würden. Im frei fallenden Labor gibt es also keine Schwerkraft, die Scheinkraft kompensiert gerade die Schwerkraft in B.

Allerdings stimmt das nicht ganz. Denn in den obigen Gleichungen gibt es genau genommen zwei verschiedene Massen. Die eine ist der Widerstand gegen die Beschleunigung, die träge Masse, und die andere ist der Koeffizient der Schwerkraft, die schwere Masse.

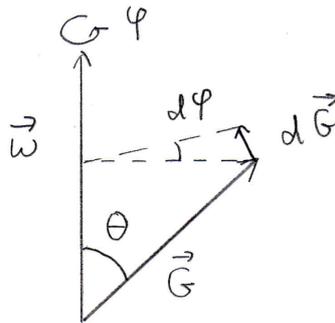
$$m_{\text{träge}} \ddot{\vec{d}} = m_{\text{schwer}} \vec{g}$$

Albert Einstein hat postuliert, dass diese beiden Massen identisch sind, und diese Gleichheit ist die Grundlage für die **allgemeine Relativitätstheorie**, die hervorragend vom Experiment bestätigt wurde.

### 2.4.3 Rotierendes Bezugssystem

Wie lauten die Newtonschen Bewegungsgleichungen im rotierenden Bezugssystem, beispielsweise auf der Erde? Wir hatten schon gesehen, Gl. 2.20, dass es im beschleunigten Bezugssystem Scheinkräfte gibt, und nun wollen wir diese Kräfte für ein rotierendes Bezugssystem berechnen.

Das Bezugssystem B' drehe sich im Inertialsystem B mit der Winkelgeschwindigkeit  $\omega = \frac{d\varphi}{dt}$  um die Achse  $\vec{\omega} = \frac{d\vec{\varphi}}{dt}$



Ein in B' konstanter Vektor  $\vec{G}$  dreht sich in B, und nach der obigen Skizze erhalten wir

$$d\vec{G}_B = d\vec{\varphi} \times \vec{G}, \quad |d\vec{G}| = |\vec{G}| \sin \theta d\varphi \quad (2.23)$$

## 2 Klassische Mechanik

Wenn  $\vec{G}(t)$  sich zusätzlich in B' bewegt, so addieren sich die infinitesimalen Änderungen

$$d\vec{G}_B = d\vec{G}_{B'} + d\vec{\varphi} \times \vec{G} \quad (2.24)$$

Für eine Bahn  $\vec{G}(t) = \vec{r}(t) = \vec{r}'(t)$  eines Teilchens folgt damit

$$d\vec{r}_B = \underbrace{d\vec{r}_{B'}}_{d\vec{r}'_{B'}} + d\vec{\varphi} \times \vec{r}' \Rightarrow \boxed{\vec{v} = \vec{v}' + \vec{\omega} \times \vec{r}'} \quad (2.25)$$

Im Inertialsystem B wird demnach zur Geschwindigkeit im rotierenden System noch der Beitrag  $\vec{\omega} \times \vec{r}'$  addiert. Nun wollen wir die Gleichung 2.24 zur Berechnung der Beschleunigung verwenden. Das wird komplizierter. Für die Geschwindigkeit  $\vec{G}(t) = \vec{v}(t) = \vec{v}' + \vec{\omega} \times \vec{r}'$  gibt uns die Gleichung 2.24

$$d\vec{v}_B = d\vec{v}_{B'} + d\vec{\varphi} \times \vec{v}, \Rightarrow \left(\frac{d\vec{v}}{dt}\right)_B = \left(\frac{d\vec{v}}{dt}\right)_{B'} + \vec{\omega} \times \vec{v}$$

Vorsicht: die Ableitung auf der rechten Seite ist die Beschleunigung in B, gemessen in B', aber nicht die Beschleunigung in B'! Um diese zu erhalten, müssen wir die Gleichung 2.25 einsetzen:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\vec{v}}{dt}\right)_B &= \frac{d}{dt} \left(\vec{v}' + \vec{\omega} \times \vec{r}'\right)_{B'} + \vec{\omega} \times (\vec{v}' + \vec{\omega} \times \vec{r}') = \left(\frac{d\vec{v}'}{dt}\right) + \vec{\omega} \times \vec{v}' + \vec{\omega} \times \vec{v}' + \vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}') \\ \Rightarrow &\boxed{\vec{F}' = m \frac{d^2 \vec{r}'}{dt^2} = \vec{F} - 2m(\vec{\omega} \times \vec{v}') - m\vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{r}')} \end{aligned} \quad (2.26)$$

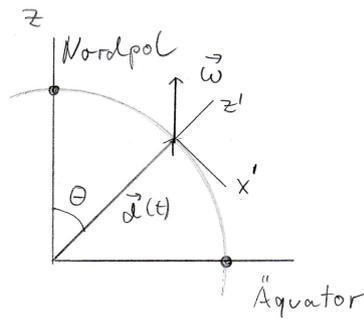
Im rotierenden System erhalten wir somit zusätzlich zur Kraft  $\vec{F}$  im Inertialsystem zwei zusätzliche Scheinkräfte. Die erste ist die **Coriolis-Kraft**, sie wirkt senkrecht zur Geschwindigkeit  $\vec{v}'$  des Teilchens und nimmt mit der Winkelgeschwindigkeit  $\omega$  zu. Die zweite Scheinkraft ist die **Zentrifugalkraft**, sie steht senkrecht auf der Drehachse  $\vec{\omega}$  und nimmt mit dem Quadrat der Winkelgeschwindigkeit zu.

### Labor auf der Erde

Wie sieht das nun in einem Labor auf der Erde aus? Die vorigen Gleichungen gelten nur am Nordpol, denn zusätzlich zur Drehung um die Erdachse mit  $\omega = \frac{2\pi}{T_{\text{tag}}}$  wird unser Labor in Würzburg mit der Geschwindigkeit 1271 km/h durch das Weltall geschleudert,

$$\vec{r}(t) = \vec{r}'(t) + \vec{d}(t)$$

## 2 Klassische Mechanik



Wir wählen die Koordinaten im Erdlabor  $B'$  so, dass  $z'$  nach oben,  $x'$  nach Süden und  $y'$  nach Osten zeigt. Die Formel 2.26 verwenden wir nun für die Bewegung  $\vec{d}(t)$  unseres Labors. Auf der Erde  $B'$  ruht der Vektor  $\vec{d}'$ , somit erhalten wir  $\ddot{\vec{d}} = \vec{\omega} \times (\vec{\omega} \times \vec{d}) \propto \omega^2$ . Dieser Ausdruck ist klein und korrigiert ein wenig die Erdbeschleunigung  $\vec{g}$ , wir vernachlässigen ihn im Folgenden, ebenso wie die Zentrifugalkraft für die Bahn  $\vec{r}(t)$  eines Teilchens. Damit wird die Bewegungsgleichung für die Bahn eines Körpers auf der Erde, der sich unter der Schwerkraft bewegt:

$$m \frac{d^2 \vec{r}'}{dt^2} = -mg \vec{e}_{z'} - 2m(\vec{\omega} \times \vec{v}') \quad (2.27)$$

Zusätzlich zur Schwerkraft messen wir eine Coriolis-Kraft, die 1835 von Gaspard Gustave de Coriolis aus den Newton-Gleichungen hergeleitet wurde.

### Tiefdruckwirbel

In welche Richtung zeigt die Coriolis-Kraft auf der Nordhalbkugel? Der Vektor  $\vec{\omega}$  zeigt in Richtung des Nordpols, und das Vektorprodukt  $\vec{\omega} \times \vec{v}'$  zeigt nach der Rechte-Hand-Regel nach links bezüglich der Bewegungsrichtung. Wegen des Minuszeichens zeigt demnach die Coriolis-Kraft nach rechts. Das sieht man beispielsweise an den großflächigen Tiefdruckwirbeln der Wolken. Ein Tiefdruckgebiet zieht die Wolken in seinem Zentrum, und die Coriolis-Kraft addiert eine Bewegung nach rechts. Daraus entsteht ein Wirbel entgegen des Uhrzeigersinns.

### Foucault-Pendel

Im Jahr 1851 zeigte Leon Foucault ein Aufsehen erregendes Experiment: im Pantheon in Paris ließ er ein 67 m langes Pendel schwingen, und aus der Drehung der Pendelebene konnte er auf die Rotation der Erde schließen. Das wurde zwar schon im Jahr 1661

## 2 Klassische Mechanik



Abbildung 2.3: Tiefdruck-Spirale der Wolkenbewegung über Island. Quelle: Wikipedia

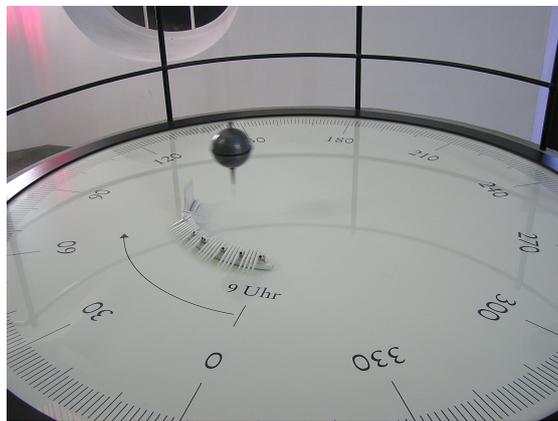


Abbildung 2.4: Foucault-Pendel im Deutschen Museum. Quelle: Wikipedia

demonstriert, aber erst durch Foucault wurde es der Öffentlichkeit bekannt, und nun glaubte wohl auch der letzte Zweifler, dass sich die Erde und nicht der Himmel dreht.

Wir wollen nun die Drehung der Pendelebene mithilfe der Gleichung 2.27 berechnen. Dazu verwenden wir die Koordinaten  $x', y', z'$  im Bezugssystem B' auf der Erde. Der Drehvektor lautet damit

$$\vec{\omega} = \omega \vec{e}_z = \omega \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ 0 \\ \cos \theta \end{pmatrix}$$

Damit wird die Coriolis Kraft zu

$$-2m(\vec{\omega} \times \vec{v}') = -2m\omega \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ 0 \\ \cos \theta \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} v'_x \\ v'_y \\ v'_z \end{pmatrix} = -2m\omega \begin{pmatrix} -\cos \theta v'_y \\ \cos \theta v'_x + \sin \theta v'_z \\ -\sin \theta v'_y \end{pmatrix}$$

Für kleine Auslenkungen des Pendels können wir  $z' = 0, v'_z = 0$  setzen, und die Rückstellkraft der Stärke  $mg/L$  wirkt in der  $(x', y')$ -Ebene. Die Gleichung 2.27 wird somit zu zwei Differenzialgleichungen

$$\begin{aligned} \ddot{x}' + \frac{g}{L}x' - 2\omega \sin \phi \dot{y}' &= 0 \\ \ddot{y}' + \frac{g}{L}y' + 2\omega \sin \phi \dot{x}' &= 0 \end{aligned} \quad (2.28)$$

Der Winkel  $\phi = \frac{\pi}{2} - \theta$  ist die geographische Breite. Wir erhalten somit zwei gekoppelte lineare Differenzialgleichungen zweiter Ordnung. Der Lösungsweg ist nicht ganz einfach, wir behandeln ihn in den Übungen. Die Rückstellkraft deutet auf eine Schwingung mit der Frequenz  $\sqrt{g/L}$  hin, wogegen die Coriolis-Kraft auf eine Drehung mit der Frequenz  $\omega \sin \phi$  schließen lässt. In der Tat liefert die Lösung ein Produkt dieser beiden Schwingungen,

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = C \cos\left(\sqrt{\frac{g}{L}}t\right) \begin{pmatrix} \cos[(\omega \sin \phi)t] \\ \sin[(\omega \sin \phi)t] \end{pmatrix}$$

Mit einer Länge von  $L = 67\text{m}$  erhält man die Schwingungsdauer  $T = \frac{2\pi}{\sqrt{g/L}} \simeq 16\text{s}$ . In Würzburg dreht sich die Ebene in 15,6 Stunden um 180 Grad, während sie in München etwa 40 Minuten länger braucht. Am Nordpol,  $\phi = \pi/2$ , dreht sich die Erde unter dem Pendel durch, und die Drehebene benötigt demnach nur 12 Stunden. Am Äquator dagegen dreht sich das Pendel gar nicht.

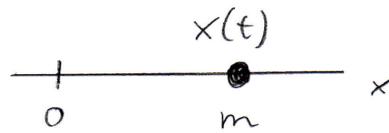
## 2.5 Eindimensionale Bewegung

Wenn die Kraft auf ein Teilchen linear im Ort (harmonischer Oszillator) oder Geschwindigkeit (Reibung) ist, dann entkoppeln die drei Newton-Gleichungen für die einzelnen Komponenten  $x, y$  und  $z$ . Auch bei der Bewegung zweier miteinander gekoppelter Teilchen werden wir später zeigen, dass die entsprechenden sechs Differenzialgleichungen zu einer einzigen eindimensionalen Newton-Gleichung reduziert werden können.

Deshalb ist es nützlich, sich mit der eindimensionalen Newton-Gleichung zu beschäftigen,

$$m\ddot{x}(t) = F(x(t), \dot{x}(t), t) \quad (2.29)$$

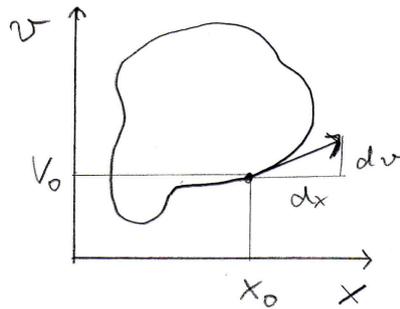
## 2 Klassische Mechanik



Das ist eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung für die Funktion  $x(t)$ . Deren Lösung wird beispielsweise durch die Anfangsbedingungen ( $x_0 = x(0), v_0 = \dot{x}(0)$ ) eindeutig bestimmt. Alternativ kann man auch schreiben

$$\dot{v} = \frac{F(x, v, t)}{m}, \quad \dot{x} = v$$

Wir erhalten demnach zwei gekoppelte Differentialgleichungen erster Ordnung. Oder geometrisch ausgedrückt: an jedem Ort der  $(v, x)$ -Ebene geben diese Gleichungen eine Steigung, wir erhalten ein Richtungsfeld. Geben wir einen Startwert  $(x_0, v_0)$  in dieser Ebene vor, so ist die Kurve  $v(x)$  eindeutig bestimmt.



Im Folgenden wollen wir fünf Fälle untersuchen:

- Die Kraft hängt nur von der Zeit ab, beispielsweise bei einer Ladung im Laserfeld
- Die Kraft hängt nur vom Ort ab, das Teilchen bewegt sich in einem Potenzial.
- Die Kraft hängt nur von der Geschwindigkeit ab, beispielsweise bei der Reibung.
- Die Kraft ist linear im Ort und der Geschwindigkeit, beim harmonischen Oszillator
- und schließlich, der harmonische Oszillator wird zusätzlich angetrieben.

### 2.5.1 $F(t)$

In diesem Fall ist die Lösung der Newton-Gleichung  $\dot{v} = F(t)/m$  besonders einfach. Wir integrieren sie zweimal und erhalten

$$v(t) = v_0 + \frac{1}{m} \int_{t_0}^t F(t') dt' \quad (2.30)$$

$$x(t) = x_0 + v_0(t - t_0) + \frac{1}{m} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} F(t'') dt'' dt'$$

Für eine konstante Kraft  $F = mg$  erhalten wir damit

$$v(t) = v_0 + g(t - t_0), \quad x(t) = x_0 + v_0(t - t_0) + \frac{g}{2}(t - t_0)^2$$

Dieses Gesetz wurde schon von Galileo Galilei im Jahr 1636 für den freien Fall gefunden.

### 2.5.2 $F(x)$

Hängt die Kraft dagegen nur vom Ort ab, so gibt es immer ein Potenzial

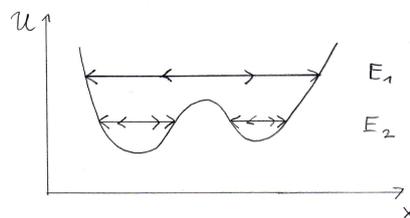
$$U(x) = - \int_{x_0}^x F(x') dx' \quad (2.31)$$

Wie wir schon gesehen haben, ist die Energie eine Erhaltungsgröße

$$E = \frac{m}{2}v^2 + U(x) = \text{konstant}$$

Diese Gleichung können wir nach der Geschwindigkeit auflösen, und ohne zu integrieren erhalten wir die Geschwindigkeit als Funktion des Ortes

$$v(x) = \pm \sqrt{\frac{2}{m}[E - U(x)]}$$



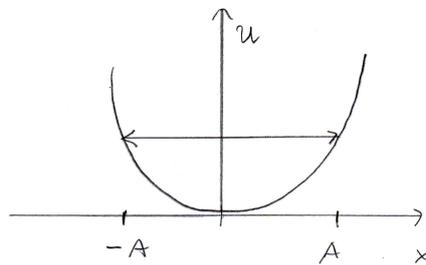
## 2 Klassische Mechanik

Den Wert der Energie  $E$  erhalten wir aus den Anfangsbedingungen, und die Skizze zeigt schon die Bewegung des Teilchens: bei hohen Energien gibt es in diesem Fall nur eine Lösung, und unterhalb einer Schwelle gibt es zwei Lösungen. Das Teilchen schwingt immer zwischen zwei Werten hin und her und wandelt ständig kinetische in potentielle Energie um.

Wie findet man die Bahn  $x(t)$  aus der Geschwindigkeit  $v(x)$ ? Dazu trennen wir die Variablen  $x$  und  $t$  und integrieren:

$$v = \frac{dx}{dt} \Rightarrow dt = \frac{dx}{v(x)} \Rightarrow t(x) - t_0 = \pm \int_{x_0}^x \frac{dx'}{\sqrt{\frac{2}{m}[E - U(x')]}}$$

Die Umkehrfunktion von  $t(x)$  gibt uns die Bahn  $x(t)$ .



Wenn das Teilchen im symmetrischen Potenzial  $U(x) = U(-x)$  mit der Amplitude  $A$  schwingt, so kann man die Schwingungsdauer  $T$  leicht berechnen. Bei der maximalen Auslenkung  $A$  verschwindet die kinetische Energie und wir erhalten  $E = U(A)$ . Die Schwingungsdauer ist viermal die Zeit, die das Teilchen benötigt um von  $x = 0$  zu  $x = A$  zu kommen. Daraus folgt

$$T = 4 \int_0^A \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m}[U(A) - U(x)]}} \quad (2.32)$$

### 2.5.3 $F(v)$

Wenn die Kraft nur von der Geschwindigkeit abhängt, so kann man die Newton-Gleichung  $m \frac{dv}{dt} = F(v)$  wieder durch Trennung der Variablen lösen,

$$m \frac{dv}{F(v)} = dt \Rightarrow t(v) - t_0 = m \int_{v_0}^v \frac{dv'}{F(v')}$$

Wenn wir die Funktion  $t(v)$  umkehren können, so erhalten wir  $v(t)$  und durch Integration  $x(t)$ .

## Reibung

Reibungskräfte entstehen durch die Wechselwirkung eines Körpers mit seiner Umgebung, durch zahlreiche Stöße mit den Molekülen eines Gases, einer Flüssigkeit oder auf der Oberfläche eines Festkörpers. Dieses Problem lässt sich nur näherungsweise lösen. Die vielen Stöße werden durch stochastische Differenzialgleichungen beschrieben, und im einfachsten Fall wird die Reibungskraft einfach durch eine geschwindigkeitsabhängige Kraft modelliert, die der Bewegung entgegenwirkt. Zwei Näherungen sind bekannt,

- Stokessche Reibung  $F(v) = -rmv$
- Newtonsche Reibung  $F(v) = -\gamma m|v|v$

In den Übungen werden Sie zeigen, dass im ersten Fall der Körper endlich weit fliegt, bevor er zur Ruhe kommt, während im zweiten Fall der Körper unendlich weit fliegt. Das zeigt schon, dass diese Näherungen nicht im ganzen Geschwindigkeitsbereich gelten können.

Für das gesamte System, Körper plus Moleküle der Umgebung, gilt der Energiesatz. Für den Körper allein mit der Reibungskraft  $F(v)$  dagegen nicht, denn die kinetische Energie nimmt ab und Bewegungsenergie wird in Wärme umgewandelt.

Die newtonsche Reibung beschreibt den Luftwiderstand, dessen Stärke durch den  $c_W$ -Wert bestimmt wird,  $F(v) = -\frac{1}{2}c_W\rho Av^2$ , dabei ist  $\rho$  die Dichte der Luft und  $A$  die Frontfläche des Körpers. Ein Mensch und ein Lkw haben einen  $c_W$  Wert von etwa 0.8, für ein Fahrrad, einen VW-Käfer und eine Kugel gilt  $c_W \simeq 0.5$ , moderne PKWs schaffen  $c_W \simeq 0.2-0.3$  und ein stromlinienförmiger Tropfen ist mit  $c_W \simeq 0.02$  am windschnittigsten. Immerhin konnten Studenten der ETH Zürich schon ein Fahrzeug mit  $c_W = 0.075$  bauen.

### 2.5.4 Lineare Kräfte

Den *harmonischen Oszillator* mit Reibung sollte jeder kennen, denn er findet Anwendungen in vielen Bereichen der Physik.

$$m\ddot{x} = -m\omega_0^2x - 2\gamma m\dot{x}$$

Der erste Ausdruck ist eine lineare Rückstellkraft  $F(x) = -Dx$ , die wir mit einer Frequenz  $\omega_0$  in eine etwas bequemere Form gebracht haben. Diese Kraft gehört zum quadratischen Potenzial  $U(x) = \frac{m\omega_0^2}{2}x^2$ . Bei der Reibungskraft verwenden wir die Stokessche Reibung, damit die Gleichung linear und damit leicht lösbar wird. Die Newton-Gleichung

## 2 Klassische Mechanik

wird somit zu einer linearen Differentialgleichungen zweiter Ordnung,

$$\ddot{x} + 2\gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = 0 \quad (2.33)$$

Lineare Differentialgleichungen lassen sich relativ leicht lösen. Dazu machen wir den Exponentialansatz

$$x(t) = e^{\lambda t}, \quad \dot{x} = \lambda x, \quad \ddot{x} = \lambda^2 x$$

Mit diesem Trick erhalten wir aus einer linearen Differentialgleichung eine algebraische Gleichung, in diesem Fall

$$\lambda^2 + 2\gamma\lambda + \omega_0^2 = 0 \quad (2.34)$$

Diese Gleichung hat die beiden Lösungen

$$\lambda_{1/2} = -\gamma \pm \sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2}$$

Die Menge sämtlicher Lösungen bildet einen zweidimensionalen Vektorraum, dessen Elemente sich als Linearkombination der eben gefundenen Lösungen schreiben lassen. Die allgemeine Lösung lautet somit

$$x(t) = Ae^{\lambda_1 t} + Be^{\lambda_2 t} \quad (2.35)$$

Die Mathematik liefert uns somit im allgemeinen Fall komplexwertige Lösungen,  $x, \lambda_1, \lambda_2, A, B$  sind komplexe Zahlen. Da die Differentialgleichung aber reell ist, ist die komplex konjugierte Lösung  $x^*(t)$  ebenfalls eine Lösung, somit ist der Realteil  $Re(x) = (x + x^*)/2$  die physikalische Lösung der Newton-Gleichung. Die komplexen Zahlen A und B erhalten wir aus den Anfangsbedingungen

$$x(0) = A + B, \quad \dot{x}(0) = \lambda_1 A + \lambda_2 B$$

Welche Eigenschaften haben diese Lösungen? Ohne Reibung,  $\gamma = 0$ , benötigen wir nicht unbedingt die komplexe Schreibweise, denn wir kennen die Lösung der Gleichung  $\ddot{x} = -\omega_0^2 x$ :

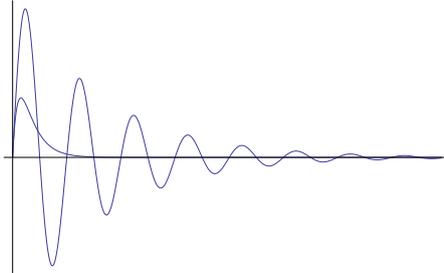
$$x(t) = A \cos(\omega_0 t + \varphi) \quad (2.36)$$

Das Teilchen schwingt mit der (Kreis)-Frequenz  $\omega_0$  zwischen den beiden Auslenkungen  $\pm A$  hin und her, die Schwingungsdauer ist  $T = \frac{2\pi}{\omega_0}$ . Die Energie  $E$  des Oszillators bleibt konstant, ihr Wert ist gegeben durch die potentielle Energie bei maximaler Auslenkung,  $E = \frac{m\omega_0^2}{2} A^2$ .

Mit Reibung dagegen müssen wir zur Lösung 2.35 zwei Fälle unterscheiden:

## 2 Klassische Mechanik

- Schwache Reibung  $\gamma < \omega$ : In diesem Fall ist die Größe  $\sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2}$  imaginär und wir erhalten gedämpfte Oszillationen.
- Starke Reibung  $\gamma > \omega$ : In diesem Fall ist die Größe  $\sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2}$  reell und wir erhalten nur noch Dämpfung ohne Oszillationen.



### 2.5.5 Erzwungene Schwingungen

Ohne Reibung schwingt der harmonische Oszillator mit der Frequenz  $\omega_0$ . Was passiert, wenn wir den Oszillator mit einer anderen Frequenz  $\omega$  antreiben? Dann lautet die Bewegungsgleichung

$$m\ddot{x} = - \underbrace{m\omega_0^2 x}_{\text{Feder}} - \underbrace{2\gamma m \dot{x}}_{\text{Reibung}} + \underbrace{m f \cos(\omega t)}_{\text{Antrieb}}$$

Am einfachsten lösen wir diese Gleichung, indem wir einen Imaginärteil hinzufügen,

$$\boxed{\ddot{x} + 2\gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = f e^{i\omega t}} \quad (2.37)$$

Der Realteil der Lösung ist dann die physikalische Bahn. Diese Differenzialgleichung ist linear und inhomogen. Die Mathematik sagt uns: Die allgemeine Lösung erhalten wir aus sämtlichen Lösungen der homogenen ( $f = 0$ ) plus einer speziellen Lösung der inhomogenen Gleichung:

$$\boxed{x(t) = x_h(t) + x_s(t)} \quad (2.38)$$

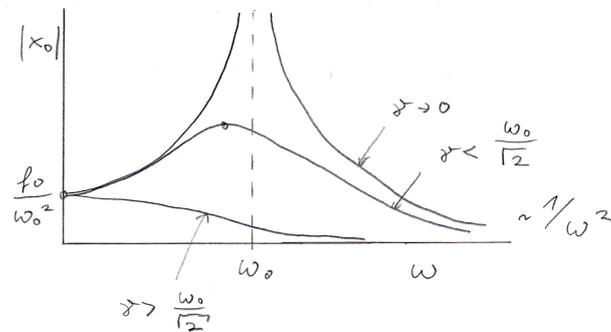
Die Lösung  $x_h(t)$  der homogenen Gleichung haben wir aber gerade kennen gelernt: Sie relaxiert exponentiell schnell zur Ruhelage und beschreibt das Einschwing-Verhalten des Oszillators. Nach dem Einschwingen schwingt das Teilchen mit der Antriebsfrequenz.<sup>1</sup> Wir machen somit den Ansatz

$$x_s(t) = x_0 e^{i\omega t} = |x_0| e^{i\varphi} e^{i\omega t}$$

<sup>1</sup>Erst durch nichtlineare Kräfte können andere Frequenzen hinzukommen.

## 2 Klassische Mechanik

$|x_0|$  ist die Amplitude der Schwingung und  $\varphi$  ist die Phasenverschiebung relativ zum Antrieb. Mit diesem Ansatz wird aus der Differenzialgleichung wieder eine algebraische Gleichung für die Unbekannte  $x_0$ . Deren Lösung überlassen wir den Übungen, wir skizzieren nur die Amplitude als Funktion der Antriebsfrequenz.



Wir erhalten einen Wettbewerb zwischen drei charakteristischen Zeiten:

- Antriebsperiode  $T = \frac{2\pi}{\omega}$
- Eigenperiode  $T_0 = \frac{2\pi}{\omega_0}$
- Relaxationszeit  $\tau = \frac{1}{\gamma}$

Ohne Reibung divergiert die Amplitude, wenn die Antriebsfrequenz  $\omega$  mit der Eigenfrequenz  $\omega_0$  übereinstimmt, wir beobachten eine Resonanzkatastrophe. Mit schwacher Reibung dagegen gibt es ein Maximum bei einer Frequenz, die kleiner ist als die Eigenfrequenz. Bei starker Reibung gibt es gar kein Maximum, sondern die Amplitude fällt mit der Antriebsfrequenz ab. Bei ganz kleinen Antriebsfrequenzen folgt das Teilchen dem Antrieb ohne Verzögerung und ohne Eigendynamik, deshalb können wir in Gleichung 2.37 die Ableitungen  $\ddot{x} = \dot{x} = 0$  setzen und erhalten  $|x_0| = f/\omega_0^2$ . Bei ganz hohen Frequenzen fällt die Amplitude wie  $1/\omega^2$  ab.

Die algebraische Gleichung liefert ebenfalls die Phasenverschiebung  $\varphi$  zwischen Antrieb und Antwort. Bei kleinen Frequenzen folgt der Oszillator dem Antrieb mit geringer zeitlicher Verzögerung, bei hohen Frequenzen dagegen laufen Antrieb und Oszillator gegenphasig. Bei der Eigenfrequenz erhalten wir  $\varphi = \pi/2$ , d.h., bei maximaler Auslenkung gibt es keinen Antrieb. Im letzten Fall wird übrigens am meisten Energie dissipiert, also durch die Reibung in Wärme umgewandelt.

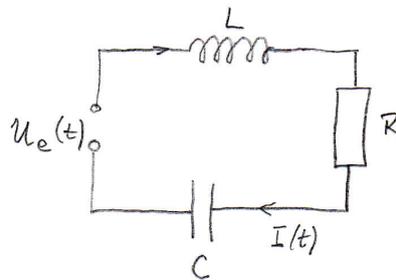
### Elektrischer Schwingungskreis

Die Gleichung des harmonischen Oszillators finden wir übrigens in der Elektrotechnik wieder. Wenn in einem Serienkreis mit einem Widerstand  $R$ , einem Kondensator  $C$  und einer Spule  $L$  ein Strom  $I = \dot{Q}$  fließt, so addieren sich die jeweiligen Spannungen zu einer äußeren Spannung  $U_e$  auf:

$$U_e(t) = R\dot{Q} + \frac{Q}{C} + L\ddot{Q}$$

Wir erhalten somit eine zu 2.37 identische Gleichung mit der Eigenfrequenz

$$\omega_0 = \frac{1}{\sqrt{LC}}$$



### 2.5.6 Nichtlineare Dynamik

Der getriebene harmonische Oszillator mit linearer Reibung führt zu einer *linearen* Differenzialgleichung, die wir mit einem Exponentialansatz lösen können. Aber unsere Welt ist nicht linear, und die Physik ebenfalls nicht, deshalb sollten wir wissen, was mit unseren Gleichungen passiert, wenn wir nichtlineare Terme hinzufügen.

Beispielsweise können wir in Gleichung 2.37 zu der linearen Rückstellkraft eine nichtlineare Korrektur addieren:

$$\ddot{x} + 2\gamma\dot{x} + \beta x + \alpha x^3 = f \cos(\omega t)$$

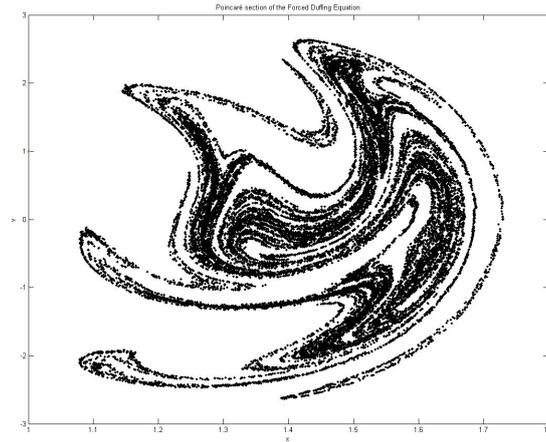
Dieses System finden Sie in der Literatur unter dem Namen **Duffing-Oszillator**<sup>2</sup>. Für  $\alpha > 0, \beta < 0$  bewegt sich das Teilchen in einem Doppelmuldenpotenzial mit einem äußeren Antrieb und (immer noch) linearer Reibung.

<sup>2</sup>[www.scholarpedia.org/article/Duffing\\_oscillator](http://www.scholarpedia.org/article/Duffing_oscillator)

## 2 Klassische Mechanik

Diese kleine Korrektur der linearen Gleichung sieht zunächst harmlos aus, aber sie hat eine drastische Wirkung. Für große Parameterbereiche ist die Lösung chaotisch, d.h. unregelmäßig, unberechenbar und extrem empfindlich gegenüber Anfangsbedingungen.

Wenn wir beispielsweise die Geschwindigkeit  $\dot{x}(t)$  und den Ort  $x(t)$  stroboskopisch mit der Antriebsfrequenz zu den Zeiten  $t_n = n \frac{2\pi}{\omega}$  messen, so erhalten wir im linearen Fall einen einzigen Punkt, denn die Bewegung ist periodisch mit der Antriebsfrequenz. Im chaotischen Fall dagegen erhalten wir folgendes Bild in der  $x, \dot{x}$ -Ebene <sup>3</sup>



Anstelle eines einzigen Punktes messen wir ein so genanntes **Fraktal**, eine Menge, die weniger als eine Fläche aber mehr als eine Kurve ist und durch eine räumliche Dimension  $1 < D < 2$  beschrieben wird.

### 2.6 Lagrange-Gleichungen

Im vorigen Kapitel haben wir schon zahlreiche physikalische Aussagen aus den Newton-Gleichungen hergeleitet. Nun wollen wir eine neue Formulierung der klassischen Mechanik herleiten, die Lagrange-Gleichungen. Warum können wir nicht einfach mit den Newton-Gleichungen weitermachen?

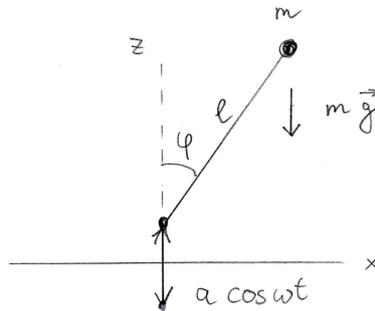
Dazu betrachten wir das folgende Beispiel, das Stehpendel. Eine Punktmasse, die an einer starren Stange befestigt ist, wird zusätzlich zur Schwerkraft durch einen äußeren Antrieb beschleunigt, der den Fußpunkt der Stange mit einer Frequenz  $\omega$  und einer Amplitude  $a$  bewegt. Wie wollen wir die zeitliche Änderung des Winkels aus den Newton-Gleichungen

---

<sup>3</sup>Quelle: Wikipedia

## 2 Klassische Mechanik

herleiten? Wie sieht die Kraft aus, die der äußere Antrieb auf die Punktmasse ausübt? Wir sehen schon, dass dieses Problem mit den Newton-Gleichungen nicht einfach definiert werden kann.



Joseph Louis Lagrange hat im Jahr 1788, also mehr als 100 Jahre nach Newton, eine Formulierung der klassischen Mechanik entwickelt, die es erlaubt, Bewegungsgleichungen für jede Art von Koordinaten zu formulieren. Probleme mit Nebenbedingungen, wie in unserem Beispiel, lassen sich damit lösen. Besonders Ingenieure verwenden die Lagrange-Gleichungen, um mechanische Systeme zu beschreiben.

Beim vorigen Beispiel des Stehpendels genügt die Koordinate  $\varphi(t)$ , um das Pendel zu beschreiben. Die Lagrange-Gleichung für die zeitliche Entwicklung des Winkels lautet

$$\ddot{\varphi} = -\frac{a\omega^2}{l} \cos \omega t \sin \varphi + \frac{g}{l} \sin \varphi$$

Bei kleinen Antriebsfrequenzen fällt das Pendel nach unten und schwingt um seine Ruhelage. Bei hohen Frequenzen dagegen bleibt das Pendel oben stehen und schwingt um seine instabile Lage. Diesen Fall erhält man näherungsweise für  $\omega^2 > \frac{2gl}{a^2}$ . Im Applet auf der Webseite wird diese Gleichung numerisch gelöst, und Sie können selbst den Parameterbereich testen, in dem das Pendel oben stehen bleibt.

Übrigens bleiben auch Doppel oder Dreifach-Pendel nach oben gerichtet stehen, wenn sie nur schnell genug angetrieben werden.

### 2.6.1 Newton kompliziert

Um die Lagrange-Gleichungen zu verstehen, schreiben wir die Newton-Gleichung in einer Dimension in der folgenden Form. Wir definieren eine Lagrange-Funktion als die Differenz von kinetischer und potentieller Energie,

$$L(x, v, t) = \frac{m}{2} v^2 - U(x, t)$$

## 2 Klassische Mechanik

Die Lagrange-Funktion hat demnach die Dimension einer Energie, sie ist aber nicht die Summe, sondern die Differenz der beiden Beiträge. Wir betrachten nun die beiden partiellen Ableitungen der Lagrange-Funktion,

$$\frac{\partial L}{\partial v} = mv, \quad \frac{\partial L}{\partial x} = -\frac{\partial U}{\partial x} = F(x, t)$$

Nun setzen wir eine Bahn  $x(t), v = \dot{x}(t)$  ein und erhalten die Newton-Gleichung durch

$$\boxed{\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial L}{\partial x}} \quad (2.39)$$

Das ist die Lagrange-Gleichung für diesen einfachen Fall. Man kann nun folgende wichtige Tatsache herleiten: die Lagrange-Gleichung gilt nicht nur für kartesische Koordinaten, sondern für jede Art von Koordinaten, die die Dynamik des Systems beschreiben, auch unter Zwangsbedingungen. Den Beweis finden Sie in den Lehrbüchern der klassischen Mechanik.

### 2.6.2 Lagrange-Formalismus

Wie sieht die Methode aus, mit der wir die Lagrange-Gleichungen herleiten und lösen können? Hier ist das Rezept:

- Wähle  $f$  verallgemeinerte Koordinaten  $q_1, \dots, q_f$ , die die Bewegung des Systems beschreiben.
- Bestimme die dazugehörigen kartesischen Koordinaten  $x_k(q_1, \dots, q_f, t)$ , wobei der Index  $k$  für  $N$  Teilchen  $3N$  Werte annimmt.
- Berechne die kinetische Energie als Funktion der verallgemeinerten Koordinaten

$$T = \sum_{k=1}^{3N} \frac{m_k}{2} \dot{x}_k^2 = T(\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f; q_1, \dots, q_f; t)$$

- Definiere die Lagrange-Funktion

$$L(\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f; q_1, \dots, q_f; t) = T - U$$

- Formuliere die Bewegungsgleichungen für jede verallgemeinerte Koordinate  $q_j(t)$ :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} = \frac{\partial L}{\partial q_j}, \quad j = 1, \dots, f \quad (2.40)$$

- Suche Erhaltungsgrößen.
- Löse damit die Lagrange-Gleichung.

Das sind die **Lagrange-Gleichungen zweiter Art**. In den Lehrbüchern finden Sie ebenfalls die Lagrange-Gleichung erster Art, mit denen man nicht nur die Bewegung des Systems sondern auch die Zwangskräfte selbst berechnen kann. Oft jedoch lassen sich die Zwangskräfte auch aus der Bewegung des Systems herleiten, so dass wir die Lagrange-Gleichung erster Art hier nicht behandeln.

### Stehpendel

Am Beispiel des Stehpendels wollen wir die Lagrange-Gleichung herleiten. Die Punktmasse  $m$  wird zunächst durch die kartesischen Koordinaten  $x, y, z$  beschrieben. Seine kinetische Energie ist  $T = \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2)$ . Wenn das Pendel allerdings in der  $x, z$ -Ebene beschränkt und dabei angetrieben wird, so gelten die beiden Zwangsbedingungen

$$(z(t) - a \cos \omega t)^2 + x^2(t) = l^2; \quad y(t) = 0$$

## 2 Klassische Mechanik

Die zwei Zwangsbedingungen reduzieren die drei Freiheitsgrade zu einer einzigen,  $f = 3 - 2$ , verallgemeinerten Koordinate  $q(t)$ , beispielsweise  $q = \varphi$ .

Nun müssen wir die kinetische und die potentielle Energie durch die verallgemeinerte Koordinate  $\varphi$  ausdrücken. Dazu schreiben wir die kartesischen Koordinaten und deren Ableitungen als Funktion von  $\varphi, \dot{\varphi}$  und  $t$ :

$$\begin{aligned}x(\varphi, t) &= l \sin \varphi; & \dot{x} &= l \dot{\varphi} \cos \varphi \\z(\varphi, t) &= a \cos \omega t + l \cos \varphi; & \dot{z} &= -a\omega \sin \omega t - l \dot{\varphi} \sin \varphi\end{aligned}$$

Damit erhalten wir die kinetische und potentielle Energie zu

$$\begin{aligned}T &= \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{z}^2) = \frac{m}{2}(l^2 \dot{\varphi}^2 + 2a\omega l \sin \omega t \dot{\varphi} \sin \varphi + a^2 \omega^2 \sin^2 \omega t) \\U &= mgz = mga \cos \omega t + mgl \cos \varphi\end{aligned}$$

Die kinetische Energie enthält also nicht nur die zeitliche Ableitung der verallgemeinerten Koordinaten, sondern auch eine Funktion der Koordinaten selbst. Außerdem hat sie eine explizite Abhängigkeit von der Zeit.

Die Lagrange-Funktion und deren partielle Ableitungen sind damit

$$\begin{aligned}L(\varphi, \dot{\varphi}, t) &= T - U \\ \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} &= \frac{m}{2}(2l^2 \dot{\varphi} + 2a\omega l \sin \omega t \sin \varphi) \\ \frac{\partial L}{\partial \varphi} &= \frac{m}{2}(2a\omega l \sin \omega t \dot{\varphi} \cos \varphi) + mgl \sin \varphi\end{aligned}$$

Nun setzen wir die Bahn  $\varphi(t)$  ein und leiten die erste partielle Ableitung nach der Zeit ab,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = ml^2 \ddot{\varphi} + mal\omega^2 \cos \omega t \sin \varphi + mal\omega \sin \omega t \dot{\varphi} \cos \varphi$$

Somit erhalten wir die Lagrange-Gleichung

$$ml^2 \ddot{\varphi} = ml(g - a\omega^2 \cos \omega t) \sin \varphi$$

Ohne Antrieb ist das die Gleichung eines Pendels, das aus der oberen instabilen Lage weggetrieben wird. Mit Antrieb erhalten wir eine zeitabhängige Korrektur der Schwerkraft, die bei hohen Frequenzen die obere Lage stabilisiert. Diese Differenzialgleichung wird beim Applet der Webseite numerisch integriert.

### 2.6.3 Erhaltungsgrößen

Bei den Newton-Gleichungen haben wir schon verschiedene Erhaltungsgrößen kennen gelernt, die Energie, den Impuls und den Drehimpuls. Mit den Lagrange-Gleichungen können wir nun die Erhaltungsgrößen allgemeiner herleiten und gewissen Symmetrien zuordnen.

Die Lagrange-Funktion soll nicht von der Koordinaten  $q_k$  abhängen,  $\frac{\partial L}{\partial q_k} = 0$ ;  $q_k$  wird **zyklische Koordinate** genannt. Aus der Lagrange-Gleichung 2.40 folgt

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = 0 \Rightarrow \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \text{ ist konstant}$$

Analog zur verallgemeinerten Koordinate  $q_k$  definiert man somit einen verallgemeinerten Impuls  $p_k$ , den zu  $q_k$  **kanonisch konjugierten Impuls**

$$\boxed{p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}} \quad (2.41)$$

Für eine zyklische Koordinate  $q_k$  ist somit deren Impuls  $p_k$  erhalten.

Die Zeit  $t$  ist zwar keine Koordinate, dennoch folgt aus  $\frac{\partial L}{\partial t} = 0$  eine Erhaltungsgröße

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0 \Rightarrow \boxed{H = \sum_k p_k \dot{q}_k - L \text{ ist zeitlich konstant}} \quad (2.42)$$

Wenn wir diese Größe  $H$  als Funktion von  $q_k, p_k$  schreiben, so wird sie **Hamilton-Funktion** genannt. Zum Beweis bilden wir die zeitliche Ableitung der Größe  $H$ :

$$\frac{dH}{dt} = \sum_k (\dot{p}_k \dot{q}_k + p_k \ddot{q}_k - \underbrace{\frac{\partial L}{\partial q_k}}_{\dot{p}_k} \dot{q}_k - \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}}_{p_k} \ddot{q}_k) = 0$$

Was ist die physikalische Bedeutung der Hamilton-Funktion  $H$ ? Wenn die Zwangsbedingungen und das Potenzial nicht von der Zeit abhängen, so ist  $H$  die Energie  $E$ ,

$$\boxed{H = E = T + U} \quad (2.43)$$

Das gilt in den meisten Beispielen. Wir werden jedoch auch einen Fall kennen lernen, bei dem zwar nicht die Energie, aber die Größe  $H$  zeitlich konstant bleibt.

Mithilfe der zyklischen Koordinaten kann man zeigen, dass die schon bekannten Erhaltungsgrößen aus Symmetrien folgen. Zum Beweis verweisen wir wieder auf die Lehrbücher der klassischen Mechanik.

- $L$  ist zeitinvariant  $\Rightarrow$  Die Hamiltonfunktion  $H$  (i.A. die Energie  $E$ ) ist erhalten.
- $L$  ist translationsinvariant  $\Rightarrow$  Der Gesamtimpuls ist erhalten.
- $L$  ist rotationsinvariant  $\Rightarrow$  Der Gesamtdrehimpuls ist erhalten.

Falls ein physikalisches System noch weitere Symmetrien hat, können wir daraus zusätzliche Erhaltungsgrößen berechnen.

### 2.6.4 Hamiltonsches Prinzip

Kann die klassische Mechanik aus einem allgemeinen Prinzip hergeleitet werden? Tatsächlich lässt sich die klassische Mechanik als Minimierungsproblem formulieren. Die physikalischen Bahnen sind das Minimum einer reellwertigen Funktion von Funktionen, von einem Funktional.

Betrachte die Menge aller möglichen Funktionen  $\underline{q}(t) = (q_1(t), \dots, q_f(t))$  im  $f$ -dimensionalen Raum, die zwei feste Punkte  $\underline{q}(t_a)$  und  $\underline{q}(t_e)$  verbinden. Ordne jeder Funktion die **Wirkung**  $S$  zu:

$$S[\underline{q}] = \int_{t_a}^{t_e} dt L(\underline{q}, \dot{\underline{q}}, t) \quad (2.44)$$

Die Wirkung ist eine Abbildung, die jeder Funktion eine reelle Zahl zuordnet; sie hat die Dimension Energie  $\cdot$  Zeit. Eine solche Funktion wird **Funktional** genannt, und deren mathematische Struktur findet man in den Lehrbüchern der **Funktionalanalysis**.

William Hamilton zeigte im Jahr 1834, dass diese Wirkung  $S[\underline{q}]$  für physikalische Bahnen minimal ist. Wie in der Schulmathematik bestimmt man das Minimum, indem man die Ableitung gleich Null setzt. Allerdings muss man nun Ableitungen im Funktionenraum bilden. Also nicht nur Ableitungen nach einer Variablen oder partielle Ableitungen nach mehreren Variablen, sondern Ableitungen nach unendlich vielen Variablen, nach Funktionen. Solche Ableitungen werden **Variation** genannt. Formal lautet das Hamiltonsche Prinzip

$$\delta S[\underline{q}] = 0 \quad (2.45)$$

Die Physik entsteht demnach aus einem Minimierungsproblem. Ein solches Problem haben Sie vielleicht schon in der geometrischen Optik kennen gelernt, das Fermatsche Prinzip, und es gilt ebenso in der Elektrodynamik und Allgemeinen Relativitätstheorie.

## 2 Klassische Mechanik

Wir wollen den Beweis des Hamiltonschen Prinzips für eine Dimension  $f = 1$  durchführen. Dazu betrachten wir kleine Abweichungen  $\varepsilon f(t)$  von der physikalischen Bahn  $q(t)$ . Die Größe  $\varepsilon$  ist ein Parameter, den wir – wie bei Ableitungen üblich – nach Null gehen lassen. Da die beiden Endpunkte bei der Variation festgehalten werden, gilt  $f(t_a) = f(t_e) = 0$ .

Nun entwickeln wir die Wirkung nach der kleinen Größe  $\varepsilon$

$$S[q(t) + \varepsilon f(t)] = \int_{t_a}^{t_e} dt L(q + \varepsilon f, \dot{q} + \varepsilon \dot{f}, t) \simeq S[q] + \varepsilon \int_{t_a}^{t_e} dt \left( \frac{\partial L}{\partial q} f + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{f} \right)$$

Die Ableitung  $\dot{f}$  beseitigen wir durch partielle Integration und erhalten

$$\frac{dS}{d\varepsilon} = \int_{t_a}^{t_e} \left( \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right)_{q(t)} f(t) dt$$

Da dieses Integral für sämtliche Funktionen verschwinden muss, muss der Integrand ebenso verschwinden,

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0$$

Das Minimum der Wirkung liefert uns die Lagrange-Gleichungen.

### Variationsrechnung

Die Variationsrechnung wurde nicht erst von Hamilton, sondern schon 1696 von Johann Bernoulli angewendet. Er berechnete den Weg, auf dem sich ein Körper unter der Schwerkraft am schnellsten zwischen zwei Punkten bewegt. Dieses Problem führt wieder auf die Euler-Lagrange-Gleichungen 2.40, und die Lösung ist eine Kurve, eine so genannte *Brachistochrone*, die sogar durchhängen kann. Man erhält sie beispielsweise, indem man die Bahn eines Fahrradventils während der Fahrt aufzeichnet.

## 2.7 Anwendungen der Lagrange-Gleichungen

In diesem Kapitel wollen wir einige Anwendungen der Lagrange-Gleichungen diskutieren. Selbst wenn es keine Zwangsbedingungen gibt, können diese Gleichungen sehr nützlich sein. Je nach Symmetrie des Problems werden wir Kugel-, Polar- oder Zylinder-Koordinaten verwenden. Und um umständliche Herleitungen zu ersparen, sollten Sie sich das Quadrat der Geschwindigkeit und damit die kinetische Energie für die verschiedenen Koordinaten merken:

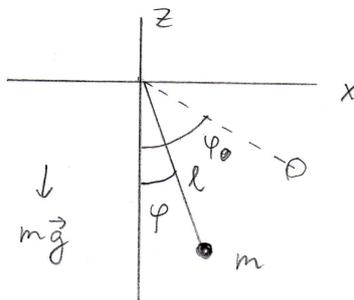


Abbildung 2.5: Welche Bahn ist die schnellste? Landesmuseum für Technik und Arbeit, Mannheim

$$\begin{aligned}
 \text{Kartesisch} \quad T &= \frac{m}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) \\
 \text{Kugel} \quad T &= \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\dot{\varphi}^2) \\
 \text{Polar} \quad T &= \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) \\
 \text{Zylinder} \quad T &= \frac{m}{2}(\dot{\rho}^2 + \rho^2\dot{\varphi}^2 + \dot{z}^2)
 \end{aligned}
 \tag{2.46}$$

### 2.7.1 Pendel

Wie lautet der Lagrange Formalismus für ein Pendel? Wir hatten die Gleichungen schon für das Stehpendel diskutiert, in diesem Fall gab es keine Erhaltungsgröße, denn der äußere Antrieb hat Energie in das System hineingesteckt und wieder herausgeholt. Beim Pendel ohne Antrieb dagegen gilt der Energiesatz.



## 2 Klassische Mechanik

Zunächst wählen wir den Winkel  $\varphi$  als verallgemeinerte Koordinate. Mithilfe der Gleichung 2.46 erhalten wir mit  $r = l, \dot{r} = 0$  die kinetische Energie und damit die Lagrange-Funktion

$$L(\varphi, \dot{\varphi}) = T - U = \frac{m}{2} l^2 \dot{\varphi}^2 + mgl \cos \varphi$$

Beachte, dass der Winkel  $\varphi$  die Abweichung von der Ruhelage bezeichnet, wogegen beim Stehpendel der Winkel die Abweichung von der instabilen Lage gemessen hat. Deshalb ist die potentielle Energie  $U$  bei  $\varphi = 0$  am tiefsten.

Da die Lagrange Funktion nicht von der Zeit abhängt, ist die Energie eine Erhaltungsgröße

$$E = \frac{m}{2} l^2 \dot{\varphi}^2 - mgl \cos \varphi = \text{konstant}$$

Wenn wir das Pendel zur Zeit  $t = 0$  um den Winkel  $\varphi_0$  auslenken, so können wir diese Konstante berechnen,

$$E = -mgl \cos \varphi_0$$

Die Lagrange-Gleichung gibt uns

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} &= \frac{d}{dt} ml^2 \dot{\varphi} = ml^2 \ddot{\varphi}, & \frac{\partial L}{\partial \varphi} &= -mgl \sin \varphi \Rightarrow \\ \boxed{\ddot{\varphi} = -\omega_0^2 \sin \varphi} & \text{ mit } \omega_0 = \sqrt{\frac{g}{l}} \end{aligned} \quad (2.47)$$

### Kleine Winkel

Bei kleinen Auslenkungen können wir diese Gleichung leicht lösen,

$$\ddot{\varphi} = -\omega_0^2 \varphi \Rightarrow \varphi(t) = A \sin(\omega_0 t + \delta)$$

Wir erhalten den harmonischen Oszillator mit einer Amplitude  $A$  und der Frequenz  $\omega_0$ . Die Schwingungsdauer  $T = 2\pi\sqrt{l/g}$  ist unabhängig von der Amplitude. Die Energie ist eine quadratische Form des Winkels und der Winkelgeschwindigkeit,

$$E + mgl = \frac{m}{2} l^2 \left( \dot{\varphi}^2 + \frac{g}{l} \varphi^2 \right) = \frac{m}{2} gl A^2$$

Die Bahnen sind demnach Ellipsen in der  $\varphi, \dot{\varphi}$  Ebene.

### Beliebige Auslenkungen

Wenn wir den Sinus in der Gleichung 2.47 nicht linearisieren können, so wissen wir nicht, wie wir diese Gleichung lösen sollen. Hier hilft uns der Energiesatz weiter. Denn der Energiesatz ist eine Differentialgleichung für  $\varphi(t)$ . Mit der Anfangsbedingung  $\varphi(0) = \varphi_0, \dot{\varphi}(0) = 0$  erhalten wir

$$\dot{\varphi}^2 = \left(\frac{d\varphi}{dt}\right)^2 = \frac{2g}{l}(\cos \varphi - \cos \varphi_0) \Rightarrow \frac{d\varphi}{dt} = \pm \sqrt{\frac{2g}{l}(\cos \varphi - \cos \varphi_0)}$$

Diese Differentialgleichung lösen wir durch Trennung der Variablen und durch Integrieren:

$$t(\varphi) - t(\varphi_0) = \pm \int_{\varphi_0}^{\varphi} \frac{d\varphi'}{\sqrt{\frac{2g}{l}(\cos \varphi' - \cos \varphi_0)}}$$

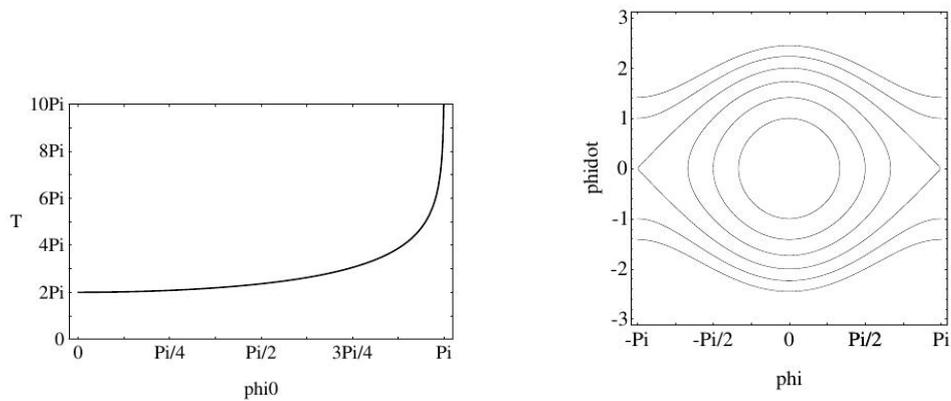


Abbildung 2.6: Links: Umlaufzeit als Funktion des Auslenkungswinkels. Rechts: Bahnen in der  $\varphi, \dot{\varphi}$ -Ebene für verschiedene Energiewerte.

Die Schwingungsdauer des Pendels ist viermal die Zeit, die das Pendel benötigt, um von der Ruhelage bis zur maximalen Auslenkung zu kommen

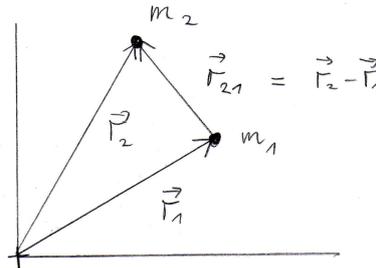
$$T = 4 \sqrt{\frac{l}{2g}} \int_0^{\varphi_0} \frac{d\varphi'}{\sqrt{\cos \varphi - \cos \varphi_0}}$$

Die Lösung  $t(\varphi)$  des Pendelproblems haben wir als ein Integral erhalten. Was haben wir davon? Interessanterweise ist dieses Integral und auch seine Umkehrfunktion  $\varphi(t)$  wohlbekannt,  $t(\varphi)$  finden Sie unter dem Namen **elliptisches Integral** und  $\varphi(t)$  unter Jacobi-Funktion. Sämtliche Eigenschaften dieser Funktionen findet man in Büchern, und auch in Computer-Programmen wie *Mathematica* sind diese Funktionen enthalten.

Die Schwingungsdauer  $T(\varphi_0)$  hängt nun von der Auslenkung  $\varphi_0$  ab, und sie divergiert für  $\varphi_0 \rightarrow \pi$ . Die Bahnen sind in der  $\varphi, \dot{\varphi}$ -Ebene keine Ellipsen mehr, sondern sie werden gestreckt, bis für  $\dot{\varphi}(\pi) \neq 0$  Überschläge einsetzen.<sup>4</sup>

### 2.7.2 Zentralkraft

Die Bewegung zweier miteinander wechselwirkender Punkt-Massen kann analytisch gelöst werden. Die Wechselwirkung werde durch ein Potenzial  $U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$  beschrieben.



Wir haben gesehen, dass aus Symmetrien Erhaltungsgrößen entstehen. Dieses Potenzial ist invariant gegen Translationen, deshalb ist der Impuls des Schwerpunktes erhalten. Außerdem ist es rotationsinvariant, damit ist der Gesamtdrehimpuls erhalten. Schließlich hängt das Potenzial nicht von der Zeit ab, also ist die Gesamtenergie zeitlich konstant.

Mit diesen Erhaltungsgrößen gelingt es uns, die sechs-dimensionalen Newton-Gleichungen auf eine einzige Differenzialgleichung zu reduzieren. Dazu transformieren wir die beiden Bahnen  $\vec{r}_1(t), \vec{r}_2(t)$  in Schwerpunkts- und Relativ-Koordinaten

$$\vec{R} = \frac{1}{M}(m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2), \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$

Damit wird die Lagrange-Funktion zu

$$L(\vec{R}, \dot{\vec{R}}, \vec{r}, \dot{\vec{r}}) = \frac{m_1}{2}\dot{\vec{r}}_1^2 + \frac{m_2}{2}\dot{\vec{r}}_2^2 - U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) = \frac{M}{2}\dot{\vec{R}}^2 + \frac{\mu}{2}\dot{\vec{r}}^2 - U(|\vec{r}|)$$

Dabei ist  $\mu = \frac{m_1 m_2}{M}$  die reduzierte Masse. Die Bewegungen des Schwerpunktes und der Relativkoordinate sind offensichtlich entkoppelt, analog zu einem freien Teilchen und einem Teilchen in einem Zentralpotenzial. Der Schwerpunkt bewegt sich also gleichförmig

<sup>4</sup>Kinzel, Reents, Physik per Computer, Kapitel 1.2

## 2 Klassische Mechanik

mit konstanter Geschwindigkeit, während der Abstand zwischen den Teilchen durch folgende Lagrange-Funktion beschrieben wird

$$L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) = \frac{\mu}{2} \dot{\vec{r}}^2 - U(|\vec{r}|)$$

Bei der Bewegung in einem Zentralpotenzial ist der Drehimpuls  $\vec{l} = \mu(\vec{r} \times \dot{\vec{r}})$  konstant, deswegen bewegt sich der Relativabstand  $\vec{r}$  senkrecht zum Drehimpuls in einer Ebene. In dieser Ebene wählen wir Polarkoordinaten und erhalten mithilfe der Gleichung 2.46 die Lagrange-Funktion

$$\boxed{L(r, \dot{r}, \dot{\varphi}) = \frac{\mu}{2} (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) - U(r)} \quad (2.48)$$

Da die Lagrange-Funktion nicht vom Winkel  $\varphi$  abhängt, ist der dazugehörige Impuls zeitlich konstant,

$$p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = \mu r^2 \dot{\varphi} = l = \text{konstant}$$

Dieser Impuls ist gerade der Betrag des Drehimpulses. Außerdem ist die Energie der Relativbewegung zeitlich konstant. Ersetzen wir nun in der kinetischen Energie die Winkelgeschwindigkeit  $\dot{\varphi}$  durch  $\frac{l}{\mu r^2}$ , so erhalten wir die Energie

$$\boxed{E = \frac{\mu}{2} \dot{r}^2 + \underbrace{\frac{l^2}{2\mu r^2}}_{U_{eff}(r)} + U(r)} \quad (2.49)$$

Mit der Drehimpulserhaltung konnten wir somit einen Teil der kinetischen Energie in ein **Zentrifugal-Potenzial** umwandeln. Wir erhalten somit eine eindimensionale Bewegung in einem **effektiven Potenzial**  $U_{eff}(r)$ , das sich aus dem Wechselwirkungspotenzial  $U(r)$  und dem Zentrifugal-Potenzial  $\frac{l^2}{2\mu r^2}$  zusammensetzt. Das Zentrifugal-Potenzial ist immer abstoßend, während die gegenseitigen Kräfte sowohl anziehend als auch abstoßend sein können.

Die sechs Bewegungsgleichungen für die beiden Bahnen  $\vec{r}_1(t), \vec{r}_2(t)$  sind somit zu einer Gleichung für den Abstand  $r(t)$  reduziert worden.

Wie lösen wir nun die verbleibende Gleichung? Das haben wir schon bei der eindimensionalen Bewegung gesehen. Wir lösen die Gleichung nach  $\frac{dr}{dt}$  auf, separieren die Variablen  $r, t$  und integrieren. Das Integral liefert die Funktion  $t(r)$ , und deren Umkehrung die Bewegung  $r(t)$ .

Die Bahnen erhalten wir aus der Kettenregel

$$\frac{d\varphi}{dr} = \frac{d\varphi}{dt} \frac{dt}{dr} = \frac{l}{\mu r^2} \frac{1}{\sqrt{\frac{2}{\mu}(E - U_{eff}(r))}}$$

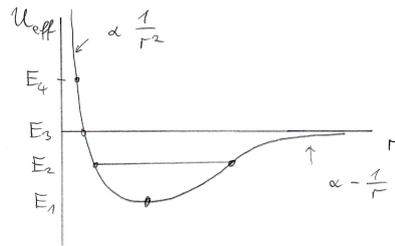
Dabei haben wir  $\frac{d\varphi}{dt}$  aus dem Drehimpuls und  $\frac{dt}{dr}$  aus der Energie erhalten. Das Integral dieser Gleichung gibt die Funktion  $\varphi(r)$ , und deren Umkehrung die Bahn  $r(\varphi)$ .

### Kepler-Problem

Betrachten wir nun ein Gravitations- bzw. ein attraktives Coulomb-Potenzial der Form

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r}$$

Bei kleinen Abständen gewinnt der abstoßende Zentrifugalanteil, während bei großen Abständen der attraktive Wechselwirkungsanteil gewinnt. Das zeigt die folgende Skizze



Daraus können Sie sofort auf die möglichen Bahnformen schließen. Es gibt keine Lösungen für  $E < E_1$ . Am Minimum des effektiven Potenzials,  $E = E_1$ , bewegt sich das Teilchen auf einer Kreisbahn um das Zentrum, der Abstand bleibt konstant. Oberhalb dieses Minimums bewegt sich der Abstand zwischen zwei Umkehrwerten, die Bahn rotiert um das Zentrum und der Abstand bewegt sich zwischen einem maximalen und einem minimalen Wert. Für  $E \geq 0$  kommt das Teilchen aus dem Unendlichen heran geflogen, nähert sich bis zu dem markierten Abstand und fliegt danach wieder unendlich weit fort. Das alles können wir schon aus der Skizze ablesen. Um die spezielle Bahn zu finden, müssen wir allerdings die obige Differentialgleichung integrieren. Für das Gravitations- und Coulomb-Potenzial ist das analytisch möglich, wir geben hier nur die Lösung bekannt,

$$\boxed{r(\varphi) = \frac{p}{1 + \varepsilon \cos \varphi}, \quad p = \frac{l^2}{\mu\alpha}, \quad \varepsilon = \sqrt{1 + \frac{2El^2}{\mu\alpha^2}} \quad (2.50)}$$

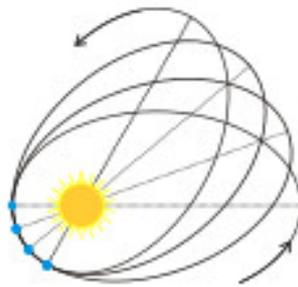
Für  $\varepsilon = 0$  ist diese Bahn offensichtlich ein Kreis. Für  $0 < \varepsilon < 1$  ist diese Kurve eine geschlossene Bahn, eine Ellipse. Der Brennpunkt der Ellipse liegt bei  $r = 0$ .  $\varepsilon = 1$  liefert eine Parabel und  $\varepsilon > 1$  eine Hyperbel.

Der Fall  $E < 0$  beschreibt die Bewegung der Planeten um die Sonne und die Bewegung des Mondes um die Erde. Wir erhalten mit dieser Lösung sämtliche Keplerschen Gesetze. Allerdings gibt es Störungen, einmal durch die anderen Planeten bzw. durch die Sonne oder auch durch die Relativitätstheorie.

Der Fall  $E > 0$  beschreibt ein Streuproblem. Beispielsweise wird eine positive Ladung, ein Helium-Kern oder Alpha-Teilchen, am positiven Atomkern gestreut. Mithilfe der

Hyperbelbahn kann man ausrechnen, wie viele Teilchen unter welchem Winkel gestreut werden. Das hat Ernest Rutherford im Jahr 1913 gemessen, und aus der Abweichung von dieser berechneten Winkelverteilung, dem differentiellen Wirkungsquerschnitt, hat er auf die Größe des Atomkerns geschlossen. Damit hat er gesehen, dass ein Atom im wesentlichen leer ist, sein Durchmesser ist sehr viel größer als derjenige des Kerns.

Die obige Skizze gilt auch für kleine Abweichungen des  $1/r$ -Potenzials. Allerdings sind die Bahnen nur für das  $1/r$ -Potenzial geschlossen, anderweitig gibt es eine **Periheldrehung**. Die Bahn rotiert immer noch um das Zentrum und der Abstand bewegt sich zwischen einem Maximal- und Minimal-Wert, aber die Kurve insgesamt rotiert rosettenartig langsam um das Zentrum. Bei der Erde beträgt diese Periheldrehung etwa zwei Grad pro Jahrhundert.



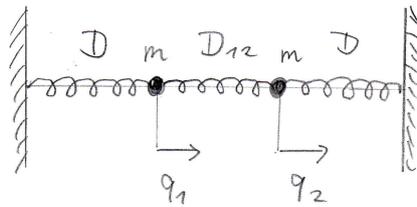
### 2.7.3 Schwingende Systeme

Miteinander wechselwirkende Teilchen können in eine Ruhelage einrasten. Bei etwas höherer Energie werden diese Teilchen um ihre Ruhelage herum schwingen. Durch Federn gekoppelte Massen sind ein Beispiel für gekoppelte Oszillatoren, aber auch die Schwingungen von Atomen in Molekülen und Festkörpern können zunächst klassisch behandelt werden, und erst danach wird die Schwingung quantisiert, so wie wir es im zweiten Teil der Vorlesung kennen lernen werden. In jedem Fall können wir das Vielteilchensystem in eine Menge unabhängiger Oszillatoren mit unterschiedlichen Eigenfrequenzen transformieren. Das wollen wir im Folgenden herleiten.

#### Zwei gekoppelte Oszillatoren

Im einfachsten Fall betrachten wir zwei gleiche Massen  $m$ , die durch lineare Federn untereinander und mit einer Wand gekoppelt sind, und die nur in einer Dimension schwingen können. Die entsprechenden Federkonstanten seien  $D, D_{12}$ .

## 2 Klassische Mechanik



Im Lagrange-Formalismus wählen wir die beiden Auslenkungen  $q_1, q_2$  aus der Ruhelage als verallgemeinerte Koordinaten. Eine lineare Feder hat ein quadratisches Potenzial, und damit erhalten wir sofort die kinetische und potentielle Energie zu

$$T = \frac{m}{2} \dot{q}_1^2 + \frac{m}{2} \dot{q}_2^2, \quad U = \frac{D}{2} q_1^2 + \frac{D}{2} q_2^2 + \frac{D_{12}}{2} (q_2 - q_1)^2$$

Wir erhalten somit quadratische Formen in der kinetischen und potentiellen Energie. Mit der Lagrange-Funktion  $L = T - U$  können wir nun die Lagrange-Gleichung  $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = \frac{\partial L}{\partial q_k}$  lösen und erhalten

$$\begin{aligned} m\ddot{q}_1 &= -Dq_1 - D_{12}(q_1 - q_2) \\ m\ddot{q}_2 &= -Dq_2 - D_{12}(q_2 - q_1) \end{aligned}$$

Die mathematische Struktur dieser Gleichung sieht man deutlicher in der Matrix-Schreibweise:

$$\boxed{m\ddot{\underline{q}} = -\hat{V}\underline{q}} \quad \text{mit} \quad \underline{q}(t) = \begin{pmatrix} q_1(t) \\ q_2(t) \end{pmatrix}; \quad \hat{V} = \begin{pmatrix} D + D_{12} & -D_{12} \\ -D_{12} & D + D_{12} \end{pmatrix} \quad (2.51)$$

Lineare Gleichungen werden mit einem Exponentialansatz gelöst, das haben wir schon vorher gesehen. Hier ist allerdings der Koeffizient ein ganzer Vektor,  $\underline{q}(t) = e^{i\omega t} \underline{w}$ . Setzen wir diesen Ansatz in die obige Differentialgleichung ein, so erhalten wir die algebraische Gleichungen

$$\boxed{m\omega^2 \underline{w} = \hat{V} \cdot \underline{w}} \quad (2.52)$$

D.h.,  $\lambda = m\omega^2$  ist ein Eigenwert und  $\underline{w}$  ein Eigenvektor von der Matrix  $\hat{V}$ . Wie berechnet man Eigenwerte einer Matrix? Die Lineare Algebra sagt uns dazu, dass wir die Nullstellen des charakteristischen Polynoms finden müssen,

$$\det(\hat{V} - \lambda \hat{I}) = 0$$

## 2 Klassische Mechanik

Dabei ist  $\hat{I}$  die Einheitsmatrix. In unserem Fall erhalten wir die quadratische Gleichung  $(D + D_{12} - \lambda)^2 - D_{12}^2 = 0$ , deren Lösungen die beiden Eigenfrequenzen ergeben:

$$\boxed{\omega_1 = \sqrt{\frac{D}{m}}, \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{D + 2D_{12}}{m}}} \quad (2.53)$$

Wie finden wir nun die dazu gehörigen Eigenvektoren? Dazu setzen wir die beiden Eigenfrequenzen in die Gleichung 2.52 ein und berechnen die beiden Koeffizienten des Eigenvektors, die bis auf einen Faktor bestimmt sind. Wir erhalten

$$\underline{w}_1 = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \underline{w}_2 = c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Daraus ergeben sich die beiden Eigenschwingungen des Systems:

$$\begin{aligned} \underline{w}_1 &\Rightarrow q_1(t) = q_2(t) \Rightarrow \rightarrow \rightarrow \\ \underline{w}_2 &\Rightarrow q_1(t) = -q_2(t) \Rightarrow \leftarrow \rightarrow \end{aligned}$$

In der ersten Mode schwingen die beiden Teilchen in dieselbe Richtung, ihr Abstand zueinander ändert sich nicht, und deshalb tritt die Federkonstante  $D_{12}$  nicht in der Frequenz  $\omega_1$  auf, nur die Kräfte zur Wand wirken. In der zweiten Mode schwingen die beiden Massen gegeneinander, und die Frequenz wird durch die beiden Federkonstanten bestimmt. Da mehr Federn gestreckt oder gestaucht werden, ist die Frequenz höher.

Die allgemeine Lösung des linearen Differenzialgleichungensystems erhalten wir durch eine Linearkombination der Eigenmoden. Wenn wir die komplexe Größe durch ihren Realteil ersetzen,  $Ae^{i\omega t} \rightarrow C \cos(\omega t + \delta)$  so folgt

$$\boxed{\underline{q}(t) = c_1 \cos\left(\sqrt{\frac{D}{m}}t + \delta_1\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + c_2 \cos\left(\sqrt{\frac{D + 2D_{12}}{m}}t + \delta_2\right) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}} \quad (2.54)$$

Die vier reellwertigen Koeffizienten  $c_1, c_2, \delta_1, \delta_2$  erhalten wir aus vier Anfangsbedingungen, beispielsweise  $q_1(0), \dot{q}_1(0), q_2(0), \dot{q}_2(0)$ .

Die Entwicklung nach Eigenmoden ist typisch für lineare Differenzialgleichungen. Sie wird uns in der Quantenmechanik und Elektrodynamik immer wieder begegnen. Sie ist die Eigenschaft eines linearen Vektorraumes, jeder Vektor kann als Linearkombination von Basisvektoren geschrieben werden.

### Schwebung

Was geschieht, wenn sich die beiden Eigenfrequenzen nur ein wenig voneinander unterscheiden? Dann entsteht ein Phänomen, das **Schwebung** genannt wird. Die Oszillation

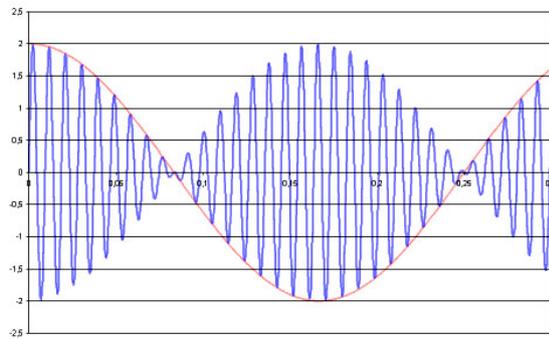
## 2 Klassische Mechanik

eines Teilchens nimmt periodisch ab und zu, und die Energie wechselt ständig von dem einen Teilchen zum anderen Teilchen und zurück. Das wollen wir berechnen.

Am Anfang soll nur ein Teilchen ausgelenkt werden,  $q_1(0) = A, q_2(0) = \dot{q}_1(0) = \dot{q}_2(0) = 0$ , und damit erhalten wir aus Gleichung 2.54

$$\begin{aligned} q_1(t) &= \frac{A}{2}(\cos \omega_1 t + \cos \omega_2 t) = A \cos\left(\frac{\omega_1 - \omega_2}{2}t\right) \cos\left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{2}t\right) \\ q_2(t) &= \frac{A}{2}(\cos \omega_1 t - \cos \omega_2 t) = A \sin\left(\frac{\omega_2 - \omega_1}{2}t\right) \sin\left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{2}t\right) \end{aligned} \quad (2.55)$$

Für eine schwache Kopplung  $D_{12} \ll D$  unterscheiden sich die beiden Frequenzen nur ein wenig,  $\omega_2 - \omega_1 \ll \omega_1 + \omega_2$ , und wir erhalten ein Auf- und Abschwellen der Schwingung. Die Schwingung hat die Frequenz  $(\omega_1 + \omega_2)/2$  und das Auf- und Abschwellen geschieht mit der Periode  $T = \pi/(\omega_2 - \omega_1)$ .



Quelle: Wikipedia

Beachte, dass im Allgemeinen  $\underline{q}(t)$  nicht periodisch sondern quasi-periodisch ist. Nur für rationale Verhältnisse  $\frac{\omega_2}{\omega_1}$  erhalten wir eine periodische Bewegung, eventuell mit ganz langer Periodendauer. Hier macht sich der Unterschied zwischen rationalen und irrationalen Zahlen in der Schwingung der Oszillatoren bemerkbar.

### Schwingungen um die Ruhelage

Die Bewegungsgleichungen für zwei schwingende Massen, die durch lineare Federn gekoppelt sind, hätten wir sicher auch mit dem Newton-Formalismus lösen können. Bei komplizierteren Systemen, Molekülen und Festkörpern, kann das nicht so einfach formuliert und gelöst werden. Wir verwenden wieder die Lagrange-Gleichungen, um den allgemeinen Fall zu diskutieren.

Wir betrachten ein System mit  $f$  Freiheitsgraden, das durch ein Potenzial  $U(\underline{x})$  beschrieben wird. Dieses Potenzial soll ein Minimum haben, die Teilchen haben in einer Ruhelage  $\underline{x}_0$  die geringste Energie.

## 2 Klassische Mechanik

Nun betrachten wir kleine Auslenkungen  $\underline{q} = \underline{x} - \underline{x}_0$  um diese Ruhelage und entwickeln das Potenzial

$$U(\underline{x}) = U(\underline{x}_0) + \sum_{j=1}^f \frac{\partial U}{\partial q_j} q_j + \frac{1}{2} \sum_{j,k} \frac{\partial^2 U}{\partial q_j \partial q_k} q_j q_k + \dots$$

Der lineare Term verschwindet,  $\frac{\partial U}{\partial q_j} = 0$ , da in der Ruhelage keine Kräfte wirken. Damit erhalten wir die Lagrange-Funktion

$$L = \frac{1}{2} \sum_j m_j \dot{q}_j^2 - \frac{1}{2} \sum_{j,k} V_{jk} q_j q_k - U(\underline{x}_0) \quad \text{mit} \quad V_{jk} = \frac{\partial^2 U}{\partial q_j \partial q_k} = V_{kj} \quad (2.56)$$

Die partiellen Ableitungen geben die Lagrange-Gleichungen. Der Einfachheit halber setzen wir alle Massen gleich und erhalten

$$m \ddot{\underline{q}} = -\hat{V} \underline{q} \quad (2.57)$$

Das ist ein System von  $f$  gekoppelten linearen Differentialgleichungen, und  $\hat{V}$  ist eine  $f \times f$ -Matrix. Der Exponentialansatz macht aus der Differentialgleichung die algebraische Gleichung

$$m \omega^2 \underline{w} = \hat{V} \cdot \underline{w} \quad (2.58)$$

Die Eigenwerte  $m\omega^2$  dieser linearen Gleichung bestimmen wir, indem wir die Nullstellen des charakteristischen Polynoms berechnen,  $\det(\hat{V} - m\omega^2 \hat{I}) = 0$ . Somit erhalten wir  $f$  Eigenfrequenzen  $\omega_1, \dots, \omega_f$  und  $f$  Eigenvektoren  $\underline{w}_1, \dots, \underline{w}_f$ . Die Lösungsmenge der Differentialgleichungen ist ein Vektorraum, die Eigenmoden  $e^{i\omega_k t} \underline{w}_k$  sind eine Basis dieses Raums und die allgemeine Lösung ist die Überlagerung dieser Eigenmoden.

Wir können demnach die Lagrange-Gleichungen mithilfe linearer Algebra lösen. Die Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren der Matrix überlassen wir jedoch dem Computer.

## 2 Klassische Mechanik

### Schwingungsmoden des Hauses vom Nikolaus

Mathematica-Befehle

#### Fünf Punkte plus Auslenkungen $q[k]$ :

$$r1 = \{-1/2 + q[1], q[2]\};$$

$$r2 = \{1/2 + q[3], q[4]\};$$

$$r3 = \{-1/2 + q[5], 1 + q[6]\};$$

$$r4 = \{1/2 + q[7], 1 + q[8]\};$$

$$r5 = \{q[9], 1 + \text{Sqrt}[3/4] + q[10]\};$$

#### Abstand zweier Vektoren:

$$d[x\_y\_] = \text{Sqrt}[(x-y).(x-y)];$$

$$z = \text{Sqrt}[2];$$

#### Potential aus Federkräften:

$$u = ((d[r1,r2]-1)^2 + (d[r1,r3]-1)^2 + (d[r1,r4]-z)^2 + (d[r2,r3]-z)^2 + (d[r2,r4]-1)^2 + (d[r3,r4]-1)^2 + (d[r3,r5]-1)^2 + (d[r4,r5]-1)^2) / 2;$$

#### Ruhelage:

$$\text{ruhe} = \{q[1] \rightarrow 0, q[2] \rightarrow 0, q[3] \rightarrow 0, q[4] \rightarrow 0, q[5] \rightarrow 0, q[6] \rightarrow 0, q[7] \rightarrow 0, q[8] \rightarrow 0, q[9] \rightarrow 0, q[10] \rightarrow 0\};$$

#### Potentialmatrix, gemischte zweite Ableitungen des Potentials:

$$v = \text{N}[\text{Table}[D[u, q[j], q[k]] /. \text{ruhe}, \{j, 10\}, \{k, 10\}]];$$

#### Eigenfrequenzen:

$$\text{Sqrt}[\text{Eigenvalues}[v]]$$

$$\{2.0311, 1.80525, 1.63945, 1.41421, 1.41421, 1.05628, 0.901216, 0, 0, 0\}$$

#### Eigenvektoren und Graphik:



Als pädagogisches Beispiel betrachten wir die Schwingungen eines zweidimensionalen

„Hauses“ oder „Moleküls“ mit 5 identischen Massen, die durch 8 identische Federn gekoppelt sind. Jede Masse kann sich in zwei Richtungen bewegen, es gibt also  $f = 10$  Freiheitsgrade. Wir erwarten also 10 Eigenschwingungen mit zehn Frequenzen  $\omega_j$ . Allerdings erhalten wir nur sieben Eigenmoden. Woran liegt das?

Die Translation des Schwerpunktes hat zwei Freiheitsgrade, und die Rotation des Hauses hat einen Freiheitsgrad. Diese drei Freiheitsgrade kosten keine Energie und ergeben damit  $\omega_j = 0$ . Deshalb bleiben nur  $f - 3 = 7$  Eigenschwingungen übrig.

Die vorige Seite zeigt ein Mathematica-Programm, das die wesentlichen Schritte der Rechnung enthält. Das Programm liefert drei Frequenzen  $\omega_k = 0$ , wie vorhergesagt.

### 2.8 Hamiltonsche Dynamik

William Rowan Hamilton 1835

Neben den Newtonschen Gesetzen von 1673 und den Lagrange-Gleichungen von 1766 gibt es noch eine weitere äquivalente Formulierung der klassischen Mechanik: Die Hamiltonsche Dynamik von 1835. Diese Dynamik wird durch Differentialgleichungen erster Art für die (verallgemeinerten) Orte und Impulse der Teilchen beschrieben, wobei Ort und Impuls unabhängige Koordinaten sind. Dadurch erhält man einen Fluss im  $(p, q)$ -Phasenraum. Die Hamilton-Mechanik hat folgende Vorteile: Sie begründet die Statistische Mechanik und die Quantenmechanik, Erhaltungsgrößen lassen sich durch Transformationen herleiten und geometrisch interpretieren, sie wird für numerische Simulationen verwendet, chaotische Bewegung lässt sich leichter finden und darstellen und für die Himmelsmechanik wird sie für störungstheoretische Rechnungen verwendet.

In den vorigen Vorlesungen haben wir die Lagrange-Gleichungen eingeführt und angewendet. Die Lagrangefunktion  $L(q, \dot{q}, t) = T - U$  wurde als kinetische minus potentielle Energie definiert. Die partielle Ableitung  $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = p(q, \dot{q}, t)$  definiert einen verallgemeinerten Impuls  $p$ . In  $L$  werden nun die physikalischen Bahnen  $q(t)$  eingesetzt, die den Lagrange-Gleichungen genügen:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial L}{\partial q}$$

Der Impuls  $p$  ist als partielle Ableitung von  $L$  eine Funktion der Bahn und deren Ableitung. Das ändert sich in der Hamiltonschen Dynamik. Dort wird der Impuls zur unabhängigen Variablen. Es gibt eine Funktion  $\mathcal{H}(q, p, t)$ , die **Hamilton-Funktion**, die die Bewegung von Ort  $q(t)$  und Impuls  $p(t)$  beschreibt:

$$\boxed{\frac{dq}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}; \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}} \quad (2.59)$$

Das sind die sogenannten kanonischen Bewegungsgleichungen. Aus  $f$  Differentialgleichungen zweiter Ordnung (Newton, Lagrange) werden  $2f$  Differentialgleichungen erster Ordnung, die einen Fluss im  $(q, p)$ -Raum (Phasenraum) beschreiben. Wenn man nicht nur eine einzelne Bahn laufen lässt, sondern ein ganzes Volumen im Phasenraum, so kann man zeigen, dass die Ausdehnung des Volumens erhalten bleibt (Satz von Liouville). Das gilt auch für chaotische Systeme, bei denen das Volumen mit der Zeit zerfasert und schließlich im gesamten Phasenraum dicht liegt. Diese Eigenschaft ist ein wichtiges Argument für die Gültigkeit der Statistischen Mechanik.

Wie wird die partielle Ableitung von  $L$  zur unabhängigen Variablen  $p$ ? Das liefert ein mathematischer Trick, die sogenannte **Legendre-Transformation**, die hauptsächlich in der Thermodynamik angewendet wird. Hier lösen wir dazu die Funktion  $p(q, \dot{q}, t)$  nach  $\dot{q}(q, p, t)$  auf und definieren die Hamilton-Funktion

$$\boxed{\mathcal{H}(q, p, t) = \dot{q}p - L(q, \dot{q})}$$

Das Differential von  $\mathcal{H}$  lautet damit

$$\begin{aligned} d\mathcal{H} &= \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}\right)_p dq + \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}\right)_q dp \\ &= (d\dot{q})p + \dot{q} dp - \left(\frac{\partial L}{\partial q}\right)_{\dot{q}} dq - \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)_q d\dot{q} \\ &= \dot{q} dp - \dot{p} dq \end{aligned}$$

Daraus folgen sofort die Hamiltonschen Gleichungen 2.59. Beachte, dass  $d\mathcal{H}$  nur von  $dq$  und  $dp$  abhängt, jedoch nicht von  $d\dot{q}$ , deshalb sind  $q$  und  $p$  unabhängige Variable.

Wenn das System zeitlich invariant ist, wenn also die Lagrange-Funktion nicht von der Zeit  $t$  abhängt,  $\frac{\partial L}{\partial t} = 0$ , dann ist die Hamilton-Funktion  $\mathcal{H}$  eine Erhaltungsgröße. Wenn die Zwangsbedingungen nicht von der Zeit abhängen, dann ist die Hamilton-Funktion sogar die Energie des Systems,

$$\boxed{\mathcal{H} = E = T + U = \frac{p^2}{2m} + U(q, t)}$$

## 2 Klassische Mechanik

wobei die letzte Gleichung für kartesische Koordinaten gilt.

Als Beispiel für die Hamilton-Funktion beschreiben wir ein freies Teilchen mit Polarkoordinaten  $r, \varphi$ .

$$L(r, \dot{r}, \varphi, \dot{\varphi}) = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) \Rightarrow p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}; \quad p_\varphi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\dot{\varphi}$$
$$\Rightarrow \mathcal{H}(r, \varphi, p_r, p_\varphi) = \dot{r}p_r + \dot{\varphi}p_\varphi - L = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2}$$

Bei einem Teilchen im Zentralpotential  $U(r)$  ist der Drehimpuls  $p_\varphi$  konstant, denn  $\mathcal{H}$  hängt nicht von  $\varphi$  ab. Dann ist die Energie

$$E = \mathcal{H} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2} + U(r) = \frac{p_r^2}{2m} + U_{\text{eff}}(r)$$

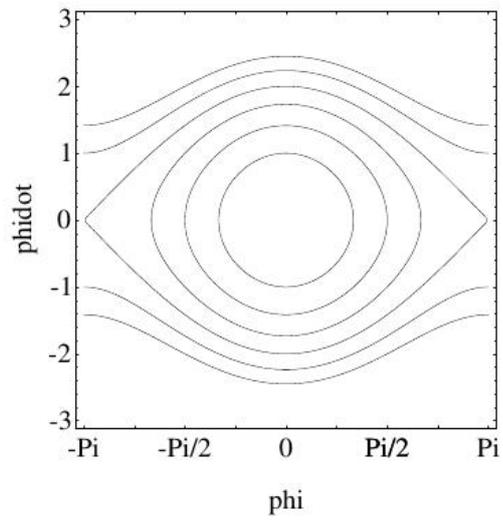
Das effektive Potential, das die Bewegung des Abstandes  $r(t)$  beschreibt, setzt sich zusammen aus dem Zentrifugal- und dem realen Potential.

Beim Pendel der Länge  $r = l$  gilt:

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

Die folgende Abbildung zeigt die Bahnen (= Konturen konstanter Energie  $E$ ) im Phasenraum  $(\varphi, p_\varphi)$  (in skalierten Form). Bei kleinen Ausschlägen ist die Bahn eine Ellipse, die sich mit zunehmender Energie verformt. Bei hohen Energien gibt es Überschläge. Eine sogenannte Separatrix trennt die beiden Gebiete; auf ihr benötigt das Pendel eine unendlich lange Zeit, um zur Spitze  $\varphi = \pi, \dot{\varphi} = 0$  zu gelangen.

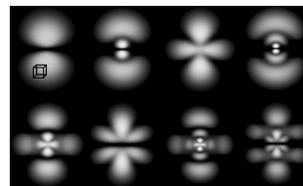
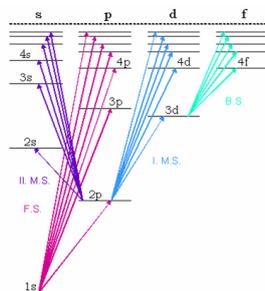
2 *Klassische Mechanik*



# 3 Quantenmechanik

## Schrödinger-Gleichung

Erwin Schrödinger 1926



Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen im Potential  $V$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}, t) \Psi(\vec{x}, t) = \hat{H} \Psi$$

Max Planck suchte nach seinem Abitur im Jahr 1874, im Alter von 16 Jahren, nach einem geeigneten Studienfach. Er liebte die Musik, aber ein Musikstudium schien ihm zu unsicher. So erkundigte er sich bei dem Münchner Physikprofessor Philipp von Jolly nach den Aussichten des Faches Physik. Der jedoch riet ihm vom Physikstudium ab, denn *es sei in dieser Wissenschaft schon fast alles erforscht, und es gelte, nur noch einige unbedeutende Lücken zu schließen.*

Trotzdem begann Max Planck Physik zu studieren; und er hatte recht, denn die großen Rätsel der Physik – die zu der Zeit noch nicht erkannt worden sind – sollten erst im 20. Jahrhundert gelöst werden. Um Experimente zu erklären, musste sich die Physik allerdings von der Anschaulichkeit der Natur trennen; Raum und Zeit verloren in der Relativitätstheorie ihre gemeinverständliche Bedeutung, und die deterministische Bahn eines Teilchens musste wellenartigen Wahrscheinlichkeiten weichen. Das große Zeitalter der Physik sollte erst noch kommen.

Warum benötigen wir eine Theorie, die über die Newton- und Maxwell-Gleichungen hin-

### 3 Quantenmechanik

ausgeht? Es gab zu der Zeit einige experimentelle Befunde, die man mit der klassischen Physik nicht erklären konnte:

- Hohlraumstrahlung: Die Statistische Mechanik der elektromagnetischen Wellen liefert eine unendlich große Gesamtenergie und eine falsche Spektralverteilung.
- Photoeffekt und Doppelspalt: Das Licht hat sowohl Wellen- als auch Teilcheneigenschaften, ebenso Elektronen, Neutronen und Atome.
- Atomphysik: Es gibt keine Spektrallinien in der Newton-Mechanik.
- Stabile Materie: Nach der Elektrodynamik strahlt ein Elektron, das um den Atomkern kreist, ständig Energie ab und fällt schließlich in den Kern. Es gibt keine Atome und keine stabile Materie.

Im 20. Jahrhundert gelang es den Physikern, eine neuartige Theorie zu entwickeln, die **Quantenmechanik**, die diese Rätsel lösen konnte. Die Quantenmechanik wurde und wird ständig weiter entwickelt und erklärt die Eigenschaften von Elementarteilchen, Protonen, Atomkernen, Kernspaltung, Atomen, Molekülen, chemischer Bindung, Festkörpern, Supraleiter, Magnetismus, Transistoren, Spintronik und Quantencomputern. Ohne die Quantenmechanik wären das alles Rätsel geblieben.

Quantenmechanik verlangt eine neuartige Mathematik, die lineare Algebra von unendlich-dimensionalen Vektorräumen, den Hilbert-Räumen. Die mathematischen Grundlagen dazu sind sehr weit entwickelt, die Theorie macht extrem präzise quantitative Aussagen, die mit entsprechenden Experimenten hervorragend übereinstimmen, die naturphilosophischen Interpretationen der Quantenmechanik jedoch sind immer noch ein Gegenstand von wissenschaftlichen Diskussionen. Oder mit den Gedanken ihrer Gründer gesprochen:

- Niels Bohr: Wer über die Quantentheorie nicht entsetzt ist, hat sie nicht verstanden.
- Richard Feynman: Wer die Quantentheorie verstanden hat, hat sie nicht verstanden.
- Albert Einstein: Gott würfelt nicht.

Hier sind einige Namen und Daten zur Geschichte der Quantenmechanik:

### 3 Quantenmechanik

1900	Max Planck	Die Energie des Lichtes im schwarzen Körper ist quantisiert, Strahlungsgesetz
1905	Albert Einstein	Das Licht selbst besteht aus Lichtquanten, die Eigenschaften von Teilchen haben, photoelektrischer Effekt
1913	Niels Bohr	Erklärung der Spektrallinien von Wasserstoff durch ein klassisches Elektron auf quantisierten Bahnen
1924	Louis de Broglie	Materie hat Wellen-Eigenschaften, Wellen haben Materie-Eigenschaften
1925	Albert Einstein	Bose-Einstein Kondensation (Exp: 1995, Wolfgang Ketterle)
1925	Werner Heisenberg	Matrizenmechanik
1925	Erwin Schrödinger	Wellenmechanik, Schrödingergleichung
1925	Wolfgang Pauli	Ununterscheidbarkeit, Pauli-Prinzip
1927	Wolfgang Pauli	Spin, Pauli-Matrizen
1927	Werner Heisenberg	Unschärfe-Relation
1927	Max Born	Wahrscheinlichkeits-Interpretation der Wellenfunktion
1927	Paul Dirac	Relativistische Erweiterung, Dirac-Gleichung, Antiteilchen, Bra-Ket-Notation
1930	John von Neumann	Lineare Operatoren auf Hilbert-Räumen
1945	Richard Feynman	Quantenelektrodynamik, Quantenfeldtheorie, Renormierung
1957	John Bardeen, Leon Cooper, John Schrieffer	BCS Theorie der Supraleitung
1963	Roy Glauber	Quantenoptik, Laser
1964	John Bell	Bellsche Ungleichungen zur Widerlegung versteckter Variablen
1964	Murray Gell-Mann	Quantenfeldtheorie der Elementarteilchen, Quarks, Quantenchromodynamik
1964	Peter Higgs	Higgs-Mechanismus zur Erklärung von Massen in der QFT, (Exp.: LHC CERN 2013)
1965	Walter Kohn	Dichtefunktional-Theorie wechselwirkender Elektronen
1974	Julius Wess	Supersymmetrie
1980	Klaus von Klitzing	Quanten-Hall-Effekt
1984	Charles Bennet	Quanten-Kryptographie (Exp. Anton Zeilinger 1999)
1994	Peter Shor	Faktorisierung mit Quantencomputern (Exp: Rainer Blatt 2006)
2006	Shou-Cheng Zhang	Topologische Isolatoren (Exp. Laurens Molenkamp)
2016	Ungelöste Probleme	Vereinigung der QM mit der Gravitation (ART), Stringtheorie, quantisierter Raum, Kosmologie, QM wechselwirkender Teilchen: Proton, Biomoleküle, Hochtemperatur-Supraleiter,..

## Probleme der klassischen Physik

- Hohlraumstrahlung: Die statistische Mechanik liefert eine unendliche Gesamtenergie und falsche Energiedichten.
- Das Licht hat Wellen- und Teilchen-Eigenschaften, ebenso Elektronen, Neutronen und Atome.
- Atomphysik: Es gibt keine Spektrallinien und das Elektron strahlt ständig Energie ab.
- Es gibt keine stabile Materie.

## Probleme der Quantenmechanik

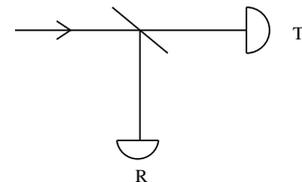


Niels Bohr: Wer über die Quantentheorie nicht entsetzt ist, hat sie nicht verstanden.

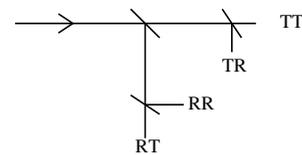
Richard Feynman: Wer die Quantentheorie verstanden hat, hat sie nicht verstanden.

Albert Einstein: Gott würfelt nicht.

## Welcher-Weg-Experiment für Photonen

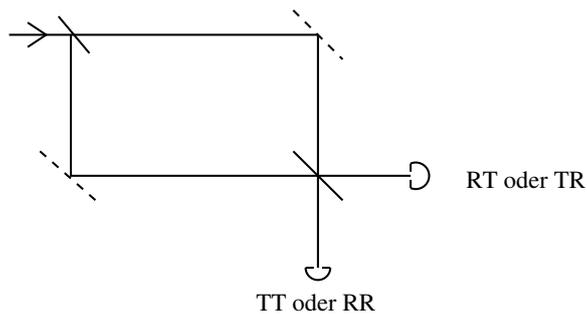


Es gibt Lichtteilchen, denn entweder klickt der Detektor R oder T.  
 Es gibt genau so viele R wie T Ereignisse.  
 Hat jedes Teilchen die Eigenschaft T oder R?



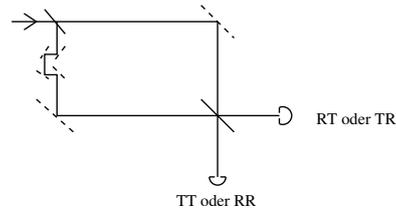
Nein, denn 25% der Ereignisse werden bei jedem Detektor registriert.

## Mit Überlapp der möglichen Wege



Erwarte: 25% RT und 25% TR, also 50% RT/TR.  
 Messung: Alle Teilchen werden bei RT/TR registriert.  
 ⇒ Unser Teilchenbild ist falsch!

## Änderung der Weglänge



Ändere die Länge des unteren Weges.

Messung: Bei bestimmten Längen werden nur TT/RR Teilchen registriert.

⇒ Jedes Teilchen auf dem oberen Weg erhält Informationen über den unteren Weg! **Interferenz von ununterscheidbaren Möglichkeiten**

Beachte: Nur ein einziges Teilchen interferiert mit sich selbst!

Wenn dagegen die beiden Wege unterschieden werden können (Drehung des Spins, Änderung des Energieniveaus), so findet keine Interferenz statt, und das klassische Bild stimmt wieder.

## Quantenmechanik

Unser klassisches Teilchen/Welle Bild ist falsch. Wir brauchen eine neuartige Theorie, die Quantenmechanik. Dort gibt es zwar immer noch Teilchen, jedoch werden sie durch Wellen beschrieben. Die Welle liefert Wahrscheinlichkeiten für Messungen.

### 3.1 Postulate

Bei der klassischen Mechanik sind wir von einer Gleichung ausgegangen, der Newton-Gleichung für jedes Teilchen. Daraus haben wir zahlreiche physikalische Begriffe und Aussagen hergeleitet. Dabei war die Bahn eines Teilchens ein offensichtlicher Begriff, der keine weiteren Interpretationen nötig machte. In der Quantenmechanik gibt es die Schrödinger-Gleichung, und wir wollen daraus wieder möglichst viele physikalische Aussagen herleiten. Allerdings genügt diese Gleichung allein nicht, um physikalische Messungen zu beschreiben, sondern wir benötigen zusätzlich einige Postulate zur Interpretation der Schrödinger-Gleichung.

Wir geben hier schon diese Postulate an, ohne sofort auf die zu Grunde liegende Mathematik einzugehen. Denn Sie sollen schon ein Gefühl dafür entwickeln, was auf Sie zukommt. Wir werden uns aber der Quantenmechanik Schritt für Schritt nähern.

#### Postulate der Quantenmechanik

- Der Zustand eines physikalischen Systems wird durch ein Element  $|\Psi\rangle$  eines Hilbertraumes beschrieben.
- Die zeitliche Entwicklung eines Zustandes wird durch den selbstadjungierten Hamiltonoperator beschrieben,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$$

- Der Hamiltonoperator  $\hat{H}$  wird durch die entsprechende Hamiltonfunktion definiert, indem Orte und Impulse durch die jeweiligen Orts- und Impulsoperatoren ersetzt werden.
- Eine Messung wird durch einen selbstadjungierten Operator  $\hat{A}$  beschrieben. Die Eigenwerte von  $\hat{A}$  sind die möglichen Messergebnisse. Nach der Messung des Eigenwertes  $a$  befindet sich das System im zugehörigen Eigenzustand  $|\Psi\rangle \rightarrow |a\rangle$ .
- Die Wahrscheinlichkeit, im Zustand  $|\Psi\rangle$  den Wert  $a$  zu messen, ist

$$P_a = |\langle \Psi | a \rangle|^2$$

Der Mittelwert vieler Messungen am Zustand  $|\Psi\rangle$  ist

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$$

- Die Wahrscheinlichkeit, im Zustand  $|\Psi\rangle$  die Eigenschaften eines anderen Zustandes  $|\phi\rangle$  zu messen, ist

$$|\langle \phi | \Psi \rangle|^2$$

### 3 Quantenmechanik

- Bei mehreren unabhängigen Freiheitsgraden ist der gesamte Hilbertraum das Produkt der jeweiligen Hilberträume.

Die Eigenschaften eines Zustandes, beispielsweise eines Elektrons im Atom, werden demnach durch ein Element eines hochdimensionalen Vektorraumes beschrieben. Messungen entsprechen linearen Abbildungen in diesem Vektorraum. Im Allgemeinen sind nur statistische Aussagen über die Eigenschaften eines Zustandes möglich, die durch komplexwertige Skalarprodukte berechnet werden.

## 3.2 Schrödinger-Gleichung

Bevor wir jedoch auf die allgemeine abstrakte Formulierung der Quantenmechanik eingehen, formulieren wir die vorigen Postulate zunächst im Ortsraum.

### 3.2.1 Wellenfunktion

Zunächst betrachten wir die Bewegung eines Teilchens der Masse  $m$  in einem Potenzial  $U(\vec{x})$ . In der klassischen Mechanik wurde diese Bewegung durch eine Bahn  $\vec{r}(t)$  beschrieben, die folgender Differenzialgleichung genügt

$$m \frac{d^2}{dt^2} \vec{r} = -\nabla U(\vec{r})$$

Die Quantenmechanik dagegen kennt keine Bahnen mehr, sondern es gibt nur noch eine Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit  $t$  am Ort  $\vec{x}$  zu messen. Sämtliche Eigenschaften eines Teilchens, sämtliche Wahrscheinlichkeiten für Messergebnisse, werden durch eine Wellenfunktion  $\Psi(\vec{x}, t) \in \mathbf{C}$  beschrieben. Diese Funktion genügt der linearen Differenzialgleichung

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{x}, t) + U(\vec{x}, t) \Psi(\vec{x}, t)} \quad (3.1)$$

Das ist die zeitabhängige **Schrödinger-Gleichung**, die Grundgleichung der mikroskopischen Physik. Die Information über die Eigenschaften eines Teilchens entwickelt sich demnach mit einer linearen partiellen Differenzialgleichung. Die Gleichung ist deterministisch, ein Anfangszustand bestimmt eindeutig seine Zukunft. Erst durch den Messprozess entstehen Wahrscheinlichkeitsaussagen, und der Zustand wird geändert.

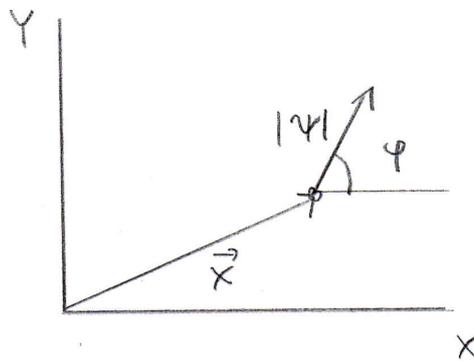
In drei Raumdimensionen gilt  $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ . In einer Raumdimension dagegen wird die zeitliche Änderung der Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  durch folgende Gleichung beschrieben:

$$\boxed{i\hbar \dot{\Psi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi'' + U\Psi} \quad (3.2)$$

### 3 Quantenmechanik

In der klassischen Mechanik haben wir manchmal zu der Bahn einen Imaginärteil hinzugefügt, um bequemer rechnen zu können. Die Wellenfunktion  $\Psi = |\Psi|e^{i\varphi} = \text{Re}\Psi + i \text{Im}\Psi$  hat ebenfalls einen Imaginärteil. Die Schrödinger-Gleichung koppelt allerdings durch den Faktor  $i$  den Real- und Imaginärteil. Wir können diese beiden Anteile nicht trennen, sondern beide beschreiben die Eigenschaften des Teilchens.

Die Wellenfunktion enthält demnach an jedem Ort und zu jeder Zeit einen Zeiger, dessen Richtung die Phase und dessen Länge die Amplitude von  $\Psi(\vec{x}, t)$  beschreibt. Die Orts- und Zeitabhängigkeit dieser Zeiger liefern die Eigenschaften des Teilchens, wie wir noch herleiten werden.



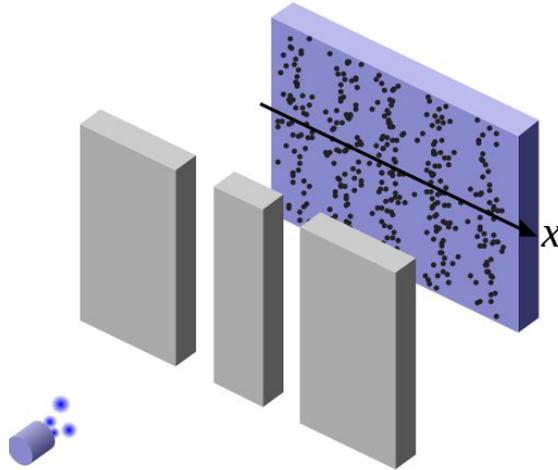
Welche Aussagen können wir nun für eine Ortsmessung treffen? Den Ort des Teilchens messen wir durch einen Detektor, der ein einfallendes Teilchen registriert. Wenn wir den Zustand des Teilchens immer wieder gleich präparieren, und wenn wir sehr viele Detektoren an vielen Orten aufstellen, so erhalten wir im Prinzip die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit  $t$  am Ort  $\vec{x}$  zu messen. Die Postulate der Quantenmechanik sagen uns nun Folgendes:

$|\Psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$  ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen am Ort  $\vec{x}$  zur Zeit  $t$  im Volumen  $d^3x$  zu messen.

Das Betragsquadrat  $|\Psi(\vec{x}, t)|^2$  ist demnach eine **Wahrscheinlichkeitsdichte**, und die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Volumen  $V$  zu messen, ist das Integral über diese Dichte,  $\int_V |\Psi|^2 d^3x$ .

### 3.2.2 Überlagerung

Die Schrödinger-Gleichung ist eine lineare partielle Differentialgleichung für die komplexwertige Wellenfunktion. Linear bedeutet, dass eine Überlagerung von Lösungen ebenfalls eine Lösung ist. Betrachten wir zum Beispiel das berühmte *Doppelspalt-Experiment*



Quelle: Wikipedia

Wenn wir den linken Spalt abdecken, so erhalten wir die Wellenfunktion  $\Psi_1$ . Ohne den rechten Spalt erhalten wir  $\Psi_2$ . Wenn wir nun beide Spalte öffnen, so überlagern sich die beiden Wellenfunktionen und wir erhalten

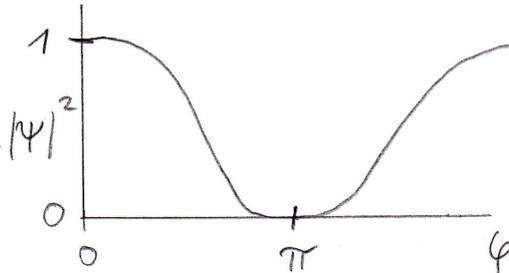
$$\Psi(\vec{x}, t) = c_1\Psi_1(\vec{x}, t) + c_2\Psi_2(\vec{x}, t), \quad c_k \in \mathbf{C}$$

Was bedeutet das für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens am Ort des Bildschirms? Nehmen wir an, dass sich die beiden Lösungen nur durch eine Phase  $\varphi$  unterscheiden und mit gleicher Amplitude überlagern,  $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 + \Psi_2)$  mit  $\Psi_2 = \Psi_1 e^{i\varphi}$ . Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist damit

$$\begin{aligned}
 |\Psi|^2 &= \frac{1}{2}(\Psi_1 + \Psi_2)(\Psi_1^* + \Psi_2^*) = \\
 &\quad \underbrace{\frac{1}{2}(|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2)}_{\text{klassische Addition von Wahrscheinlichkeitsdichten}} + \underbrace{\frac{1}{2}(\Psi_1\Psi_2^* + \Psi_2\Psi_1^*)}_{\text{quantenmechanische Interferenzen}} = \\
 &= |\Psi_1|^2 + \text{Re}\Psi_1\Psi_1^*e^{-i\varphi} = |\Psi_1|^2(1 + \cos\varphi)
 \end{aligned}$$

### 3 Quantenmechanik

Die Phasendifferenz  $\varphi$  hat demnach messbare Konsequenzen. Als Funktion von  $\varphi$  ist die vollständige Auslöschung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit möglich, das zeigt das wellenartige Muster auf dem Bildschirm. In der klassischen Physik würden sich die beiden Wahrscheinlichkeiten einfach nur addieren, in der Quantenmechanik dagegen gibt es **Interferenzen** durch die komplexe Amplitude der Wellenfunktion.



Auslöschung durch Interferenz

Das ist der berühmte **Welle-Teilchen-Dualismus**: die Ortsmessung im Detektor oder auf dem Bildschirm zeigt die Teilchen-Eigenschaft, der Detektor klickt oder auf dem Bildschirm entsteht ein Punkt. Die Interferenzen dagegen zeigen die Wellen-Eigenschaft des Teilchens; wie bei Wasserwellen, die an zwei Stellen angeregt werden, überlagern sich die beiden Amplituden. Beides zusammen kann man anschaulich nicht mehr verstehen, nur noch mithilfe der Schrödinger-Gleichung berechnen.

#### 3.2.3 Rätsel

Die Schrödinger-Gleichung hat sich historisch aus der Analyse vieler Experimente entwickelt, die man mit der klassischen Physik nicht lösen konnte. Im Gegensatz zur nichtlinearen klassischen Mechanik ist sie allerdings eine lineare Gleichung. Wir werden versuchen, in dieser Vorlesung folgende Fragen zu beantworten:

- Wie entstehen diskrete Spektren aus einer kontinuierlichen Differenzialgleichung?
- Welche Werte der Energie, des Impulses, und des Drehimpulses messen wir bei einem Teilchen, und warum sind nicht alle Werte erlaubt?
- Wie bewegt sich ein Teilchen?
- Unter welchen Bedingungen erhalten wir die nichtlineare klassische Physik als Grenzfall der linearen Quantenmechanik?
- Wie beschreiben wir die Wechselwirkung vieler Teilchen?

Wir werden auch einige Überraschungen erleben:

- Ein punktförmiges Teilchen hat einen inneren Drehimpuls, den Spin, der nicht mit seiner Bewegung im Ortsraum zusammenhängt.
- Ein Teilchen kann durch eine hohe Energiebarriere hindurch dringen, obwohl es eigentlich nicht genügend Energie dafür besitzt.
- Zwei Elektronen dürfen nicht denselben Zustand annehmen.

#### 3.2.4 Erweiterungen

Die Schrödinger-Gleichung 3.1 ist die Grundlage für die Atom-, Molekül- und Festkörperphysik. Die Newton-Theorie ist jedoch nicht falsch, denn im Grenzfall großer Massen und hoher Energien erhalten wir die Newton-Gleichung, wie wir später noch herleiten werden. Bei hohen Geschwindigkeiten allerdings müssen wir die Schrödinger-Gleichung relativistisch verallgemeinern, das geschieht mit der *Dirac-Gleichung*. Für Elementarteilchen und elektromagnetische Felder benötigen wir eine alternative Form der Verallgemeinerung, die *Quantenfeldtheorie*. Diese Theorien bauen auf dem Lagrange-Formalismus auf und nutzen Symmetrien, um Wechselwirkungen zu postulieren. Kräfte werden damit zu Quantenteilchen, zum Beispiel werden quantisierte elektrische und magnetische Felder zu *Photonen*. Hier zeigt sich wieder der Welle-Teilchen-Dualismus, das Licht ist sowohl eine Welle wie auch ein Gas von Photonen, je nachdem was wir messen.

In dieser Vorlesung haben wir nur Zeit, die Schrödinger-Gleichung zu behandeln. Auch im Bachelorstudium werden die relativistische Quantenmechanik und die Quantenfeldtheorie in eigenen Vorlesungen behandelt, die sich über mehrere Semester erstrecken. Dasselbe gilt übrigens auch für die fortgeschrittene Atom-, Molekül- und Festkörperphysik, die auf der Schrödinger-Gleichung aufbauen. Sie sehen, die Quantenmechanik ist so umfangreich, dass Sie sich jahrelang mit ihr beschäftigen können, von den mathematischen und naturphilosophischen Grundlagen bis hin zu konkreten Anwendungen, beispielsweise für elektronische Schaltkreise. Und ständig gibt es dazu neue wissenschaftliche Erkenntnisse.

#### 3.2.5 Freies Teilchen

In der klassischen Mechanik bewegt sich ein freies Teilchen mit konstanter Geschwindigkeit,  $\vec{r}(t) = \vec{v}t + \vec{r}(0)$ . Ein freies Quantenteilchen dagegen wird durch eine Wellenfunktion beschrieben, die ein recht kompliziertes Verhalten zeigt. Dazu betrachten wir die

### 3 Quantenmechanik

Schrödinger-Gleichung ohne Potenzial

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{x}, t) \quad (3.3)$$

Die zeitliche Änderung der Wellenfunktion ist demnach nur mit ihrer räumlichen Krümmung verknüpft. Eine Lösung dieser Gleichung ist die ebene Welle

$$\Psi(\vec{x}, t) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{x}-i\omega t}$$

Zur Kontrolle berechnen wir die Ableitungen

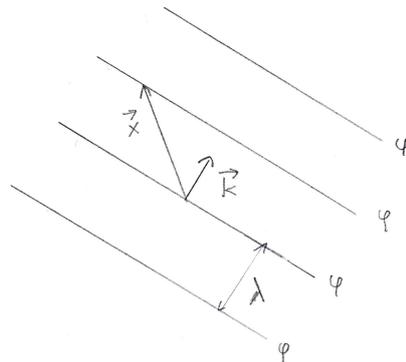
$$\nabla e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = i\vec{k}e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}, \quad \nabla^2 e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} = -k^2 e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}, \quad \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\omega t} = -i\omega e^{-i\omega t} \Rightarrow i\hbar(-i\omega) = -\frac{\hbar^2}{2m}(-k^2)$$

Aus der partiellen Differentialgleichung wird mit diesem Ansatz eine algebraische Gleichung mit dem Ergebnis

$$\boxed{\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \quad (3.4)$$

Der Betrag des Wellenvektors bestimmt somit die Frequenz der Welle.

Was bedeutet die ebene Welle anschaulich?



An jedem Ort und zu jeder Zeit besitzt die Welle die komplexe Zahl  $e^{i\varphi}$  auf dem Einheitskreis mit der Phase  $\varphi = \vec{k}\cdot\vec{x} - \omega t$ . Diese Phase ist bis auf ein Vielfaches von  $2\pi$  bestimmt. Zu jeder Zeit  $t$  bilden die Orte mit konstanter Phase,  $\vec{k}\cdot\vec{x} = \text{konstant}$ , offensichtlich Ebenen senkrecht zum Wellenvektor  $\vec{k}$ . Sie bewegen sich in Richtung des Wellenvektors mit der **Phasen-Geschwindigkeit**  $v = \frac{\omega}{k}$ . Der Abstand zwischen den Ebenen, die **Wellenlänge**, ist  $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ . Am selben Ort  $\vec{x}$  rotiert die Phase mit der Winkelgeschwindigkeit  $\dot{\varphi} = \omega$  und erreicht nach der **Periodendauer**  $T = \frac{2\pi}{\omega}$  wieder denselben Wert modulo  $2\pi$ .

### 3 Quantenmechanik

Für das freie Teilchen ist die ebene Welle eine Lösung der Schrödinger-Gleichung. Andererseits sprechen wir aber immer noch von einem Teilchen, denn ein Detektor klickt, wenn er von einem Teilchen ausgelöst wird. Die Experimente an Photonen und Elektronen haben gezeigt, dass die Wellen- und Teilchen-Eigenschaften miteinander verknüpft sind:

Das freie Teilchen hat die Energie  $E = \hbar\omega$  und den Impuls  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ .

Dabei ist  $\hbar$  das Plancksche Wirkungsquantum, es hat die Dimension *Energie mal Zeit* und den Wert  $\hbar \simeq 1.05 \cdot 10^{-34}$  Js.

Bei einer Punktmasse  $m$  zeigen sich die Teilchen-Eigenschaften in der Energie  $E$  und dem Impuls  $\vec{p}$  mit  $E = \frac{p^2}{2m}$ , während der Wellencharakter durch  $\omega, \vec{k}$  beschrieben wird mit der Relation  $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ . Bei masselosen Photonen gilt die relativistische Gleichung  $E = pc$  mit der Lichtgeschwindigkeit  $c \simeq 3 \cdot 10^8$  m/s, und die Maxwellgleichungen der Elektrodynamik geben die Relation  $\omega = ck$  für die freie elektromagnetische Welle. Damit erhalten wir die konsistente Gleichung  $\hbar\omega = c\hbar k$ .

Klassisch gesehen bewegt sich das Teilchen mit der Geschwindigkeit  $v = \frac{p}{m}$ . In der Quantenmechanik jedoch ist der Ort des Teilchens völlig unbestimmt, seine Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\Psi(\vec{x}, t)|^2$  hat im gesamten Raum einen konstanten Wert. Dafür hat es einen wohldefinierten Impuls  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ . Hier zeigt sich schon die **Heisenbergsche Unschärferelation**:

Ort und Impuls können nicht gleichzeitig scharf gemessen werden.

Die klassische Welle, beispielsweise eine Schallwelle oder eine elektromagnetische Welle, wird ebenfalls durch eine partielle Differenzialgleichung beschrieben,

$$\underbrace{\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}}_{-\frac{\omega^2}{c^2}} \Psi(\vec{x}, t) = \underbrace{\nabla^2}_{-k^2} \Psi(\vec{x}, t)$$

Im Gegensatz zur Schrödinger-Gleichung gibt es hier nicht die erste, sondern die zweite Ableitung in der Zeit, und die Gleichung ist reell, Real- und Imaginärteil werden nicht miteinander gekoppelt. Die ebene Welle 3.2.5 ist jedoch auch eine Lösung dieser Gleichung, wir erhalten damit  $\omega = ck$ . Für jeden Wellenvektor  $\vec{k}$  gibt es somit dieselbe Phasengeschwindigkeit  $c = \omega/k$ , wogegen in der Quantenmechanik die Phasengeschwindigkeit vom Wellenvektor abhängt,  $\omega/k \propto k$ . Das führt zu unterschiedlichen Eigenschaften eines Wellenpaketes.

### 3.2.6 Wellenpaket

Die ebene Welle beschreibt ein freies Teilchen mit konstanter Aufenthaltswahrscheinlichkeit; es scheint sich gar nicht zu bewegen, obwohl es einen Impuls hat. Aber es gibt auch Lösungen der Schrödinger-Gleichung, bei denen sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit bewegt. Die ebene Welle ist eine *spezielle* Lösung der Differenzialgleichung, die *allgemeine* erhalten wir durch eine Überlagerung von ebenen Wellen.

Die Mathematik sagt uns dazu, dass die ebenen Wellen eine Basis des linearen Lösungsraumes darstellen, ein vollständiges orthonormales Funktionensystem. Jeder Vektor des Lösungsraumes, also jede Lösung der Differenzialgleichung, kann nach dieser Basis entwickelt werden. Im Fall des freien Teilchens gibt es unendlich viele Basiselemente, denn es gibt ja unendlich viele ebene Wellen, die durch den Index  $\vec{k}$  beschrieben werden.

Der allgemeine Zustand eines freien Teilchens ist daher die folgende Überlagerung (in einer Raumdimension)

$$\Psi(x, t) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \phi(k) e^{ikx - i\omega t} \quad \text{mit} \quad \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.5)$$

Mathematisch gesehen, ist diese Überlagerung gerade die **Fourier-Transformation**, eine eindeutige Abbildung im Funktionenraum  $\Psi(x, 0) \leftrightarrow \phi(k)$ . Die inverse Abbildung ist

$$\phi(k) = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \Psi(x, 0) e^{-ikx} \quad (3.6)$$

Diese Abbildung ändert nicht die Norm im Funktionenraum, daher gilt

$$\int dx |\Psi(x, t)|^2 = \int dk |\phi(k, t)|^2 = 1 \quad \text{mit} \quad \phi(k, t) = \phi(k) e^{-i\omega t}$$

Das erste Integral hat den Wert eins, denn es ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo zu messen. Diese Relation legt nun folgende Interpretation nahe:

- $|\Psi(x, t)|^2 dx$  ist die Wahrscheinlichkeit, den Ort des Teilchens im Intervall  $[x, x + dx]$  zu messen.
- $|\phi(k, t)|^2 dk$  ist die Wahrscheinlichkeit, den Impuls  $p = \hbar k$  des Teilchens im Intervall  $[\hbar k, \hbar(k + dk)]$  zu messen.

### 3 Quantenmechanik

Weil der Impuls irgendeinen Wert annimmt, hat das Integral über seine Wahrscheinlichkeitsdichte den Wert eins.

Die Wellenfunktionen  $\Psi(\vec{x})$  und  $\Phi(\vec{k})$  sind identische Beschreibungen der Eigenschaften des Teilchens. Das gilt nicht nur für ein freies Teilchen, sondern ganz allgemein. Wir können die Quantenmechanik sowohl im Orts- als auch im Impulsraum formulieren, und später werden wir noch andere Darstellungen kennen lernen.

#### Gaußpaket

Die Fourier-Transformation einer Gaußverteilung ist wieder eine Gaußverteilung. Deshalb eignet sich das Gauß'sche Wellenpaket als ein Beispiel, das man analytisch rechnen kann. Wir betrachten somit die folgende Wellenfunktion im Impulsraum

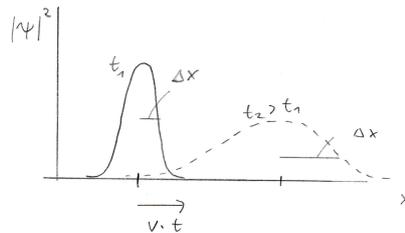
$$\phi(k) = A e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\Delta_k^2}}$$

Das ist eine Gaußglocke mit dem Mittelwert  $k_0$  und der Breite  $\Delta_k$ , die nicht von der Zeit abhängt. Im Ortsraum dagegen erhalten wir die zeitabhängige Wellenfunktion

$$\Psi(x, t) = A \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\Delta_k^2} + ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t}$$

Die Integration liefert wieder eine Gaußglocke. Sie bewegt sich allerdings mit der Geschwindigkeit  $v$ , und ihre Breite  $\Delta_x$  wächst mit der Zeit, das Wellenpaket zerfließt. Wir erhalten

$$v = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m}, \quad \Delta_x = \frac{1}{\sqrt{2}\Delta_k} \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 \Delta_k^4 t^2}{m^2}}$$



Nach welcher Zeit  $T$  verdoppelt sich die Ortsunschärfe  $\Delta_x$ ? Mit  $\sqrt{1 + \frac{\hbar^2 \Delta_k^4 T^2}{m^2}} = 2$  sehen wir, das hängt von der anfänglichen Größe des Teilchens  $d \simeq \Delta_x(t=0)$  und seiner Masse  $m$  ab. Für ein Wasserstoffmolekül mit  $d \simeq 10^{-10}\text{m}$  und  $m \simeq 10^{-27}\text{kg}$  erhalten wir  $T \simeq 10^{-12}\text{s}$ . Wir können diese Verbreiterung der Wellenfunktion innerhalb einer Messung

### 3 Quantenmechanik

demnach beobachten, und wir müssen das Molekül quantenmechanisch beschreiben. Für ein winziges Sandkorn mit  $d \simeq 10^{-6}\text{m}$  und  $m \simeq 10^{-15}\text{kg}$  erhalten wir dagegen  $T \simeq 1$  Jahr. Das können wir nicht messen, und die klassische Beschreibung reicht somit aus.

#### 3.2.7 Erwartungswerte und Schwankungen

Das Beispiel des Wellenpaketes sollte noch einmal das Postulat der Quantenmechanik deutlich machen: Ort und Geschwindigkeit eines Teilchens verlieren ihre anschauliche Bedeutung, das Teilchen befindet sich gleichzeitig an vielen Orten und hat gleichzeitig viele Impulse, und es gibt nur Wahrscheinlichkeiten für die entsprechenden Messergebnisse. Die Messwerte sind statistische Ereignisse; Herr Einstein: Gott würfelt doch!

Die Wahrscheinlichkeitsdichte für eine Ortsmessung ist

$$\rho(\vec{x}, t) = |\Psi(\vec{x}, t)|^2$$

In einer Raumdimension bedeutet das: Wir machen  $M$  identische Experimente und betrachten den Grenzwert  $M \rightarrow \infty$ . Die Anzahl der Experimente, bei denen der Wert  $x$  im Intervall  $[x_1, x_2]$  gemessen wird, ist

$$M \int_{x_1}^{x_2} \rho(x) dx = M \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(\vec{x}, t)|^2 dx$$

Wir können natürlich auch eine Funktion  $f(x)$  des Ortes  $x$  messen. Anstatt die gesamte Verteilung von  $f$  zu diskutieren, können wir die Ergebnisse der wiederholten Experimente durch den Mittelwert  $\langle f \rangle$  und die Schwankung  $\Delta f$  der Größe  $f$  charakterisieren. Diese Größen sind folgendermaßen definiert:

- Erwartungswert (= Mittelwert) der Größe  $f(x)$ :

$$\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \rho(x) dx \quad (3.7)$$

- Varianz = mittlere quadratische Abweichung von Mittelwert von  $f$ :

$$\Delta^2 f = \langle (f(x) - \langle f(x) \rangle)^2 \rangle = \langle f^2 \rangle + \langle f \rangle^2 - 2\langle f \rangle \langle f \rangle = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2 \quad (3.8)$$

- Schwankung = Standardbreite von  $f$

$$\Delta f = \sqrt{\Delta^2 f} \quad (3.9)$$

### Gaußverteilung

Als Beispiel betrachten wir wieder die Gaußverteilung

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

Diese Verteilung ist normiert,  $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1$ , und die Rechnung liefert

$$\langle x \rangle = x_0, \quad \Delta x = \sigma$$

### 3.2.8 Orts- und Impuls-Operator

Mit diesen Definitionen können wir nun den Erwartungswert des Ortes und des Impulses eines Teilchens berechnen, entsprechend in der Orts- und der Impulsdarstellung

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x)|^2 dx, \quad \langle p \rangle = \hbar \langle k \rangle = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} k |\phi(k)|^2 dk$$

Wir wollen jedoch nicht für jede Messgröße die entsprechende Darstellung der Wellenfunktion verwenden, sondern wir wollen sämtliche Größen durch die Ortswellenfunktion ausdrücken. Kann also  $\langle p \rangle$  durch  $\Psi(x)$  berechnet werden?

Das ist möglich, allerdings benötigen wir dazu eine neuartige Größe, den Impulsoperator. Das zeigt die folgende Rechnung, wobei wir ständig die Fouriertransformation und deren Inverse verwenden.

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \hbar \langle k \rangle = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) k \phi^*(k) \\ &= \hbar \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \Psi^*(x) e^{ikx} \\ &= \hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \phi(k) k e^{ikx} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \phi(k) e^{ikx} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x) \hat{p} \Psi(x) \\ &= \langle \Psi | \hat{p} | \Psi \rangle \end{aligned}$$

In der letzten Gleichung haben wir schon das Skalarprodukt im Hilbertraum verwendet, das wir später noch genauer untersuchen werden.

### 3 Quantenmechanik

Der Erwartungswert des Impulses kann somit im Ortsraum durch den Impulsoperator  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$  berechnet werden. Das gilt auch für Funktionen des Impulses.

$$\langle f(p) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x) f(\hat{p}) \Psi(x)$$

Hier haben wir Funktionen eines Operators eingeführt, die in der Funktionalanalysis genauer definiert werden. Damit erhalten wir für den Erwartungswert der kinetischen Energie

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x) \left( \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 \Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x) \Psi''(x)$$

Analog definieren wir den dreidimensionalen Impulsoperator als

$$\boxed{\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla} \quad (3.10)$$

und erhalten

$$\boxed{\langle \vec{p} \rangle = \int d^3x \Psi^*(\vec{x}) \hat{p} \Psi(\vec{x})} \quad (3.11)$$

Der Impulsoperator ist somit eine Abbildung, die die Funktion  $\Psi$  in einen Vektor mit jeweils drei Funktionen abbildet,

$$\hat{p} \Psi = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial y} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Im Ortsraum ist der Impulsoperator also eine Ableitung, der Ortsoperator dagegen ist einfach die Multiplikation mit dem Ort,

$$\boxed{\hat{x} = \vec{x}}, \quad \hat{x} \Psi = \begin{pmatrix} x \Psi(x, y, z) \\ y \Psi(x, y, z) \\ z \Psi(x, y, z) \end{pmatrix}$$

Dabei werden immer die Erwartungswerte eines Operators  $\hat{A}$  durch folgendes Integral berechnet,

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d^3x \Psi^*(\vec{x}) \hat{A} \Psi(\vec{x})$$

Vorsicht! Der Operator steht immer in der Mitte zwischen der komplex konjugierten und der normalen Wellenfunktion,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x) \hat{p} \Psi(x) \neq \int_{-\infty}^{\infty} dx \hat{p} (\Psi^*(x) \Psi(x))$$

### 3.2.9 Kommutator

Ein Operator ist eine lineare Abbildung in einem Funktionenraum. Er kann eine Ableitung sein oder auch eine Matrix. Überraschenderweise können wir physikalische Aussagen machen, ohne die Schrödinger-Gleichung zu lösen oder Integrale zu berechnen. Das werden wir später genauer untersuchen, und dazu benötigen wir die Algebra der Operatoren.

Operatoren können multipliziert werden, d.h. sie werden nacheinander ausgeführt.

$$(\hat{A}\hat{B})\Psi = \hat{A}(\hat{B}\Psi)$$

Im Gegensatz zu Zahlen vertauschen Operatoren jedoch im Allgemeinen nicht. Das wollen wir am Beispiel der wichtigsten Vertauschungsrelationen der Quantenmechanik untersuchen, dem Kommutator von Ort und Impuls. In einer Dimension gilt

$$\hat{x}\hat{p}\Psi(x) = x\frac{\hbar}{i}\Psi'(x), \quad \hat{p}\hat{x}\Psi = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(x\Psi(x)) = \frac{\hbar}{i}(\Psi(x) + x\Psi'(x))$$

Wir definieren einen zusammengesetzten Operator, den **Kommutator**  $[\hat{x}, \hat{p}]$ , und erhalten somit

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}, \Rightarrow \boxed{[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar} \quad (3.12)$$

Der Kommutator ist eine komplexe Zahl, aber eine Zahl ist ebenfalls ein Operator. Analog erhalten wir in drei Dimensionen

$$\boxed{[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}}$$

Verschiedene Komponenten von Ort und Impuls vertauschen, jedoch nicht identische Komponenten. Diese Aussage ist unabhängig von der Darstellung der Wellenfunktionen. Mithilfe dieser Relation werden wir später das Energiespektrum des harmonischen Oszillators und die Eigenschaften des quantenmechanischen Drehimpulses berechnen, ohne eine Differenzialgleichung zu lösen. Der Kommutator von Ort und Impuls ist die fundamentale Relation der Quantenmechanik.

### 3.2.10 Hamilton-Operator

Operatoren sind ein mathematisches Werkzeug der Quantenmechanik. Sie beschreiben Messungen, ihre Eigenwerte sind Messergebnisse und der Erwartungswert der Messungen an einem Zustand ist durch ein Skalarprodukt gegeben. Wie sieht der Operator  $\hat{H}$  der Energie aus?

Dazu schreiben wir die Schrödinger-Gleichung in Operatorform,

### 3 Quantenmechanik

$$\boxed{i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi \quad \text{mit} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(\hat{x})} \quad (3.13)$$

Im Ortsraum lautet der **Hamilton-Operator**

$$\hat{H} = \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)^2 \frac{1}{2m} + U(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{x})$$

Der Hamilton-Operator setzt sich zusammen aus kinetischer und potentieller Energie eines Teilchens. Er beschreibt sowohl die zeitliche Entwicklung eines Zustandes  $\Psi$  als auch seine Energie. Im Allgemeinen hat ein Zustand eine Wahrscheinlichkeitsverteilung von Impuls und Ort, also auch eine Verteilung seiner Energiewerte. Wenn wir immer am selben Zustand die Energie messen, so erhalten wir den Erwartungswert

$$\boxed{\langle \hat{H} \rangle_t = \int d^3x \Psi^*(\vec{x}, t) \hat{H} \Psi(\vec{x}, t)}$$

#### Korrespondenz-Prinzip

Wir hatten die Schrödinger-Gleichung und damit den Hamilton-Operator als Postulat eingeführt. Wie findet man im Allgemeinen den Hamilton-Operator, beispielsweise für ein Teilchen im elektromagnetischen Feld oder für mehrere miteinander wechselwirkende Teilchen?

Das sagt uns ein weiteres Postulat, das Korrespondenz-Prinzip:

- Konstruiere die klassische Hamilton-Funktion in kartesischen Koordinaten,  $\mathcal{H}(\vec{x}_1, \vec{p}_1, \vec{x}_2, \vec{p}_2, \vec{x}_3, \vec{p}_3, \dots)$
- Ersetze die Orte und Impulse durch die entsprechenden Operatoren,  $\hat{H} = \mathcal{H}(\vec{x}_1, \frac{\hbar}{i}\nabla_1, \vec{x}_2, \frac{\hbar}{i}\nabla_2, \vec{x}_3, \frac{\hbar}{i}\nabla_3, \dots)$
- Formuliere die Schrödinger-Gleichung für die Wellenfunktion  $\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3, \dots, t)$ :  $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{H}\Psi$

#### Vergleich mit der klassischen Mechanik

Die Quantenmechanik leiten wir somit aus der klassischen Mechanik her. Gelten denn auch die Newton-Gleichungen und die Energieerhaltung für ein Teilchen im Potenzial in der Quantenmechanik?

### 3 Quantenmechanik

Später werden wir Folgendes herleiten:

$$m \frac{d}{dt} \langle \vec{x} \rangle = \langle \vec{p} \rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = -\langle \nabla U \rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{H} \rangle = 0$$

Die ersten beiden Gleichungen finden Sie in der Literatur unter dem Namen **Ehrenfest-Theorem**. Sie sehen fast so aus wie die Newton-Gleichungen, aber dazu müssen Sie  $\langle \nabla U(\vec{x}) \rangle$  durch  $\nabla U(\langle \vec{x} \rangle)$  ersetzen, dabei werden die Quantenfluktuationen vernachlässigt. Die dritte Gleichung sagt, dass in der Quantenmechanik der Erwartungswert der Energie erhalten ist. Obwohl wir für jede Energiemessung am selben Zustand im Allgemeinen einen anderen Wert erhalten, ist der Mittelwert dieser Messungen zeitlich konstant.

Das gilt natürlich nur, ebenso wie in der klassischen Mechanik, für zeitlich konstante Potentiale. Bei zeitlich oszillierenden magnetischen und elektrischen Feldern, oder quantenmechanisch ausgedrückt, durch Ein- und Abstrahlen von Photonen, kann der Erwartungswert der Energie geändert werden.

#### 3.2.11 Stationäre Schrödinger-Gleichung

Für die meisten Zustände sind die gemessenen Energiewerte breit gestreut. Gibt es Zustände, bei denen immer nur ein einziger Wert der Energie gemessen wird?

Wir haben schon einen solchen Zustand kennen gelernt: die ebene Welle eines freien Teilchens besitzt nur einen Energiewert  $E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ . Ein Wellenpaket dagegen hat eine breite Verteilung von Energiewerten. Wie sieht das bei einem Teilchen in einem Potenzial  $U$  aus?

Wir suchen Zustände  $\Psi(\vec{x}, t)$  mit fester Energie  $E$  und zeitlich konstanter Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $\rho(\vec{x}, t) = |\Psi(\vec{x}, t)|^2 = \rho(\vec{x})$ , die **stationären Zustände**. Dazu lösen wir die zeitabhängige Schrödingergleichung  $i\hbar\dot{\Psi} = \hat{H}\Psi$  durch einen Separationsansatz  $\Psi(\vec{x}, t) = f(t)\Psi(\vec{x})$ .

$$i\hbar \frac{df}{dt} \Psi(\vec{x}) = f(t) \hat{H} \Psi \Rightarrow \quad i\hbar \frac{1}{f} \frac{df}{dt} = \frac{\hat{H} \Psi}{\Psi} = \text{konst.} = E$$

In der vorigen Gleichung hängt die linke Seite nur von der Zeit  $t$  und die rechte nur vom Ort  $\vec{x}$  ab, daher müssen beide Seiten eine Konstante sein, die wir  $E$  nennen. Daraus folgt

$$f(t) = e^{-i\omega t} \quad \text{mit} \quad \hbar\omega = E$$

Diese Funktion beschreibt die Drehung der Phase der Wellenfunktion mit der Frequenz  $\omega = \frac{E}{\hbar}$ . Die zweite Gleichung lautet

$$\boxed{\hat{H}\Psi(\vec{x}) = E\Psi(\vec{x})} \quad (3.14)$$

### 3 Quantenmechanik

Das ist die **stationäre Schrödinger-Gleichung**. Sie ist eine Eigenwert-Gleichung für den Hamilton-Operator  $\hat{H}$ :

- $E$  ist ein Eigenwert von  $\hat{H}$ .
- $\Psi(\vec{x})$  ist ein Eigenvektor von  $\hat{H}$ .
- Der physikalische Eigenvektor ist normiert,  $\|\Psi\|^2 = \int d^3x |\Psi(\vec{x})|^2 = 1$

Nach den Postulaten der Quantenmechanik ist  $E$  ein Messwert der Energie, und der stationäre Zustand, der dazu gehörige Eigenzustand  $\Psi$  besitzt nur einen Energiewert. Wir suchen die Eigenzustände nur für normierte Funktionen, denn die Norm ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo im Raum zu messen. Mathematisch gesehen befindet sich die Physik auf der Oberfläche der Einheitskugel im unendlich dimensional funktionsraum, dem Hilbertraum. Und die stationäre Schrödinger-Gleichung ist ein Problem der linearen Algebra im Hilbertraum.

Die zeitabhängige Wellenfunktion des stationären Zustandes lautet

$$\Psi(\vec{x}, t) = \Psi(\vec{x})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

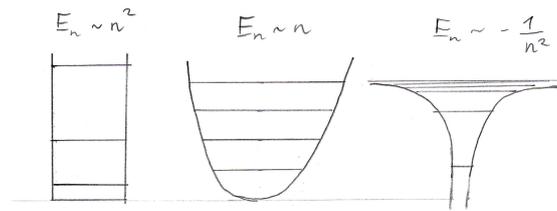
Da der Betrag des Phasenfaktors den Wert  $|e^{-i\frac{E}{\hbar}t}| = 1$  hat, hängt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens nicht von der Zeit ab. Der stationäre Zustand hängt zwar selbst von der Zeit ab, seine Phase rotiert überall mit konstanter Winkelgeschwindigkeit, aber die Verteilung seiner Messergebnisse ist zeitlich konstant. Das gilt natürlich auch für seine Energie, denn davon besitzt er nur einen einzigen Messwert.

#### Quantisierung

Warum ist die Energie eines gebundenen Zustandes quantisiert? Die stationäre Schrödinger-Gleichung ist eine Differenzialgleichung für die Wellenfunktion  $\Psi(\vec{x})$ . Diese Gleichung kann für jeden Wert von  $E$ , zumindestens numerisch, gelöst werden. Die Physik jedoch findet im Raum der normierten Wellenfunktionen statt, das schränkt die erlaubten Werte der Energie erheblich ein. Für viele Potentiale werden wir zeigen, dass nur diskrete Werte der Energie erlaubt sind. **Die Energie ist quantisiert**. Im Festkörper bewegt sich ein Elektron in periodischen Potenzial. Auch das schränkt die Werte der erlaubten Energiewerte erheblich ein, es gibt **Energiebänder**.

In dieser Vorlesung werden wir diskrete Energiewerte für den Quantentopf, den harmonischen Oszillator und das Coulomb Potenzial berechnen.

### 3 Quantenmechanik



Auch in anderen Gebieten der Physik gibt es quantisierte Schwingungen. Eine Seilwelle, eine am Rand eingespannte Membran und elektromagnetische Wellen in Hohlleitern und Resonatoren werden ebenfalls durch partielle Differentialgleichungen beschrieben. Die Eigenschwingungen, die Schwingungsmoden, findet man aus Eigenwert-Problemen. Durch die Randbedingungen sind für diese Wellen nur diskrete Werte der Schwingungsfrequenzen erlaubt.

Es gibt allerdings einen wichtigen Unterschied zur Quantenmechanik: die Energie einer Welle kann in der klassischen Physik jeden Wert annehmen, es gibt keinen Zusammenhang zwischen der Schwingungsfrequenz und der Energie.

#### 3.2.12 Zeitentwicklung

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der stationären Zustände hängt nicht von der Zeit ab. Zwar dreht sich die Phase der Wellenfunktion, aber die Phase ist nur bei der Interferenz verschiedener Zustände sichtbar.

Wie sehen Zustände aus, deren Aufenthaltswahrscheinlichkeit von der Zeit abhängt? Das zeigt uns die Mathematik der Schrödinger-Gleichung 3.13. Wir suchen die allgemeine Lösung der Gleichung  $i\hbar\dot{\Psi}(\vec{x}, t) = \hat{H}\Psi(\vec{x}, t)$ . Nehmen wir nun an, wir kennen die speziellen Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung 3.14,  $\hat{H}\Psi_n(\vec{x}) = E_n\Psi_n(\vec{x})$ . Dann sagt uns die Funktionalanalysis

Die Menge  $\{\Psi_n(\vec{x}) | n \in \mathcal{N}\}$  ist ein vollständiges Orthonormalsystem (Basis) des Hilbertraumes  $\mathcal{L}^2$  der normierbaren Funktionen. D.h., jeder Anfangszustand kann nach dieser Basis entwickelt werden,

$$\Psi(\vec{x}, t = 0) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{x})$$
$$c_n = \int d^3x \Psi^*(\vec{x}, 0) \Psi_n(\vec{x})$$

Diese Entwicklung liefert sofort die allgemeine Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-

### 3 Quantenmechanik

gleichung,

$$\boxed{\Psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \Psi_n(\vec{x})} \quad (3.15)$$

Wir brauchen demnach die zeitabhängige Gleichung gar nicht zu lösen, sondern wir benötigen nur die Entwicklung des Anfangszustandes und setzen  $c_n \rightarrow c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$ .

Die Lösungen der stationären Schrödingergleichung liefern schon die vollständige Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung.

Wir wollen die Gleichung 3.15 noch beweisen:

$$\begin{aligned} \text{zz } i\hbar\dot{\Psi} &= \hat{H}\Psi \\ i\hbar\dot{\Psi} &= i\hbar \sum_n \left(-i\frac{E_n}{\hbar}\right) c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \Psi_n = \sum_n E_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \Psi_n \\ \hat{H}\psi &= \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \underbrace{\hat{H}\Psi_n}_{E_n\Psi_n} \quad \text{qed} \end{aligned}$$

Eine Überlagerung von speziellen Lösungen haben wir schon bei den klassischen schwingenden Systemen kennen gelernt. Die Eigenwertgleichung  $m\omega^2 \underline{w} = \hat{V} \cdot \underline{w}$  lieferte uns die Schwingungsfrequenzen  $\omega_n$  und die Eigenmoden  $\underline{w}_n$ , und die allgemeine Lösung erhielten wir durch eine Entwicklung nach diesen Eigenschwingungen.

$$\underline{q}(t) = \sum_n c_n e^{i\omega_n t} \underline{w}_n$$

In der Quantenmechanik hat der Vektor  $\underline{q}$  unendlich viele Komponenten, er ist eine Funktion  $\Psi(\vec{x})$ , aber die stationäre Schrödinger-Gleichung ist ebenfalls eine Eigenwertgleichung, und mit deren Lösungen erhalten wir die allgemeine Lösung der zeitlichen Entwicklung des Anfangszustandes.

#### 3.2.13 Wahrscheinlichkeitsstrom

Wenn Ladungen durch ein Volumen  $V$  fließen, so können wir das durch einen elektrischen Strom durch die Oberfläche des Volumens beschreiben. Der Strom ist ein Flächenintegral über eine Stromdichte  $\vec{j}$ , und die Ladung ist ein Volumenintegral über eine Ladungsdichte  $\rho$ . Beide Dichten hängen lokal durch folgende Gleichung zusammen, die **Kontinuitätsgleichung**

$$\dot{\rho}(\vec{x}, t) = - \underbrace{\nabla \cdot}_{\text{div}} \vec{j}(\vec{x}, t)$$

In integraler Form lautet sie

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho(\vec{x}, t) d^3x = - \int_{S(V)} \vec{j} \cdot d\vec{f}$$

### 3 Quantenmechanik

Diese Gleichung folgt aus der Tatsache, dass elektrische Ladungen erhalten sind. In der Hydrodynamik ist die Teilchenzahl erhalten, somit gilt diese Gleichung ebenfalls für die Teilchendichte  $\rho$ .

Überraschenderweise gilt die Kontinuitätsgleichung auch in der Quantenmechanik für die Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $\rho = |\Psi|^2$  eines *einzigsten* Teilchens. Wir geben hier nur das Ergebnis für den entsprechenden **Wahrscheinlichkeitsstrom** bekannt:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*]$$

Was bedeutet diese Gleichung für eine ebene Welle  $\Psi(\vec{x}, t) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{x} - i\omega t}$ ? Mit  $\nabla \Psi = i\vec{k}\Psi$  erhalten wir

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^*(i\vec{k})\Psi - \Psi(-i\vec{k})\Psi^*] = \frac{\hbar\vec{k}}{m} |A|^2 = \vec{v}\rho$$

Dieselbe Gleichung erhalten wir übrigens in der Elektrodynamik und Hydrodynamik.

Was bedeutet das nun?

Der statische Zustand  $\Psi(\vec{x}) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ , die Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen, beschreibt einen Wahrscheinlichkeitsstrom in Richtung  $\vec{k}$  mit der Stromdichte (Strom pro Fläche)  $\vec{j} = \frac{\hbar\vec{k}}{m} |A|^2$ .

Für mehrere Experimente, für viele unabhängige Teilchen, erhalten wir damit einen Teilchenstrom. Diese Gleichung werden wir verwenden, um Streuung und Tunneln zu erklären.

#### 3.2.14 Pauli-Verbot

Bisher haben wir die Schrödinger-Gleichung nur für ein einziges Teilchen in einem Potenzial diskutiert. Wie sieht die Quantenmechanik vieler Teilchen aus?

Das Korrespondenzprinzip sagt uns, dass zwei miteinander wechselwirkende Teilchen in einem äußeren Potenzial  $U_a$  folgenden Hamilton-Operator haben (hier eindimensional)

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + U_a(x_1)}_{\hat{H}_1} + \underbrace{\frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U_a(x_2)}_{\hat{H}_2} + U(|x_1 - x_2|) = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + U(|x_1 - x_2|)$$

Der Zustand beider Teilchen wird durch eine Wellenfunktion  $\Psi(x_1, x_2)$  beschrieben. Die stationäre Schrödinger-Gleichung der beiden Teilchen lautet damit

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

### 3 Quantenmechanik

Ohne Wechselwirkung  $U = 0$  scheint das Zweikörperproblem einfach zu lösen zu sein. Wir machen den Separationsansatz  $\Psi(x_1, x_2) = \Phi_j(x_1)\Phi_k(x_2)$ , und die stationäre Schrödinger-Gleichung wird damit zu

$$\hat{H}\Psi = [\hat{H}_1\Phi_j(x_1)]\Phi_k(x_2) + \Phi_j(x_1)[\hat{H}_2\Phi_k(x_2)]$$

Die Schrödinger-Gleichung für zwei Teilchen reduziert sich damit zu zwei Gleichungen für ein einziges Teilchen

$$\hat{H}_1\Phi_j(x_1) = E_j\Phi_j(x_1), \quad \hat{H}_2\Phi_k(x_2) = E_k\Phi_k(x_2),$$

und die Energieniveaus der beiden Teilchen sind damit

$$E_{jk} = E_j + E_k$$

Die Energie des Grundzustandes ist somit  $E_{11} = E_1 + E_1$ . Das ist aber falsch! Wo liegt der Fehler?

**Die Quantenmechanik darf nur Dinge beschreiben, die man auch messen kann.** Es gibt aber keine Methode, mit der man die beiden Elektronen unterscheiden kann. Deshalb gilt für ihre Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$$|\Psi(x_1, x_2)|^2 = |\Psi(x_2, x_1)|^2$$

Mit unserem Ansatz haben wir zwar die beiden Teilchen nummeriert, aber das darf keine physikalischen Konsequenzen haben. Wenn wir die Argumente vertauschen, darf sich das Betragsquadrat nicht ändern.

Nun zeigt das Experiment, dass die Natur zwei Arten von Teilchen kennt, die die obige Gleichung erfüllen,

- Fermionen mit  $\Psi(x_1, x_2) = -\Psi(x_2, x_1)$
- Bosonen mit  $\Psi(x_1, x_2) = +\Psi(x_2, x_1)$

Elektronen sind Fermionen, und Atome mit Gesamtspin  $S = 0$  sind Bosonen. Überraschenderweise hat dieser scheinbar unbedeutende Unterschied im Vorzeichen erhebliche physikalische Konsequenzen. Die Physik der Atome, Moleküle und Festkörper basiert auf dem Minuszeichen in der obigen Gleichung! Die Eigenschaften von Photonen, ultrakalten Gasen, Bose-Einstein-Kondensation und superfluidem Helium werden durch das Pluszeichen bestimmt.

Betrachten wir zwei Fermionen, zwei Elektronen. Dann folgt aus der Symmetrie-Relation

$$\Psi(x, x) = -\Psi(x, x) \Rightarrow \boxed{\Psi(x, x) = 0} \quad (3.16)$$

### 3 Quantenmechanik

Zwei Elektronen können nicht am selben Ort gemessen werden, auch ohne Wechselwirkung stoßen sie sich ab.

Unser Separationsansatz  $\Psi_{jk}(x_1, x_2) = \Phi_j(x_1)\Phi_k(x_2)$  muss falsch sein, denn er erfüllt nicht die Symmetrie-Relation. Wie sieht die Wellenfunktion für zwei unabhängige Teilchen aus? Dazu konstruieren wir uns die Wellenfunktion

$$\Psi_{jk}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Phi_j(x_1)\Phi_k(x_2) - \Phi_j(x_2)\Phi_k(x_1)] \quad (3.17)$$

Sie erfüllt offensichtlich die Symmetrie-Relation  $\Psi_{jk}(x_1, x_2) = -\Psi_{jk}(x_2, x_1)$ .

Damit erhalten wir ein wichtiges Resultat der Quantenmechanik, das **Pauli-Prinzip**. Für  $j = k$  gilt  $\Psi_{jj}(x_1, x_2) = 0$ .

Zwei Elektronen können nicht den selben Zustand annehmen.

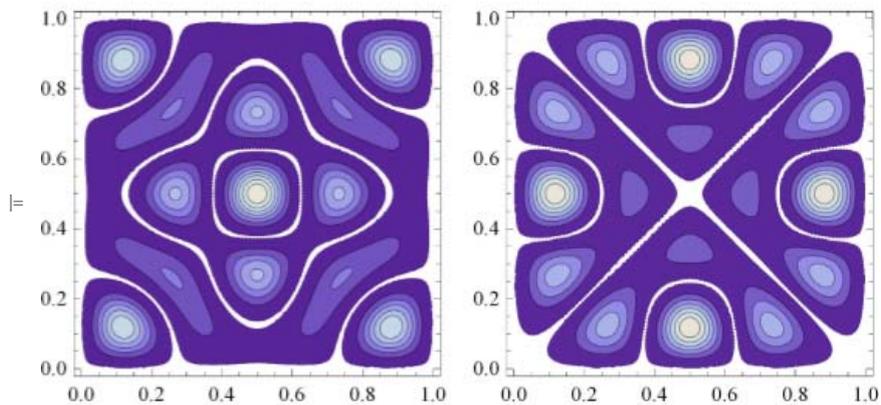
Aus der Tatsache, dass wir zwei gleichartige Teilchen nicht unterscheiden können, folgen demnach große abstoßende Kräfte, auch ohne jede Wechselwirkung. Zwei Teilchen können sich nicht am selben Ort aufhalten und nicht denselben Zustand annehmen. Daraus folgt das Periodensystem der Elemente, die Chemie, magnetische Ordnung, das Fermi-Niveau der Festkörperphysik und vieles mehr.

Bei Bosonen sieht das ganz anders aus, denn die können alle im selben Zustand sitzen. Der Grundzustand für  $N$  Bosonen ist

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) = A\Phi_1(x_1)\Phi_1(x_2)\dots\Phi_1(x_N)$$

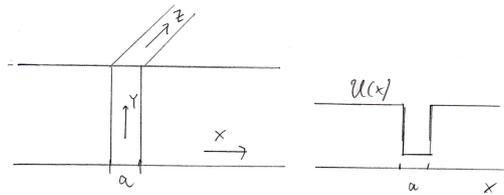
Ein Gas aus Atomen mit ganzzahligem Spin kondensiert bei tiefen Temperaturen in einen solchen Zustand. Diese **Bose-Einstein-Kondensation** wurde von Einstein 1925 postuliert und erst im Jahr 1995 experimentell realisiert.

### 3 Quantenmechanik



Zwei Teilchen befinden sich im eindimensionalen Kastenpotential im zweiten und dritten Energieniveau ohne gegenseitige Wechselwirkung. Die Abbildung zeigt die Höhenlinien von  $|\Psi(x_1, x_2)|^2$ . Welches Bild zeigt zwei Fermionen oder zwei Bosonen?

### 3.3 Eindimensionale QM



Die dreidimensionale Schrödinger-Gleichung 3.1 kann oft auf eine eindimensionale reduziert werden. Beispielsweise kann die Wellenfunktion in einer Halbleiterschicht separiert werden,  $\Psi(x, y, z) = \Psi_d(x)\Psi_f(y, z)$ , und innerhalb der Schicht erhalten wir näherungsweise ein freies Elektronen bzw. Bandstrukturen, während sich in  $x$ -Richtung das Elektron im Kasten befindet, mit diskreten Energieniveaus. Auch das Wasserstoff-Problem, ein Elektron und ein Proton, werden wir später auf eine eindimensionale Schrödinger-Gleichung reduzieren.

Deshalb untersuchen wir nun die Gleichung

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x)} \quad (3.18)$$

### 3 Quantenmechanik

Damit wollen wir folgende Fragen beantworten:

- Warum gibt es gebundene und Streu-Zustände?
- Warum sind die Energien der gebundenen Zustände quantisiert?
- Warum kann ein Teilchen durch eine Potenzial-Barriere hindurch tunneln?
- Wie lässt sich der harmonische Oszillator algebraisch lösen?

Das letzte Problem ist besonders wichtig, denn der harmonische Oszillator beschreibt Molekülschwingungen, Phononen und Photonen.

#### 3.3.1 Gebundene Zustände

Wenn ein klassisches Teilchen in einer Potenzialmulde eingesperrt wird, so kann es hin und her schwingen. Seine Energie ist dabei erhalten, sie kann jeden Wert annehmen und seine kinetische Energie wird ständig in potentielle umgewandelt oder umgekehrt. Wie sieht das quantenmechanische Bild dagegen aus?

#### Kasten

Zunächst sperren wir das Teilchen in einem unendlich hohen Kasten der Breite  $a$  ein. D.h., das Potenzial der abstoßenden Wände ist unendlich hoch. Innerhalb des Kastens  $0 < x < a$  setzen wir das Potenzial  $U = 0$  und erhalten die Schrödinger-Gleichung  $-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) = E\Psi(x)$ . Das ist die Differentialgleichung des klassischen harmonischen Oszillators, und die Lösung ist eine Überlagerung von  $\cos(kx), \sin(kx)$  mit

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$$

Diese Gleichung hatten wir schon bei den ebenen Wellen kennen gelernt, und innerhalb des Kastens ist die Lösung in der Tat eine Überlagerung von ebenen Wellen. Wegen des unendlich hohen Potentials kann sich das Teilchen nicht außerhalb des Kastens aufhalten, und deshalb gilt dort  $\Psi = 0$ . Die Wellenfunktion muss aber stetig sein, deshalb gelten die Randbedingungen

$$\Psi(0) = \Psi(a) = 0$$

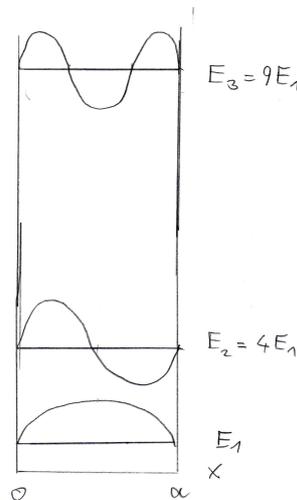
Damit ist die Lösung  $\Psi(x) = A \sin(kx)$  mit  $\sin(ka) = 0$ . Wir sehen, dass die Randbedingungen den Wellenvektor und damit die Energie quantisiert,  $ka = n\pi$ . Die Amplitude

### 3 Quantenmechanik

$A = \sqrt{2/a}$  berechnen wir aus der Normierung  $\int_0^a \Psi^2(x) dx = 1$ . Somit erhalten wir das Resultat

$$\begin{aligned} \hbar k_n &= \frac{\hbar \pi}{a} n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \\ E_n &= \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \quad (3.19) \\ \Psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\pi \frac{x}{a}\right) \end{aligned}$$

Die stationären Zustände sind stehende Wellen mit der Wellenlänge  $\lambda_n = \frac{2\pi}{k_n} = \frac{2a}{n}$ , ein Vielfaches der halben Wellenlänge des Grundzustandes muss somit in den Kasten passen. Die Energie der gebundenen Zustände ist quantisiert,  $E_n = E_1 n^2$ . Es gibt unendlich viele Werte der Energie, allerdings nur abzählbar unendlich viele, kein Kontinuum. Hohe Energien erhalten wir für kurze Wellenlängen, und ein breiter Kasten liefert niedrige Energie-Niveaus. Im Grenzfall eines unendlich breiten Kastens erhalten wir die Energie-werte des freien Teilchens.



Streuzustände gibt es nicht, denn das Teilchen kann nicht in das unendlich hohe Potenzial eindringen.

Im Experiment sieht man die Übergänge zwischen den diskreten Energieniveaus, beispielsweise beim Übergang vom Grundzustand in den ersten angeregten Zustand

### 3 Quantenmechanik

$(n = 1) \rightarrow (n = 2)$  durch Absorption eines Photons mit der Energie  
 $\hbar\omega = E_2 - E_1 = 3\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$ .

#### Schwingende Zustände

Stationäre Zustände haben zwar eine zeitliche Entwicklung, aber der Phasenfaktor rotiert auf dem komplexen Einheitskreis und trägt nicht zur Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei. Stationäre Zustände bleiben stehen.

$$\Psi_n(x, t) = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\Psi_n(x) = e^{-i\omega_n t}\Psi_n(x) \quad \text{mit} \quad \omega_n = \frac{\hbar\pi^2}{2ma^2}n^2 = \omega_1 n^2$$

$$\Rightarrow |\Psi_n(x, t)|^2 = |\Psi_n(x)|^2$$

Ein klassisches Teilchen dagegen würde an den Wänden elastisch reflektiert und mit konstanter Geschwindigkeit immer hin und her laufen. Wie beschreiben wir ein solches Teilchen quantenmechanisch?

Wir haben schon gesehen, dass die zeitliche Entwicklung eines allgemeinen Zustandes  $\Psi(x, t)$  durch eine Überlagerung sämtlicher stationärer Zustände  $\Psi_n$  beschrieben werden kann:

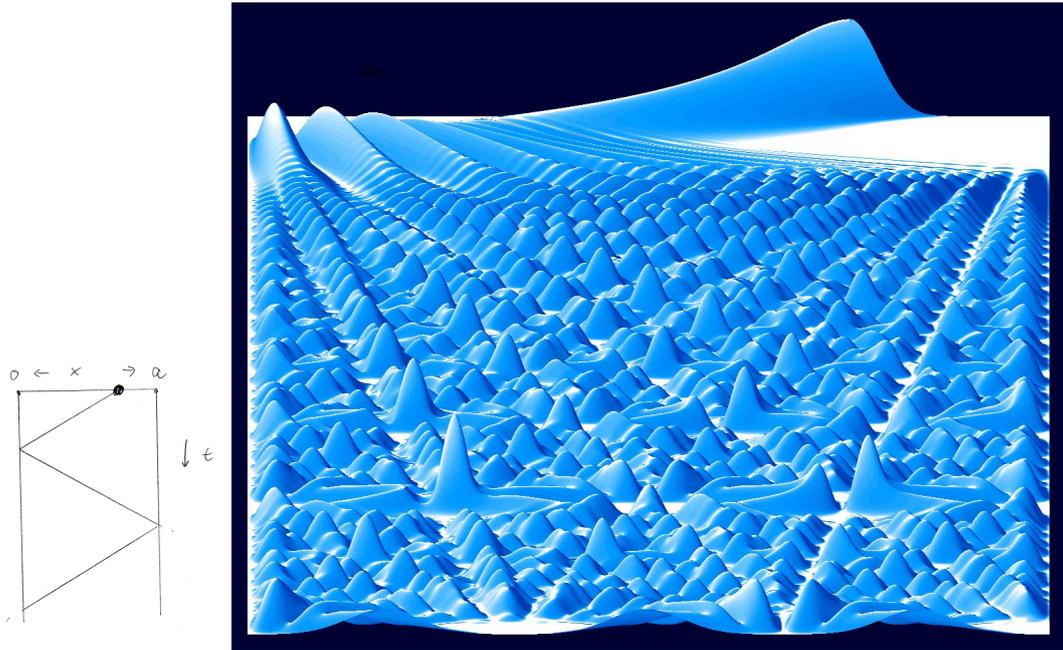
$$\boxed{\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-i\omega_1 n^2 t} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(n\pi \frac{x}{a})} \quad \text{mit} \quad c_n = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(n\pi \frac{x}{a}) \Psi(x, 0) dx$$

(3.20)

Damit erhalten wir ein Wellenpaket, das sich im Kasten bewegt. Das folgende Bild zeigt ein Wellenpaket mit dem Anfangszustand

$$\Psi(x, 0) = A \underbrace{e^{-\frac{(x-a_0)^2}{2\sigma^2}}}_{\text{Gaußglocke}} \underbrace{e^{ikx}}_{\text{Impuls}}$$

### 3 Quantenmechanik



Es ist eine Gaußglocke, die viel schmaler als die Breite des Kastens ist und einen mittleren Impuls hat. Die zeitliche Entwicklung ihrer Aufenthaltswahrscheinlichkeit wird nach unten gezeigt. Der Anfangszustand ist etwas verdeckt, und am Anfang verbreitert sich das Wellenpaket wie beim freien Teilchen. Wenn die Gaußglocke aber an die Wände des Kastens anstößt, so entstehen Interferenzen, die dieses erstaunlich komplexe Gebirge erzeugen.

Allerdings werden wir in den Übungen zeigen, dass ein so genanntes **Revival** entsteht. Nach einer gewissen Zeit  $T_r = ?$  hat sich der Anfangszustand wieder vollständig restauriert,

$$\Psi(x, T_r) = \Psi(x, 0)$$

Zusätzlich gibt es noch ein *Fractional Revival*: Zu den Zeiten  $\frac{p}{q}T_r$  wird die Wellenfunktion wieder glatt und konzentriert sich auf einige Gebiete. Zur Zeit  $T_r/4$  erhalten wir zwei Gaußpakete links und rechts, die gegeneinander laufen und miteinander interferieren. Das Bild zeigt unten die Wellenfunktion zur Zeit  $T_r/6$ .<sup>1</sup>

Revivals werden auch in Experimenten gemessen, zum Beispiel bei schwingenden Atomen in Molekülen.

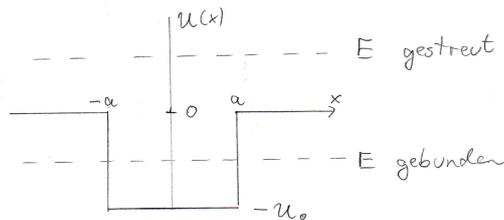
---

<sup>1</sup>Kinzel, Reents, Physik per Computer

### Quantentopf

Unendlich hohe Potentiale gibt es nicht in der Physik. Ein Elektron im Quantentopf kann dem Potenzial entkommen, wenn es eine genügend hohe Energie besitzt. Bei tiefen Energien dagegen gibt es wieder gebundene Zustände mit diskreten Energieniveaus.

Betrachten wir das Problem mit einem stückweise konstantem Potenzial. Außerhalb des Kastens,  $|x| > a$  setzen wir das Potenzial auf den Wert  $U = 0$ , und innerhalb ist das Potenzial konstant  $U(x) = -U_0$  für  $-a < x < a$ .



In jedem Abschnitt gilt die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Psi''(x) + \underbrace{U}_{\text{stückweise konstant}} \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (3.21)$$

In jedem Abschnitt können wir diese Differenzialgleichung mit einem Exponentialansatz lösen:

$$\Psi(x) = e^{ikx} \Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = (E - U) \Rightarrow \boxed{\hbar k = \sqrt{2m(E - U)}} \quad (3.22)$$

Die allgemeine Lösung ist eine Überlagerung der beiden speziellen Lösungen,

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (3.23)$$

Das gilt ganz allgemein für jedes Problem mit einem stückweise konstantem Potenzial. Wie verbindet man nun die einzelnen Lösungen, und wie findet man die unbekanntenen Koeffizienten  $A, B$  in jedem Stück? Nach der Schrödinger-Gleichung ist die zweite Ableitung der Wellenfunktion unstetig, aber die erste Ableitung und die Funktion selbst sind stetig. An jeder Sprungstelle  $a$  erhalten wir demnach zwei Gleichungen

$$\boxed{\Psi(a+) = \Psi(a-), \quad \Psi'(a+) = \Psi'(a-)} \quad (3.24)$$

### 3 Quantenmechanik

Zusammen mit der Normierung haben wir damit genug Gleichungen, um sämtliche Koeffizienten und daraus die gesamte Wellenfunktion zu berechnen.

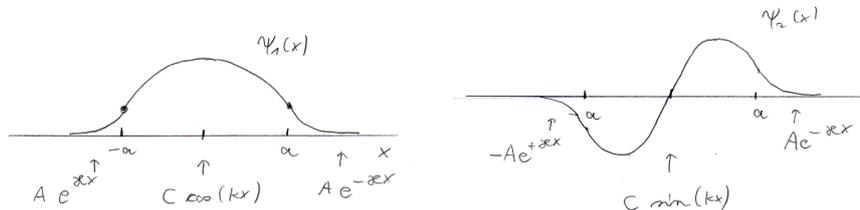
Für symmetrische Potentiale  $U(x) = U(-x)$  kann man zeigen, dass es nur symmetrische oder antisymmetrische Lösungen gibt. Deshalb bleiben im Topf nur die beiden Funktionen Sinus und Cosinus übrig:

$$\begin{aligned}\Psi(x) = \Psi(-x) &\Rightarrow B = A \Rightarrow \Psi(x) = C \cos(kx) \\ \Psi(x) = -\Psi(-x) &\Rightarrow B = -A \Rightarrow \Psi(x) = C \sin(kx)\end{aligned}$$

Betrachten wir nun den Fall  $-U_0 < E < 0$  der gebundenen Zustände. Innerhalb des Topfes gilt  $E - U > 0$ , nach Gleichung 3.22 ist der Wellenvektor  $k$  reell. Außerhalb des Topfes gilt dagegen  $E - U = E < 0$ , deshalb ist der Wellenvektor imaginär:

$$E < U \Rightarrow k = i\kappa \quad \text{mit} \quad \hbar\kappa = \sqrt{2m(U - E)} \Rightarrow \Psi(x) = A'e^{\kappa x} + B'e^{-\kappa x} \quad (3.25)$$

Allerdings muss die Wellenfunktion normierbar sein, deshalb bleibt auf jeder Seite nur der exponentiell abfallende Teil übrig,  $B' = 0$  für  $x < -a$  und  $A' = 0$  für  $x > a$ . Wegen der Symmetrie gilt  $|A'| = |B'|$ .



Obwohl das klassische Teilchen nicht genügend Energie besitzt, um aus dem Topf zu springen, kann das Quantenteilchen in die Wände des Topfes eindringen. Die Wellenfunktion fällt dort exponentiell ab mit einer Eindringtiefe

$$\lambda = \frac{1}{\kappa} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m|E|}} \quad (3.26)$$

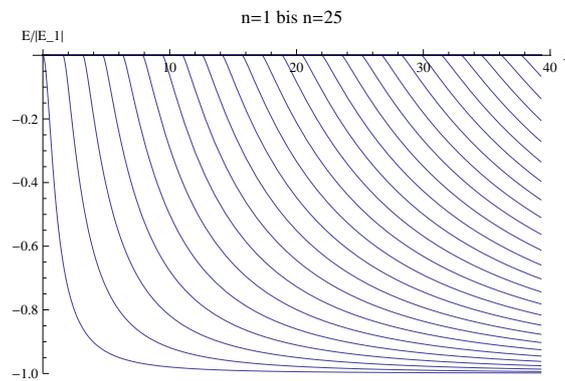
Die gesamte Wellenfunktion hat nun drei unbekannte Größen,  $C, A, E$ . Die beiden Anschlussbedingungen und die Normierung geben drei Gleichungen, um diese Größen zu

### 3 Quantenmechanik

berechnen. Das werden wir in den Übungen durchführen, wobei die Gleichungen nur numerisch oder grafisch gelöst werden können.

Wir erhalten folgende Ergebnisse:

- Es gibt immer einen gebundenen Grundzustand mit der Energie  $E_1$ .
- Es gibt nur einige wenige gebundene Zustände mit den diskreten Energien  $E_n$ .
- Mit wachsender Potenziertiefe  $U_0$  oder mit zunehmender Breite  $a$  kommen immer mehr Energieniveaus  $E_n$  hinzu.
- Die Wellenfunktion  $\Psi_n(x)$  hat  $n - 1$  Nullstellen (Knoten).
- $\Psi_n(x)$  ist symmetrisch für ungerade  $n$  und antisymmetrisch für gerade Werte von  $n$ .
- Das Teilchen kann in den klassisch verbotenen Bereich eindringen.
- Mit zunehmender Masse  $m$  nimmt die Eindringtiefe  $\lambda$  ab, im Grenzfall großer Massen verhält sich das Teilchen klassisch; es kann nicht in den verbotenen Bereich eindringen. Für Theoretiker geschieht dasselbe im Limes  $\hbar \rightarrow 0$ .



Die Abbildung zeigt die Energieniveaus  $E_n$  als Funktion von  $x = \sqrt{2mU_0} \frac{a}{\hbar}$ . Mit zunehmender Breite  $a$  oder für tiefere Töpfe  $U_0$  kommen immer mehr Energieniveaus hinzu. Die Grundzustandsenergie  $E_1$  nimmt damit ab, aber die skalierten Energiewerte  $E_n/|E_1|$  streben dem Grenzwert -1 zu.

### 3 Quantenmechanik

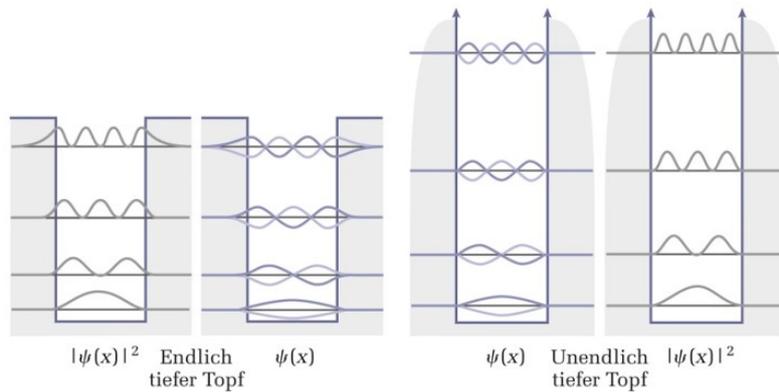


Abbildung 5.15: Wellenfunktionen, Wahrscheinlichkeitsdichten und Energien beim endlich und beim unendlich tiefen Potenzialtopf

Quelle: Moderne Physik, R. Harris, Pearson 2013

#### 3.3.2 Streuzustände

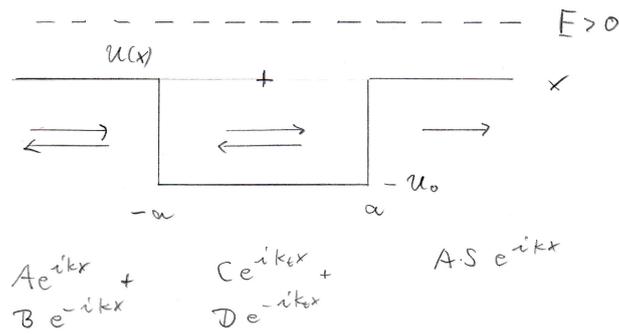
Bisher haben wir für  $E < 0$  gebundene Zustände erhalten. Welche Lösung  $\Psi(x)$  erhalten wir für positive Energien  $E > 0$ ? In diesem Fall gibt es in jedem der drei Bereiche eine Lösung  $\Psi(x) = e^{ikx}$  mit einer reellen Wellenzahl  $k$ , also eine Welle mit oszillierender Phase. Die Wellenfunktion erstreckt sich demnach ungedämpft beliebig weit.

Wir hatten vorher schon gesehen, dass die Wellenfunktion  $Ae^{ikx}$  einen Wahrscheinlichkeitsstrom besitzt, der einem einfallenden Teilchenstrom proportional zu  $|A|^2 \hbar k / m$  entspricht. Wir untersuchen nun den Fall, dass ein Teilchenstrom von links auf den Quantentopf trifft. In den drei Gebieten liefert die Schrödinger-Gleichung die Lösungen

$$\begin{aligned}
 x < -a : \quad \Psi(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad \hbar k = \sqrt{2mE} \\
 -a < x < a : \quad \Psi(x) &= Ce^{ik_t x} + De^{-ik_t x}, \quad \hbar k_t = \sqrt{2m(E + U_0)} \\
 x > a : \quad \Psi(x) &= ASe^{ikx}
 \end{aligned}$$

Anschaulich bedeutet das: von links kommt ein Teilchen zum Topf und wird dort reflektiert. Innerhalb des Topfes interferiert eine rechts- mit einer linkslaufenden Welle. Einem Bruchteil der Teilchen gelingt es, über den Topf zu entkommen.

### 3 Quantenmechanik



Die Wahrscheinlichkeit  $R$ , reflektiert zu werden, ist das Verhältnis des reflektierten zum einlaufenden Wahrscheinlichkeitsstrom. Die Transmissions-Wahrscheinlichkeit  $T$  ist das Verhältnis des auslaufenden zum einlaufenden Strom. Wir erhalten somit

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad T = |S|^2 \quad (3.27)$$

Wegen der Erhaltung der Teilchenzahl muss  $R + T = 1$  gelten.

Die Amplituden  $B, C, D, S$  erhalten wir aus den vier Anschlussbedingungen 3.24 bei  $x = \pm a$ . Die Energie  $E > 0$  kann für Streuzustände beliebig gewählt werden. Die Lösungen dieser vier Gleichungen finden Sie in den Lehrbüchern. Wir geben hier nur ein interessantes Resultat an: es gibt **Resonanzen**.

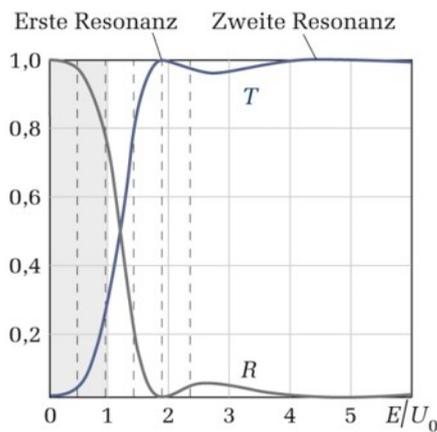


Abbildung 6.8: Reflexions- und Transmissionswahrscheinlichkeiten für eine Potenzialbarriere

Quelle: Moderne Physik, R. Harris, Pearson 2013

### 3 Quantenmechanik

Der Betrag der Streuamplitude  $S(E)$  nimmt für spezielle Energiewerte den Wert  $|S| = 1$  an. Wenn die Wellenlänge innerhalb des Kastens zu seiner Breite passt, laufen alle Teilchen über den Topf, ohne reflektiert zu werden. Durch Resonanzen in der Streuung kann man demnach Aussagen über Tiefe und Breite des Potentials gewinnen. Die Streuung von Elektronen, Neutronen, Protonen und Photonen an Atomen, Molekülen und Festkörpern ist eine wichtige experimentelle Messmethode.

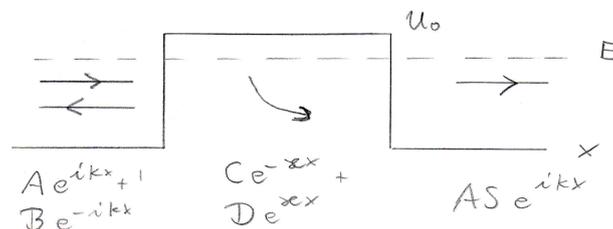
#### 3.3.3 Tunneleffekt

Was geschieht, wenn wir das Potenzial umdrehen? Anstelle eines Quantentopfes erhalten wir nun eine Energiebarriere. Offenbar gibt es keine gebundenen Zustände mehr, sondern einfallende Teilchen mit der Energie  $E > 0$  werden an der Barriere reflektiert. Wenn diese Energie kleiner als die Höhe der Barriere ist,  $E < U_0$ , so kann ein klassisches Teilchen diese Barriere nicht überwinden und wird immer reflektiert. Ein Quantenteilchen dagegen verhält sich anders, es kann die Energiebarriere mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit durchdringen.

Um das zu sehen, lösen wir wieder die Schrödinger-Gleichung 3.21 mit dem Exponentialansatz 3.22. Für  $E < U_0$  ist die Wellenzahl  $k = i\kappa$  imaginär, und wir erhalten eine Überlagerung von exponentiell abfallenden bzw. ansteigenden Lösungen,

$$\begin{aligned} x < -a : \quad \Psi(x) &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & \hbar k &= \sqrt{2mE} \\ -a < x < a : \quad \Psi(x) &= Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}, & \hbar \kappa &= \sqrt{2m(U_0 - E)} \\ x > a : \quad \Psi(x) &= AS e^{ikx} \end{aligned}$$

Von links fällt ein Teilchenstrom mit der Energie  $0 < E < U_0$  auf die Barriere und wird dort reflektiert. Es kann jedoch auch in die Barriere eindringen und läuft mit der Amplitude  $AS$  als ebene Welle nach rechts weiter. Die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten sind wie vorher durch die Betragsquadrate der Amplituden bestimmt, siehe Gleichung 3.27. Und die Amplituden bestimmen wir wieder aus den Anschlussbedingungen 3.24.



### 3 Quantenmechanik

Wir geben hier nur das Ergebnis für breite und hohe Barrieren an,  $\kappa a \gg 1$ :

$$|S|^2 \simeq \frac{4\kappa k}{k^2 + \kappa^2} e^{-4\kappa a}$$

Die Tunnelwahrscheinlichkeit nimmt exponentiell mit der Breite  $a$  ab. Das nutzt man beim Rastertunnelmikroskop aus: der Strom zwischen einer extrem feinen Metallspitze und der leitenden Oberfläche eines Festkörpers hängt empfindlich vom Abstand  $a$  ab, und somit kann man die elektronische Struktur auf der Oberfläche messen. Üblicherweise wird der Tunnelstrom durch Variation des Abstandes konstant gehalten, so dass die Rasterbilder ein Gebirge mit konstanter Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen liefern.

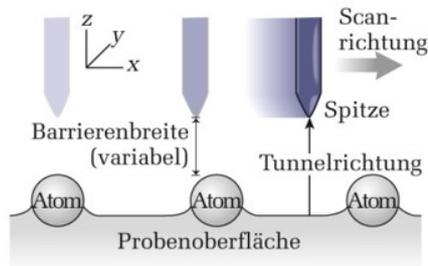


Abbildung 6.18: Schematische Darstellung der Arbeitsweise eines Rastertunnelmikroskops

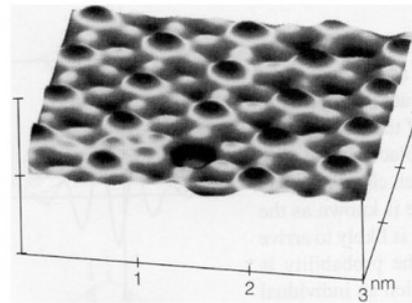


Abbildung 6.19: Ein fehlendes Atom, dargestellt von einem Rastertunnelmikroskop

Quelle: Moderne Physik, R. Harris, Pearson 2013

#### 3.3.4 Harmonischer Oszillator

In der klassischen Mechanik haben wir gesehen, dass ein schwingendes System durch eine Menge harmonischer Oszillatoren mit Frequenzen  $\omega_k$  beschrieben wird. Atome in Molekülen und Festkörper schwingen um ihre Ruhelage, und bei kleinen Auslenkungen genügt es, ihr Wechselwirkungspotenzial quadratisch zu nähern. Auch in der Elektrodynamik können elektromagnetische Wellen durch eine Menge harmonischer Oszillatoren beschrieben werden.

Wie beschreibt die Quantenmechanik solche Systeme? Zunächst transformieren wir das klassische System auf eine Menge harmonischer Oszillatoren, und danach wenden wir die Quantenmechanik auf jede einzelne Mode  $\omega = \omega_k$  an.

Die klassische Beschreibung einer einzelnen Mode, eines einzelnen Oszillators ist gegeben durch

### 3 Quantenmechanik

$$\begin{aligned} \text{Hamiltonfunktion} \quad \mathcal{H}(x, p) &= \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \\ \text{Eigenfrequenz} \quad \omega & \\ \text{Schwingung} \quad x(t) &= A \sin(\omega t + \delta) \\ \text{Energie} \quad E &= \frac{m\omega^2}{2}A^2 \end{aligned}$$

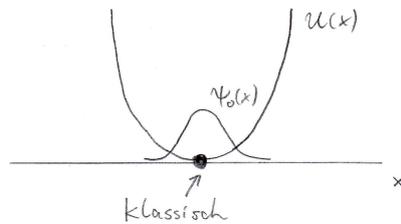
Die Energie des Oszillators ist proportional zum Quadrat der Amplitude der Schwingung, und jeder Wert der Energie ist erlaubt. Das ändert sich in der Quantenmechanik, denn dort kann die Energie nur diskrete Werte annehmen. Wir quantisieren dieses Problem, indem wir aus der Hamilton-Funktion den Hamilton-Operator gewinnen:

$$\text{Hamiltonoperator} \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \quad (3.28)$$

Damit werden wir die stationäre Schrödinger-Gleichung lösen, und wir erhalten folgende Werte der Energie

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.29)$$

Beim Quantenoszillator gibt es demnach nur diskrete Werte der Energie. Die niedrigste Energie eines klassischen Teilchens ist seine Ruhelage  $E = 0$ , während der Grundzustand der Quantenmechanik eine breite Aufenthaltswahrscheinlichkeit mit der Ruheenergie  $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$  besitzt.



Wie lösen wir die stationäre Schrödinger-Gleichung  $\hat{H}\Psi = E\Psi$ ? Dazu gibt es zwei Möglichkeiten. Entweder wir lösen die Differenzialgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi'' + \frac{m\omega^2}{2}x^2\Psi = E\Psi, \quad (3.30)$$

### 3 Quantenmechanik

oder wir wenden die Algebra des Orts- und Impulsoperators an,  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ . Hier entscheiden wir uns für den zweiten Weg. Überraschenderweise können wir die diskreten Energieniveaus allein mit der Algebra berechnen.

#### Skalieren

Unser Problem enthält die drei Parameter  $m, \omega, \hbar$ . In theoretischen Aufsätzen liest man manchmal: Wir setzen  $\hbar = m = \omega = 1$ . Das klingt sehr seltsam, denn wie kann man Naturkonstanten auf den Wert eins setzen?

Gemeint ist Folgendes: die Variablen werden so skaliert, dass die Gleichung möglichst wenige Parameter enthält. Hier schaffen wir es sogar, sämtliche Parameter zu beseitigen. Im Allgemeinen ist eine Skalierung sehr nützlich, denn erstens gelangt man damit zu einem physikalischen Verständnis der beteiligten Größenordnungen, und zweitens braucht man, beispielsweise bei numerischen Rechnungen, nur einen kleinen Parameterbereich zu untersuchen. Deshalb wollen wir hier diese Skalierung vorführen.

Der Trick ist es, die Größen  $x, E, p$  dimensionslos zu machen, indem wir sie durch entsprechende Größen teilen,

$$x' = \frac{x}{x_0}, \quad E' = \frac{E}{E_0}, \quad \hat{p}' = \frac{\hat{p}}{p_0}$$

Dann dividieren wir die Schrödinger-Gleichung durch  $E_0$ :

$$\frac{1}{E_0} \left[ -\frac{\hbar^2}{2mx_0^2} \frac{d^2}{d\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} + \frac{m\omega^2 x_0^2}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2 \right] \Psi = \frac{E}{E_0} \Psi$$

Damit erhalten wir eine Schrödinger-Gleichung für die skalierten Größen

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2mx_0^2 E_0} \frac{d^2}{dx'^2} + \frac{m\omega^2 x_0^2}{2E_0} x'^2 \right] \Psi(x') = E' \Psi(x')$$

Nun wählen wir die beiden Parameter  $x_0, E_0$  so, dass die Vorfaktoren in der Gleichung den Wert  $\frac{1}{2}$  erhalten,

$$E_0 = \hbar\omega, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad p_0 = \sqrt{\hbar m\omega} \quad (3.31)$$

### 3 Quantenmechanik

Schließlich erhalten wir eine stationäre Schrödinger-Gleichung, die keine Parameter mehr enthält:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2}, \quad [\hat{x}, \hat{p}] = i, \quad \hat{p} = \frac{1}{i} \frac{d}{dx}, \quad \hat{H}\Psi = E\Psi \quad (3.32)$$

Die Lösung dieser Gleichung gibt uns sofort die Lösung für die drei Parameter  $m, \omega, \hbar$ . Wir wollen diese Gleichung algebraisch lösen. Dazu wählen wir die folgende Notation, die von Dirac eingeführt wurde, und die es uns später erlauben wird, auch kompliziertere Probleme zu formulieren und zu berechnen.

$$|n\rangle = \Psi_n(x), \quad |\Psi\rangle = \Psi(x), \quad \langle \Phi | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Phi^*(x) \Psi(x), \quad \hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

#### Operatoralgebra

Um die Schrödinger-Gleichung zu lösen, ersetzen wir den Hamilton-Operator durch einen einzigen Operator. Wenn Ort und Impuls reelle Zahlen wären, so könnten wir die Summe der beiden Quadrate schreiben als  $x^2 + p^2 = (x - ip)(x + ip)$ . Weil die beiden Operatoren aber nicht vertauschen, erhalten wir eine zusätzliche Konstante:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{p}) \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p}) = \frac{1}{2}(\hat{x}^2 + \hat{p}^2 + \underbrace{i\hat{x}\hat{p} - i\hat{p}\hat{x}}_{i[\hat{x}, \hat{p}] = -1}) = \frac{\hat{x}^2}{2} + \frac{\hat{p}^2}{2} - \frac{1}{2} \quad (3.33)$$

Damit können wir im Hamilton-Operator die beiden Quadrate durch ein Produkt von zwei Operatoren ersetzen:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} & (3.34) \\ \hat{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{p}) \\ \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p}) \end{aligned}$$

Wir suchen demnach die Eigenwerte  $n$  und Eigenzustände  $|n\rangle$  des Operators  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ ,

### 3 Quantenmechanik

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle$$

Um den Eigenwert  $n$  zu bestimmen, benötigen wir die folgenden sechs Aussagen:

A1:  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$

A2:  $\hat{a} |n\rangle \propto |n-1\rangle$

A3:  $\hat{a}^\dagger |n\rangle \propto |n+1\rangle$

A4:  $\hat{a}^\dagger$  ist der zu  $\hat{a}$  adjungierte Operator,  $\langle \Psi | \hat{a}^\dagger \Phi \rangle = \langle \hat{a} \Psi | \Phi \rangle$

A5:  $n \geq 0$

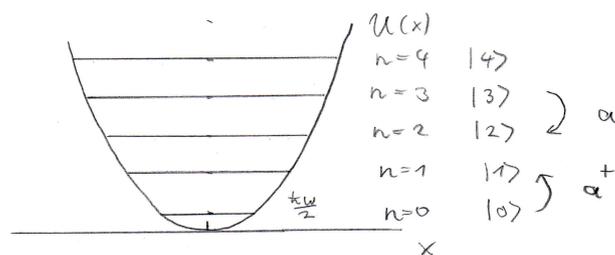
A6:  $n$  ist eine natürliche Zahl  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Einige dieser Aussagen wollen wir in den Übungen beweisen. Wenn wir schließlich A6 bewiesen haben, folgt sofort, dieses Mal mit Dimensionen,

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right), \quad E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.35)$$

Aus den Aussagen A2/A3 und der Normierung der Zustände,  $\langle n | n \rangle = 1$  folgt

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad \hat{a} |0\rangle = 0 \quad (3.36)$$



Der Operator  $\hat{a}$  erzeugt aus dem Zustand  $|n\rangle$  den Zustand  $|n-1\rangle$ . Er vernichtet deshalb ein Energiequant, ein Photon oder ein Phonon, deshalb wird er **Vernichter** genannt.

### 3 Quantenmechanik

Wenden wir diesen Operator auf den Grundzustand  $|0\rangle$  an, so erhalten wir das Nullelement 0 im Hilbertraum. Beachte:  $|0\rangle$  ist der Grundzustand, der Zustand mit der Ruheenergie  $E_0 = \hbar\omega/2$ , wogegen 0 die Nullfunktion ist, die physikalisch keine Bedeutung hat. Der Operator  $\hat{a}^\dagger$  erzeugt ein Energiequant, deshalb wird er **Erzeuger** genannt. Das Produkt  $\hat{a}^\dagger\hat{a}$  vernichtet erst und erzeugt dann wieder ein Quant, dabei zählt es die Anzahl der Phononen oder Photonen und gibt das Ergebnis als Streckung des Zustandes, als Eigenwert aus.

- $\hat{a}^\dagger$  : Erzeuger
- $\hat{a}$ : Vernichter
- $n$ : Anzahl der Energiequanten (Photonen, Phononen)
- $\frac{\hbar\omega}{2}$ : Ruheenergie

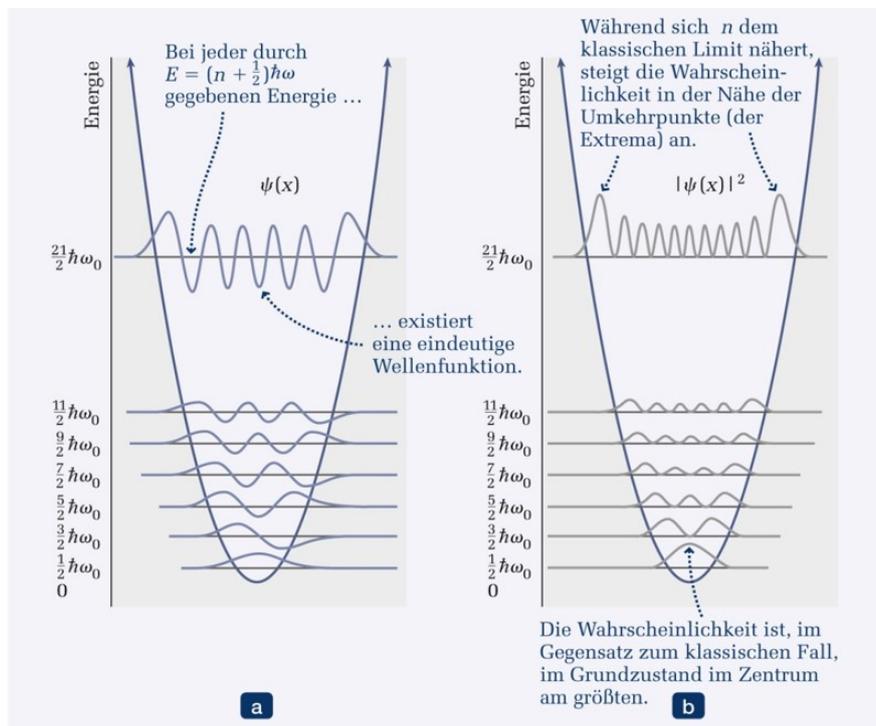


Abbildung 5.18: Wellenfunktionen, Wahrscheinlichkeitsdichten und Energien eines harmonischen Oszillators

Abbildung 3.1: Quelle: Moderne Physik, R. Harris, Pearson 2013

### Wellenfunktion

Wir haben bisher die Energiewerte  $E_n$  des harmonischen Oszillators mithilfe der Operatoralgebra berechnet. Der Zustand  $|n\rangle$  bzw. die Wellenfunktion  $\Psi_n(x)$  blieben dabei abstrakt. Wie können wir die Wellenfunktion im Ortsraum berechnen? Jeder Zustand  $|n\rangle$  kann nach Gl. 3.36 aus dem Grundzustand  $|0\rangle$  erzeugt werden,

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$$

Wir benötigen deshalb zunächst die Grundzustandswellenfunktion  $|0\rangle = \Psi_0(x)$ . Die erhalten wir aber aus der Bedingung  $\hat{a}|0\rangle = 0$ , denn mit  $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + \frac{d}{dx})$  ist diese Bedingung die folgende Differenzialgleichung, die sich leicht lösen lässt

$$(x + \frac{d}{dx})\Psi_0 = 0 \Rightarrow \frac{\Psi_0'}{\Psi_0} = -x \Rightarrow \ln \Psi_0 = -\frac{x^2}{2} + C \Rightarrow \boxed{\Psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{x^2}{2}}} \quad (3.37)$$

Der Grundzustand  $\Psi_0(x)$  ist also eine Gaußglocke. Die angeregten Zustände  $\Psi_n(x)$  erhalten wir, indem wir den Operator  $\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - \frac{d}{dx})$   $n$ -mal auf den Grundzustand  $\Psi_0$  anwenden. Sowohl die  $n$ -fache Multiplikation mit  $x$  als auch die  $n$ -te Ableitung der Gaußglocke geben eine Potenz  $x^n$ . Insgesamt erhalten wir durch diesen Operator ein Polynom  $n$ -ten Grades, das den Namen **Hermite-Polynom**  $H_n$  trägt.

$$H_0 = 1, \quad H_1 = 2x, \quad H_2 = 4x^2 - 2, \dots$$

Insgesamt erhalten wir, dieses Mal mit Dimensionen, das Ergebnis

$$\boxed{\Psi_n(x) = (2^n n! \sqrt{\pi} x_0)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{x}{x_0})^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)} \quad (3.38)$$

Analog zum Kastenpotenzial gilt hier ebenfalls:

- $\Psi_n(x)$  hat  $n$  Nullstellen.
- $\Psi_n(x) = \Psi_n(-x)$  für gerade Werte von  $n$ .
- $\Psi_n(x) = -\Psi_n(-x)$  für ungerade Werte von  $n$ .

Wie bei jedem Quantenteilchen können Ort und Impuls nicht gleichzeitig scharf gemessen werden. Für den harmonischen Oszillator werden wir in den Übungen folgende Unschärferelation herleiten

### 3 Quantenmechanik

$$\boxed{\Delta x \Delta p = \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right)} \quad (3.39)$$

Minimale Unschärfe gibt es deshalb im Grundzustand.

#### Quantenoptik

Nicht nur der Grundzustand hat eine minimale Unschärfe, sondern es gibt auch Wellenpakete, also zeitabhängige Zustände, die zu jeder Zeit die minimal mögliche Unschärfe behalten,

$$\Delta x(t) \Delta p(t) = \frac{\hbar}{2}$$

Diese Zustände sind eine Überlagerung sämtlicher stationärer Zustände, sie sind Eigenzustände des Vernichters  $\hat{a}$ , und sie tragen den Namen *Glauber-* oder *kohärente* Zustände. Der Photonen-Zustand im Laser wird durch diese Zustände beschrieben. Für jede komplexe Zahl  $a$  sind sie definiert als

$$|a\rangle = e^{-\frac{|a|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (3.40)$$

Die Wahrscheinlichkeit, genau  $n$  Photonen zu messen ist damit die Poisson-Verteilung

$$P(n) = |\langle a|n\rangle|^2 = \frac{|a|^{2n}}{n!} e^{-|a|^2}$$

### 3.4 Mathematische Struktur der Quantenmechanik

Bisher haben wir versucht, aus einer Differenzialgleichung, der Schrödinger-Gleichung, physikalische Aussagen herzuleiten. Für den harmonischen Oszillator ist es uns aber auch gelungen, mithilfe der Operatoralgebra Energieniveaus zu berechnen. Deshalb ist es nützlich, die Quantenmechanik etwas abstrakter zu formulieren.

In diesem Kapitel wollen wir uns die mathematische Struktur der Quantenmechanik etwas genauer ansehen. Präzise mathematische Definitionen und Sätze können wir hier nicht behandeln, wir verweisen auf die Lehrbücher der Funktionalanalysis.

### 3.4.1 Hilbertraum

#### Vektorraum

Der Zustand eines Teilchens wird durch eine Wellenfunktion  $\psi(\vec{x})$  beschrieben. Wir verwenden die Dirac-Notation  $\Psi(\vec{x}) \leftrightarrow |\Psi\rangle$ . Wir können Wellenfunktionen addieren und mit einer komplexen Zahl multiplizieren. Deshalb ist die Menge der Zustände ein Vektorraum über den komplexen Zahlen  $\mathcal{C}$ , der **Hilbertraum**  $\mathcal{H}$ .

#### Skalarprodukt

Im Hilbertraum gibt es ein Skalar-Produkt. Das ist eine Abbildung, die jeweils zwei Zuständen eine komplexe Zahl zuordnet:

$$\begin{aligned} \text{Abbildung: } \mathcal{H} \times \mathcal{H} &\rightarrow \mathcal{C} \\ |\Psi\rangle, |\Phi\rangle &\mapsto \langle\Psi|\Phi\rangle \end{aligned}$$

$$\text{Im Ortsraum: } \langle\Psi|\Phi\rangle = \int d^3x \Psi^*(\vec{x})\Phi(\vec{x})$$

Das Skalarprodukt ist additiv in jedem der beiden Argumente, und für jede komplexe Zahl  $c$  gilt:

$$\langle c\Psi|\Phi\rangle = c^*\langle\Psi|\Phi\rangle, \quad \langle\Psi|c\Phi\rangle = c\langle\Psi|\Phi\rangle, \quad \langle\Psi|\Phi\rangle = \langle\Phi|\Psi\rangle^*$$

Wie im  $\mathcal{R}^3$  sagen wir: zwei Zustände stehen senkrecht aufeinander, sie sind orthogonal zueinander, wenn ihr Skalarprodukt verschwindet,  $\langle\Psi|\Phi\rangle = 0$ .

#### Norm

Das Skalarprodukt definiert eine Norm im Hilbertraum,

$$\|\Psi\| = \sqrt{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \sqrt{\int d^3x |\Psi(\vec{x})|^2}$$

Die Elemente eines Hilbertraumes, die Funktionen  $\Psi(\vec{x})$ , haben demnach eine Länge. Physikalische Zustände befinden sich auf der Oberfläche der Einheitskugel  $\|\Psi\| = 1$ .

### 3 Quantenmechanik

#### Basis

Der Hilbertraum besitzt eine abzählbare Basis, ein vollständiges orthonormales System

$$\{|n\rangle, n \in \mathcal{N}\}, \quad \langle n|m\rangle = 0, \quad \|n\| = 1$$

D.h., jeder Vektor  $|\Psi\rangle$  kann nach dieser Basis entwickelt werden,

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

Wenn wir diese Gleichung mit  $\langle m|$  multiplizieren, so erhalten wir wegen der Orthonormalität

$$\langle m|\Psi\rangle = \sum_n c_n \underbrace{\langle m|n\rangle}_{\delta_{nm}} = c_m$$

Hierbei haben  $\langle m|$  wir als eigenes mathematisches Objekt aufgefasst,  $\langle m|$  ist eine Abbildung, die jedem Zustand eine komplexe Zahl zuordnet, ein so genanntes **Funktional**.

#### Projektor

Damit können wir die Entwicklung eines Zustandes folgendermaßen schreiben,

$$|\Psi\rangle = \sum_n \langle n|\Psi\rangle |n\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\Psi\rangle = \left( \sum_n |n\rangle \langle n| \right) |\Psi\rangle$$

Das liefert uns die Vollständigkeit der Basis in einer Operatorform

$$\boxed{\sum_n |n\rangle \langle n| = 1} \quad (3.41)$$

Den Operator  $|n\rangle \langle n|$  nennt man auch **Projektor**, er projiziert den Zustand  $|\Psi\rangle$  auf den Zustand  $|n\rangle$ .

#### 3.4.2 Operatoren

Operatoren sind lineare Abbildungen des Hilbertraums in sich selbst:

$$\hat{A}|\Psi\rangle = |\Phi\rangle \in \mathcal{H}$$

### 3 Quantenmechanik

Linear bedeutet, dass sie auf jeden Vektor einer Überlagerung einzeln angewendet werden können:

$$\hat{A}(c_1|\Psi\rangle + c_2|\Phi\rangle) = c_1\hat{A}|\Psi\rangle + c_2\hat{A}|\Phi\rangle$$

#### Operator-Algebra

Operatoren können addiert und multipliziert werden, sie bilden eine Algebra,

$$(\hat{A} + \hat{B})|\Psi\rangle = \hat{A}|\Psi\rangle + \hat{B}|\Psi\rangle, \quad (\hat{A}\hat{B})|\Psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\Psi\rangle)$$

Funktionen  $f(\hat{A})$  eines Operators können damit durch die Taylorreihe der Funktion  $f(x)$  definiert werden.

#### Adjungierte Operatoren

Zu einem Operator  $\hat{A}$  wird sein adjungierter Operator  $\hat{A}^\dagger$  durch das Skalarprodukt definiert. Es gilt für sämtliche Vektoren des Hilbertraums

$$\langle\Psi|(\hat{A}|\Phi\rangle)\rangle = \langle(\hat{A}^\dagger|\Psi\rangle)|\Phi\rangle \quad \text{oder kurz} \quad \langle\Psi|\hat{A}\Phi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\Psi|\Phi\rangle$$

Beispiel: Der Erzeuger  $\hat{a}^\dagger = \hat{x} - i\hat{p}$  ist adjungiert zum Vernichter  $\hat{a} = \hat{x} + i\hat{p}$ .

#### Selbstadjungierte Operatoren

Ein Operator heißt selbstadjungiert (oder hermitesch), wenn er mit seinem adjungierten Operator identisch ist,

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \quad \Rightarrow \quad \langle\Psi|\hat{A}\Phi\rangle = \langle\hat{A}\Psi|\Phi\rangle$$

D.h. ein selbstadjungierter Operator kann im Skalarprodukt vertauscht werden.

Ein selbstadjungierter Operator hat reelle Eigenwerte und orthogonale Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten.

Die Operatoren von Ort, Impuls, Energie, Drehimpuls, Spin, ... sind selbstadjungiert.

### 3.4.3 Matrizenmechanik

Bisher haben wir Operatoren als Ableitungen und Produkte im Ortsraum kennen gelernt, beispielsweise  $p = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ . Es gibt jedoch eine alternative Beschreibung durch Matrizen. Wieso kann eine Ableitung als Matrix geschrieben werden?

Dazu betrachten wir eine abzählbare Basis  $\{|n\rangle\}$  des Hilbertraums  $\mathcal{H}$ . Jeder physikalische Zustand kann nach dieser Basis entwickelt werden,

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

Der unendlich dimensionale Vektor  $\underline{c} = (c_1, c_2, c_3, \dots)$  der Entwicklungskoeffizienten ist eine äquivalente Beschreibung zur Wellenfunktion  $\Psi(\vec{x})$ .

Wie wirkt ein Operator  $\hat{A}$  auf diesen Vektor  $\underline{c}$ ? Dazu wenden wir zweimal die Vollständigkeitsrelation 3.41 an:

$$\begin{aligned} \hat{A}|\Psi\rangle &= \sum_m |m\rangle \langle m| \hat{A} \sum_n |n\rangle \langle n| \Psi\rangle = \sum_{m,n} |m\rangle \underbrace{\langle m| \hat{A} |n\rangle}_{A_{m,n}} \underbrace{\langle n| \Psi\rangle}_{c_n} \\ &= \sum_m d_m |m\rangle = \sum_{m,n} A_{m,n} c_n |m\rangle \Rightarrow \underline{d} = \mathbf{A} \cdot \underline{c} \end{aligned}$$

Bezüglich einer Basis kann der Operator also als eine unendlich dimensionale Matrix  $\mathbf{A}$  dargestellt werden,

$$\boxed{\hat{A} \leftrightarrow A_{n,m} = \langle n | \hat{A} | m \rangle} \quad (3.42)$$

Die stationäre und die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung lauten damit in Matrixform

$$\sum_n H_{m,n} c_n = E c_m, \quad i\hbar \dot{c}_m(t) = \sum_n H_{m,n} c_n(t)$$

Die Matrix des adjungierten Operators ist die transponierte, komplex konjugierte Matrix

$$A_{m,n}^\dagger = A_{n,m}^*$$

Die folgende Matrix mit reellen Zahlen  $a, c$  ist demnach selbstadjungiert:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ b^* & c \end{pmatrix}$$

### 3.4.4 Messergebnisse

Wozu benötigen wir selbstadjungierte Operatoren? In der Quantenmechanik wird jede Messung  $A$  durch einen selbstadjungierten Operator  $\hat{A}$  beschrieben, und die Messwerte sind dessen Eigenwerte.

$$\begin{aligned} \text{Messung} &\leftrightarrow \hat{A} \\ \text{Messwerte} &\leftrightarrow \hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle \end{aligned}$$

Die Menge der Eigenvektoren ist eine Basis des Hilbertraums, also kann jeder Zustand nach dieser Basis entwickelt werden,

$$|\Psi\rangle = \underbrace{\sum_n |a_n\rangle \langle a_n|}_{=1} \Psi = \sum_n c_n |a_n\rangle$$

Wenn am selben Zustand  $|\Psi\rangle$  die Größe  $A$  gemessen wird, erhält man eine Verteilung ihrer Messergebnisse  $a_n$ ,

$$\boxed{P(a_n) = |\langle \Psi | a_n \rangle|^2} \quad (3.43)$$

Den Mittelwert dieser Verteilung können wir berechnen, indem wir wieder zweimal die Vollständigkeitsrelation 3.41 einsetzen:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle &= \langle \Psi | \sum_n |a_n\rangle \langle a_n| \hat{A} \sum_k |a_k\rangle \langle a_k| \Psi \rangle = \sum_{nk} \langle \Psi | a_n \rangle \langle a_n | \underbrace{\hat{A} | a_k \rangle}_{a_k | a_k \rangle} \langle a_k | \Psi \rangle \\ &= \sum_{nk} a_k \langle \Psi | a_n \rangle \underbrace{\langle a_n | a_k \rangle}_{\delta_{nk}} \langle a_k | \Psi \rangle = \sum_n a_n \langle \Psi | a_n \rangle \underbrace{\langle a_n | \Psi \rangle}_{\langle \Psi | a_n \rangle^*} = \sum_n a_n |\langle \Psi | a_n \rangle|^2 \\ \Rightarrow \quad &\boxed{\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_n a_n |\langle \Psi | a_n \rangle|^2 = \sum_n a_n P(a_n)} \end{aligned}$$

Mit der Wahrscheinlichkeit  $P(a_n)$ , den Wert  $a_n$  zu messen, wird Mittelwert somit wie in der klassischen Statistik berechnet.

Die Eigenzustände von  $\hat{A}$  liefern nur einen Messwert  $a_n$ ,

$$\langle a_n | \hat{A} | a_n \rangle = a_n, \quad \Delta \hat{A} = 0$$

### Energieerhaltung

Wenn wir die Eigenzustände des Hamilton-Operator als Basis verwenden, so können wir damit die zeitliche Entwicklung jedes Zustandes beschreiben, siehe 3.15

$$\Psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \Psi_n(\vec{x})$$

Damit erhalten wir

$$\langle \hat{H} \rangle_t = \langle \Psi(t) | \hat{H} | \Psi(t) \rangle = \sum_n E_n |c_n|^2 = \langle \hat{H} \rangle_{t=0}$$

- Der Mittelwert der Energie ist zeitlich konstant.
- Die Wahrscheinlichkeit, die Energie  $E_n$  zu messen, die Besetzungswahrscheinlichkeit des Energieniveaus  $|n\rangle$ , ist zeitlich konstant.

Obwohl wir im Allgemeinen bei jeder Messung einen unterschiedlichen Wert der Energie erhalten können, ist der Mittelwert der Energie eine Erhaltungsgröße. Energieerhaltung gilt nur für zeitlich konstante Hamilton-Operatoren. Durch Laser oder rotierende Magnetfelder kann die Besetzungswahrscheinlichkeit der Niveaus geändert werden.

#### 3.4.5 Ehrenfest-Gleichungen

Bisher haben wir die Schrödinger-Gleichung verwendet, um die zeitliche Entwicklung eines quantenmechanischen Zustandes zu beschreiben. Manchmal genügt es jedoch auch, die zeitliche Änderung von Mittelwerten einer Messung zu berechnen.

In den Übungen werden wir aus der Schrödinger-Gleichung die Bewegungsgleichung für den Mittelwert eines Operators herleiten, die **Ehrenfest-Gleichung**

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle} \quad (3.44)$$

Mit  $\hat{A} = \hat{H}$  und zeitunabhängigem Hamilton-Operator  $\hat{H}$  folgt der Energiesatz  $\frac{d}{dt} \langle \hat{H} \rangle = 0$ .

Zusätzlich werden wir für ein Teilchen in einem Potenzial beweisen:

### 3 Quantenmechanik

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}) \Rightarrow \frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle = \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m}, \quad \frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = -\left\langle\frac{\partial U}{\partial x}\right\rangle = \langle F(\hat{x})\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{m\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{x}\rangle = \langle F(\hat{x})\rangle}$$

Hier sehen wir wieder die Struktur der klassischen Mechanik, Kraft gleich Masse mal Beschleunigung. Allerdings gilt diese Gleichung nur für den Mittelwert des Ortes und für den Mittelwert der Kraft. Ohne Quantenfluktuationen, wenn die Kraft also nur vom Mittelwert des Ortes abhängt, würde man tatsächlich die Newton-Gleichung erhalten.

Beim harmonischen Oszillator gilt  $F(x) = -Dx$ , und somit erhalten wir die klassische Bewegungsgleichung

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{x}\rangle = -D\langle\hat{x}\rangle$$

Die Gleichung gilt allerdings nur für den Mittelwert des Ortes, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens kann sich immer noch recht kompliziert bewegen.

#### 3.4.6 Gemeinsame Eigenbasis

Wir wollen nun am selben Zustand zwei Messungen A und B durchführen. Gibt es Zustände, bei denen die beiden Messungen immer denselben jeweiligen Messwert liefern, bei denen also A und B gleichzeitig scharf gemessen werden können?

Wir wissen schon, dass ein Eigenzustand  $|a_n\rangle$  zu  $\hat{A}$  immer den Messwert  $a_n$  liefert. Die vorige Frage lautet somit: gibt es gemeinsame Eigenzustände zu  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$ ?

Im Allgemeinen gibt es jeweils eine eigene Eigenbasis für die beiden Operatoren,

$$\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle, \quad \hat{B}|b_n\rangle = b_n|b_n\rangle$$

Wenn wir die Größe B am Eigenzustand von A messen, so erhalten wir eine Verteilung der Messwerte  $b_n$  mit den Wahrscheinlichkeiten  $|\langle b_n|a_n\rangle|^2$ . Die Eigenzustände von  $\hat{A}$  bilden eine Basis des Hilbertraumes, und diejenigen von  $\hat{B}$  eine andere Basis. Unter welchen Bedingungen gibt es eine gemeinsame Eigenbasis?

Es gilt der folgende Satz:

$$\boxed{[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Leftrightarrow \text{Es gibt eine Basis } |n\rangle \text{ mit } \hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle, \quad \hat{B}|n\rangle = b_n|n\rangle} \quad (3.45)$$

Am Zustand  $|n\rangle$  werden also nur die beiden Werte  $a_n, b_n$  scharf gemessen, ohne Fluktuationen. Es gibt somit eine gemeinsame Eigenbasis der beiden Operatoren, wenn sie miteinander vertauschen.

### 3 Quantenmechanik

Bisher haben wir noch gar keine Operatoren kennengelernt, die eine gemeinsame Eigenbasis haben. Denn für den Ort und den Impuls gilt  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ , und damit gibt es keine Zustände, bei denen Ort und Impuls gleichzeitig scharf gemessen werden können. Für jeden Zustand gilt die Heisenbergsche Unschärferelation  $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ .

Der vorige Satz wird aber für die Eigenschaften des Drehimpulses und der atomaren Elektronen sehr wichtig sein.

## 3.5 Drehimpuls

Energie, Impuls und Drehimpuls sind die wichtigsten physikalischen Größen der klassischen Mechanik, denn sie sind konstant, wenn das System invariant gegenüber zeitlicher und räumlicher Verschiebung und Rotation ist. Das Gleiche gilt in der Quantenmechanik für die Mittelwerte der jeweiligen Operatoren. Bisher haben wir nur die Energie und den Impuls kennengelernt; wie sieht der Drehimpuls  $\vec{L}$  in der Quantenmechanik aus?

Das Korrespondenzprinzip sagt uns schon:

$$\begin{aligned} \text{Klassisch: } \quad \vec{L}(t) &= \vec{r}(t) \times \vec{p}(t) = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} \\ \text{Quantenmechanisch: } \quad \hat{L} &= \hat{r} \times \hat{p} = \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.46)$$

Der quantenmechanische Drehimpuls ist ein Vektoroperator, seine drei Komponenten sind Operatoren. Beispielsweise erhalten wir

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i} \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

Hier sind einige physikalische Probleme, bei denen der Drehimpuls eine wichtige Rolle spielt:

- Erhaltung des Gesamtdrehimpulses (Atomelektron plus Photon)
- Elektron im Zentralpotenzial (Wasserstoff-Elektron)
- Klassifikation von elektronischen Zuständen in Atomen und Molekülen
- Magnetisches Moment eines Elektrons oder eines Protons im Magnetfeld,  
 $\hat{H} = \frac{e}{2m} \vec{B} \cdot \hat{L}$

### 3 Quantenmechanik

- Rotation eines starren Moleküls,  $\hat{H} = \frac{\hat{L}_x^2}{2I_x} + \frac{\hat{L}_y^2}{2I_y} + \frac{\hat{L}_z^2}{2I_z}$
- Der Spin ist ein Drehimpuls
- Diese Summe mehrere Drehimpulse ist ein Drehimpuls

#### 3.5.1 Eigenschaften des Drehimpulses

Bei einem klassischen Drehimpuls können wir seine drei Komponenten  $L_x, L_y, L_z$  und das Quadrat seiner Länge  $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$  gleichzeitig scharf messen, und die vier Größen können sämtliche Werte annehmen. In der Quantenmechanik dagegen sind die Messwerte von  $\hat{L}^2, \hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$  quantisiert, und die drei Komponenten können nicht gleichzeitig scharf gemessen werden.

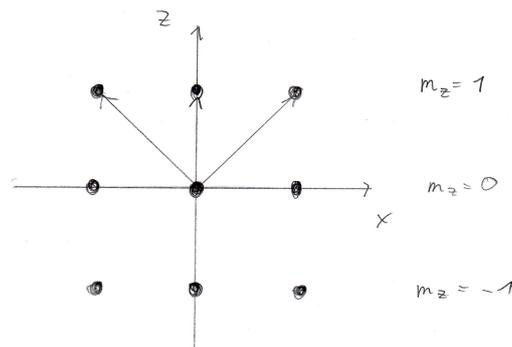
Die Messwerte der vier Operatoren sind die entsprechenden Eigenwerte:

$$\text{Eigenwerte von } \hat{L}^2 : \quad \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

$$\text{Eigenwerte von } \hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z : \quad \hbar m, \quad m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

Der Bahndrehimpuls besitzt ganzzahlige Werte von  $l$ , während ein einzelner Spin die Quantenzahl  $l = \frac{1}{2}$  hat. Mehrere Spins können sich jedoch auch zu ganzzahligen Quantenzahlen  $l$  addieren.

Diese Ergebnisse wollen wir mithilfe der Operatoralgebra herleiten. Wir können auch versuchen, dies anschaulich zu verstehen. Die folgende Skizze zeigt die möglichen Messwerte von  $L_z, L_x$  für  $l = 1$ .



Anschaulich gesprochen, ist die Länge des Drehimpulses  $\vec{L}$  gleich  $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ , und seine Projektion auf die  $z$ -Achse ist  $\hbar m$ . Der Drehimpuls kann sich also nicht vollständig zur

### 3 Quantenmechanik

$z$ -Achse ausrichten, selbst der Zustand  $l = m$  hat Fluktuationen in der  $(x, y)$ -Ebene. Üblicherweise zeichnet man diese Zustände durch einen Kegel um die  $z$ -Achse, aber Vorsicht: jedes klassische Bild ist irgendwo falsch!

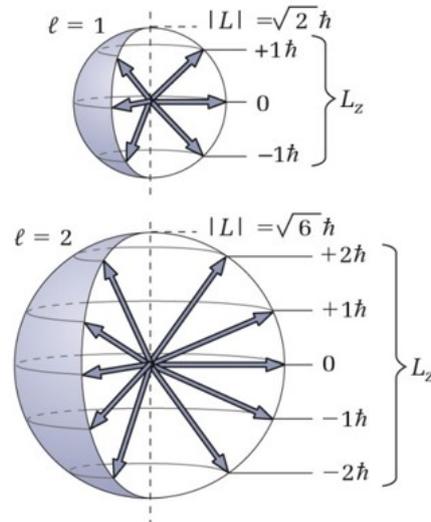


Abbildung 7.11: Drehimpulsquantisierung für  $\ell = 1$  und  $\ell = 2$

Quelle: Moderne Physik, R. Harris, Pearson 2013

### 3.5.2 Operatoralgebra

Wie findet man die Eigenwerte und Eigenzustände der Operatoren  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$ ,  $\hat{L}_z$ , und für welche Operatoren gibt es gemeinsame Eigenzustände?

Wir können versuchen, diese Fragen mithilfe der Differentialgleichungen zu lösen; beispielsweise für

$$\hat{L}_y |\Psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \Psi(x, y, z) = \hbar m \Psi(x, y, z)$$

Jedoch geht es auch einfacher: wie beim harmonischen Oszillator wollen wir die Eigenwerte und die Eigenbasis mithilfe der Algebra berechnen. Dazu verwenden wir ausschließlich den Kommutator von Ort und Impuls,  $[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}$ .

### 3 Quantenmechanik

Damit können wir zeigen:

$$\boxed{[L_x, L_y] = i\hbar L_z} \quad \text{und zyklisch für } x, y, z \quad (3.47)$$

$$\boxed{[L^2, L_z] = 0} \quad \text{und ebenfalls für } x, y$$

Hier und im Folgenden werden die „Hüte“ für die Operatoren weggelassen.

Die erste Relation bedeutet, dass wir die drei Komponenten des Drehimpulses nicht gleichzeitig scharf messen können. Die zweite Relation sagt, dass es eine gemeinsame Eigenbasis zu den beiden Operatoren gibt.

Als Basis des Hilbertraumes können die Eigenzustände  $|lm\rangle$  von  $L^2$  und  $L_z$  gewählt werden.

Dabei bezeichnet das Symbol  $|lm\rangle$  einen einzelnen Zustand mit zwei Quantenzahlen, die die Eigenwerte der beiden Operatoren nummerieren:

$$L^2 |lm\rangle = \hbar^2 l(l+1) |lm\rangle, \quad l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \quad (3.48)$$

$$L_z |lm\rangle = \hbar m |lm\rangle, \quad -l \leq m \leq l$$

Wie beweisen wir diese Aussage über die Diskretheit und Beschränktheit der Eigenwerte? Das können wir analog zum harmonischen Oszillator beweisen, indem wir Erzeuger und Vernichter definieren:

$$L_+ = L_x + iL_y, \quad L_- = L_x - iL_y$$

Damit kann man zeigen:

$$L_+ |l, m\rangle = \hbar \sqrt{(l-m)(l+m+1)} |l, m+1\rangle, \quad L_- |l, m\rangle = \hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} |l, m-1\rangle$$

Diese beiden Operatoren erzeugen und vernichten demnach eine magnetische Quantenzahl  $m$ . Analog zum harmonischen Oszillator sind sie Leiteroperatoren, die durch sämtliche Zustände  $|lm\rangle$  für feste Quantenzahl  $l$  führen. Und ähnlich wie beim Oszillator kann man schließen, dass die Werte von  $m$  in ganzzahligen Schritten von  $-l$  bis  $l$  laufen, und dass die Werte von  $l$  nur ein Vielfaches von  $1/2$  sein können.

Daraus folgt: Für jeden Wert  $l$  gibt es  $2l + 1$  viele  $m$ -Zustände.

### 3.5.3 Mittelwerte und Fluktuationen

Die Messwerte des Drehimpulses sind quantisiert, aber sein Mittelwert kann in jede Richtung zeigen. Dabei müssen wir beachten, dass Mittelwerte nur bezüglich eines Zustandes definiert sind. Betrachten wir also den Zustand  $|lm\rangle$ .

In diesem Zustand ist der Mittelwert des Drehimpulses der Vektor

$$\langle \vec{L} \rangle = \begin{pmatrix} \langle L_x \rangle \\ \langle L_y \rangle \\ \langle L_z \rangle \end{pmatrix}$$

Das Quadrat und die  $z$ -Projektion von  $\vec{L}$  sind in diesem Zustand scharf definiert, und deshalb sind seine Mittelwerte

$$\langle L^2 \rangle = \hbar^2 l(l+1), \quad \langle L_z \rangle = \hbar m, \Rightarrow \boxed{\langle \vec{L} \rangle^2 < \langle L^2 \rangle} \quad (3.49)$$

Die Messwerte von  $L_x, L_y$  fluktuieren dagegen, aber schon allein aus Symmetriegründen können wir Aussagen über folgende Mittelwerte machen:

$$\langle L_x \rangle = \langle lm | L_x | lm \rangle = \langle L_y \rangle = 0, \quad \langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle$$

Damit können wir den Erwartungswert von  $L_x^2, L_y^2$  berechnen,

$$\hbar^2 l(l+1) = \langle L^2 \rangle = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \langle L_z^2 \rangle = 2\langle L_x^2 \rangle + \hbar^2 m^2$$

Daraus folgt die Varianz von  $L_x$ ,

$$\boxed{\Delta^2 L_x = \langle L_x^2 \rangle = \hbar^2 \frac{l(l+1) - m^2}{2} = \Delta^2 L_y} \quad (3.50)$$

Auch wenn der Mittelwert des Drehimpulses in die  $z$ -Achse zeigt, so fluktuieren seine Messwerte in die  $(x, y)$ -Richtung. Als Beispiel betrachten wir den Zustand  $m = l$  mit maximaler  $z$ -Projektion. Wir erhalten

$$\Delta L_x = \Delta L_y = \hbar \sqrt{\frac{l}{2}}, \quad \langle L_z \rangle = \hbar l, \Rightarrow \frac{\Delta L_x}{\langle L_z \rangle} = \frac{1}{\sqrt{2l}}$$

Im Grenzfall unendlich großer Quantenzahl,  $l \rightarrow \infty$ , verschwinden die relativen Quantenfluktuationen, wir erhalten den klassischen Drehimpuls  $\vec{L}$ .

### 3.5.4 Wellenfunktion

Aus der Algebra des Drehimpulsoperators konnten wir Aussagen über seine Messwerte, Fluktuationen und Mittelwerte herleiten. Wie sehen die dazugehörigen Wellenfunktionen aus?

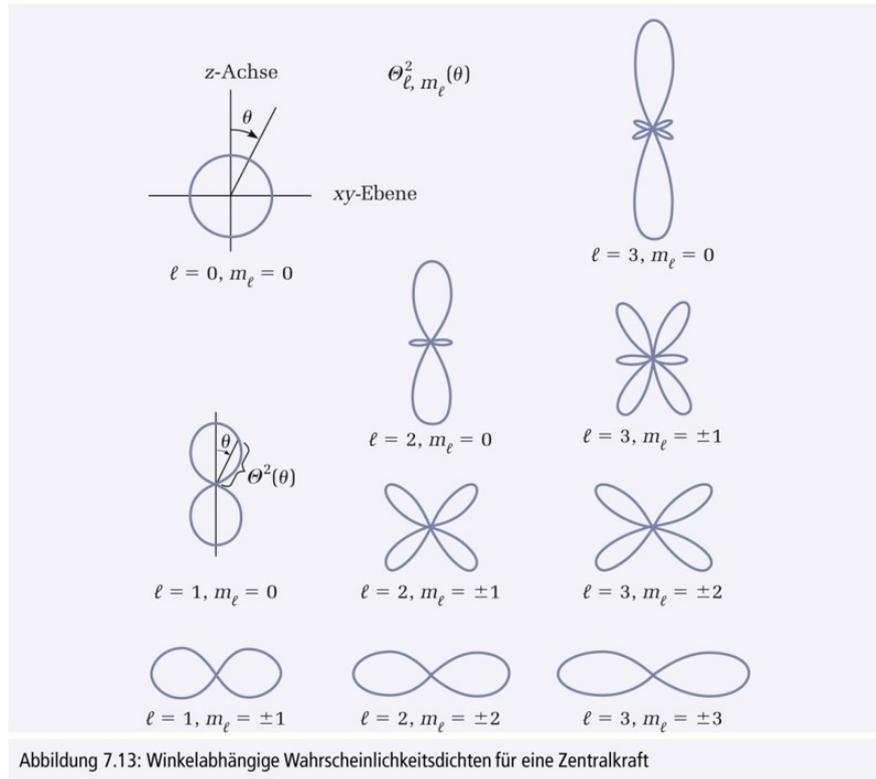


Abbildung 3.2: Moderne Physik, R. Harris, Pearson 2013

Dazu müssen wir die Eigenwertgleichungen in Kugelkoordinaten  $r, \theta, \varphi$  formulieren und lösen. Ein Separationsansatz liefert

$$|lm\rangle = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Der Radialanteil  $R(r)$  wird nicht durch  $L^2, L_z$  festgelegt. Aber der Winkelanteil ist bekannt,  $Y_{lm}$  sind die **Kugelflächenfunktionen**. Sie sind eine Basis, ein vollständiges Orthonormalsystem, für Funktionen auf der Oberfläche der Einheitskugel. Jede Funktion  $F(\theta, \varphi)$  kann nach dieser Basis  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  entwickelt werden. Hier sind einige Kugelflächenfunktionen:

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi}$$

### 3 Quantenmechanik

$\varphi$  ist der Winkel um die  $z$ -Achse, und jeder Zustand  $|lm\rangle$  enthält den Faktor  $e^{im\varphi}$ . Die Wellenfunktion muss aber bei einer Rotation um  $2\pi$  wieder denselben Wert annehmen, deshalb sind  $m$  und damit  $l$  ganzzahlig. Beachte, dass die Algebra auch halbzahlige Werte von  $l, m$  erlaubt.

In Ortsraum ist die Drehimpulsquantenzahl  $l$  ganzzahlig,  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

Üblicherweise stellt man die Winkelabhängigkeit der Kugelflächenfunktionen durch eine Kurve  $r(\theta) = |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$  in der Ebene dar, wie in der vorigen Abbildung gezeigt.

## 3.6 Wasserstoff-Atom

Wozu brauchen wir die Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators, die Kugelflächenfunktionen? Sie sind ein Teil der Wellenfunktionen des Wasserstoff-Elektrons. Das wollen wir hier herleiten.

Dazu betrachten wir ein Elektron und ein Proton, die sich mit der Coulomb-Wechselwirkung gegenseitig anziehen. Dieses Problem haben wir schon in der klassischen Mechanik untersucht, und zunächst verwenden wir dieselbe Methode, um geeignete Koordinaten zu finden. Erst danach quantisieren wir das Problem.

### 3.6.1 Teilchen im Zentralpotenzial

Wir führen also die Koordinaten des Schwerpunktes und des Abstandes ein, und damit separieren wir die Wellenfunktion.

- Schwerpunkt  $\vec{R}$ : Freies Teilchen mit Masse  $M = m_p + m_e$
- Abstand  $\vec{x}$ : Teilchen im Zentralpotential mit reduzierter Masse  $\mu = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e}$
- Hamiltonoperator:  $\hat{H}_g = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + U(|\vec{x}|)$
- 

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{R}, \vec{x}) &= \Psi_S(\vec{R})\Psi(\vec{x}), \quad \Psi_S(\vec{R}) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}, \\ \hat{H}\Psi(\vec{x}) &= \left( \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + U(|\vec{x}|) \right) \Psi(\vec{x}) = E\Psi(\vec{x})\end{aligned}$$

### 3 Quantenmechanik

Für die Bewegung des Schwerpunktes erhalten wir somit eine ebene Welle mit dem Impuls  $\hbar\vec{k}$ , der Schwerpunkt bewegt sich wie ein freies Teilchen. Für die Bewegung des Abstandes zwischen Elektron und Proton erhalten wir den Hamilton-Operator  $\hat{H}$  eines Teilchens im Coulombpotenzial  $U(|\vec{x}|)$ .

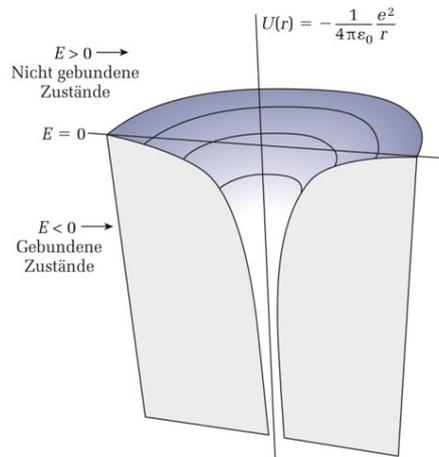


Abbildung 7.4: Die potenzielle Energie des Wasserstoffatoms

Quelle: Moderne Physik, R. Harris, Pearson 2013

Beim klassischen Teilchen im Zentralpotenzial führt die Erhaltung des Drehimpulses dazu, dass sich das Teilchen nur in einer Ebene bewegt. In der Quantenmechanik ist das allerdings anders. Der Erwartungswert des Drehimpulses ist zwar erhalten, aber das Teilchen hat eine Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\Psi(\vec{x})|^2$  in allen drei Raumdimensionen.

Für ein beliebiges Zentralpotenzial  $U(|\vec{x}|)$  ist der Hamilton-Operator offensichtlich rotationssymmetrisch. Daraus folgt mit dem Theorem 3.45:

$\hat{H}$  vertauscht mit den Operatoren  $L_x, L_y, L_z, L^2 \Rightarrow$

Es gibt eine gemeinsame Eigenbasis zu  $\hat{H}, L^2, L_z : |nlm\rangle$

$$\hat{H} |nlm\rangle = E_{nlm} |nlm\rangle$$

$$L^2 |nlm\rangle = \hbar^2 l(l+1) |nlm\rangle$$

$$L_z |nlm\rangle = \hbar m |nlm\rangle$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots; \quad -l \leq m \leq l$$

In den Energiezuständen des Wasserstoffs können wir somit die Eigenschaften des Drehimpulses scharf messen. Zusätzlich zum Drehimpuls gibt es noch eine weitere Quanten-

### 3 Quantenmechanik

zahl  $n$ , die die Energie der gebundenen Zustände mit nummeriert. Im Allgemeinen kann die Energie von allen Quantenzahlen abhängen. Beim Coulombpotenzial  $U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$  für eine Kernladung  $Ze$  hängt die Energie  $E_n$  allerdings nur von der Quantenzahl  $n$  ab:

$$E_n = -\frac{\mu e^4 Z^2}{8\epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -R_y \frac{Z^2}{n^2}$$
$$n = 1, 2, 3, \dots, \quad l \leq n - 1, \quad R_y \simeq 13.6 \text{ eV}$$

Für jeden Wert von  $l$  gibt es  $2l + 1$  viele Werte der Quantenzahl  $m$ , und die Quantenzahl  $l$  ist durch  $n - 1$  beschränkt. Deshalb gibt es  $\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$  viele Eigenzustände mit derselben Energie,

Jede Energie ist  $n^2$ -fach entartet, bzw.  $2n^2$ -fach mit Spin

Gebundene Zustände haben eine negative Energie, analog zum Teilchen im Kasten. Der energetisch tiefste Zustand hat die Energie -1 Rydberg = -13.6 eV. Allerdings gibt es im Coulomb-Potenzial im Gegensatz zum Quantentopf unendlich viele gebundene Zustände, die hoch angeregten Zustände drängen sich mit  $-1/n^2$  an den Nullpunkt. Für positive Energien erhält man Streuzustände, eine Ladung wird am Atomkern gestreut.

#### 3.6.2 Lösung der Schrödingergleichung

Wie lösen wir die Schrödinger-Gleichung des Wasserstoff-Elektrons? Hier wollen wir nur eine Lösungsskizze angeben, Details finden Sie in jedem Lehrbuch.

Wie im klassischen Fall ist es zweckmäßig, Kugelkoordinaten zu verwenden,

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + U(r) \right) \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi)$$

Aus einer Formelsammlung entnehmen wir den Laplace Operator in Kugelkoordinaten,

$$\nabla^2 = \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}$$

Überraschenderweise taucht das Quadrat des Drehimpuls-Operators im Laplace-Operator auf. Dessen Eigenschaften kennen wir aber schon. Wir können deshalb die Wellenfunktion mithilfe der Kugelflächenfunktionen separieren,

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

### 3 Quantenmechanik

und erhalten anstelle des Operators  $L^2$  seine Eigenwerte  $\hbar^2 l(l+1)$ . Zusätzlich haben wir mit einem kleinen Trick den Radialanteil als Quotient  $u(r)/r$  geschrieben, denn damit wird die erste Ableitung in der kinetischen Energie eliminiert. Schließlich bleibt folgende eindimensionale Schrödinger-Gleichung übrig,

$$\boxed{\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + U(r)}_{U_{eff}(r)} \right) u_l(r) = E u_l(r)} \quad (3.51)$$

Wir haben damit das ursprüngliche sechsdimensionale System des Protons und des Elektrons auf eine eindimensionale Schrödinger-Gleichung reduziert. Die hätten wir fast raten können, denn aus der klassischen Mechanik wissen wir, dass die Energie des Radialanteils als ein Teilchen geschrieben werden kann, das sich in einem effektiven Potenzial bewegt. Dieses Potenzial setzt sich zusammen aus einem Zentrifugal-Anteil  $L^2/2\mu r^2$  und dem Zentralpotenzial  $U(r)$ ,

$$E = \frac{\mu}{2} \dot{r}^2 + \underbrace{\frac{L^2}{2\mu r^2} + U(r)}_{U_{eff}(r)}$$

Allerdings wird in der Quantenmechanik der Operator  $L^2$  durch seine Eigenwerte ersetzt, bei entsprechender Wahl der Wellenfunktion. Der Drehimpuls ist quantisiert. Und die kinetische Energie wird mit dem Trick  $R = u/r$  quantenmechanisch zu  $-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2}$ . Für jeden Wert von  $l$  erhalten wir somit eine Schrödinger-Gleichung, die wir noch lösen müssen. Dazu setzen wir das Coulombpotenzial  $U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$  ein.

Für kleine Abstände  $r$  ist das Zentrifugal- viel größer als das Coulomb-Potenzial, deshalb können wir letzteres vernachlässigen und erhalten die Lösung  $u_l(r) \sim r^{l+1}$ . Für große Abstände vernachlässigen wir beide Potenziale und erhalten  $u_j(r) \sim e^{-\kappa r}$  mit  $\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2\mu} = |E|$ . Dazwischen machen wir nun den Ansatz

$$u_l(r) = A r^{l+1} e^{-\kappa r} \cdot \text{Polynom}(r)$$

Für jeden Wert von  $l$  finden wir nun Lösungen  $u_{nl}$  der Gleichung 3.51 mit der Energie  $E_n = -\frac{R_y}{n^2}$ . Es stellt sich heraus, dass das Polynom den Grad  $n - l - 1$  hat, es ist ein zugeordnetes **Laguerre-Polynom**. Es hat  $N = n - l - 1$  Nullstellen. Schließlich findet man mit  $R_{nl}(r) = u_{nl}(r)/r$ , die Wellenfunktion  $\Psi_{nlm}$ , wobei  $a_0$  der Bohrsche Radius ist, etwa ein halbes Ångström, ein Maß für die Ausdehnung des Atoms.

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu e^2} = 0.52917721092(17) \cdot 10^{-10} m$$

### 3 Quantenmechanik

$$\Psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{4(n-l-1)!}{(n+l)! n (na_0/Z)^3}} \left[ \frac{2r}{na_0/Z} \right]^l \exp\left\{-\frac{r}{na_0/Z}\right\} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0/Z}\right) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$$

Tabelle 7.4: Radiale Lösungen von (7.31)

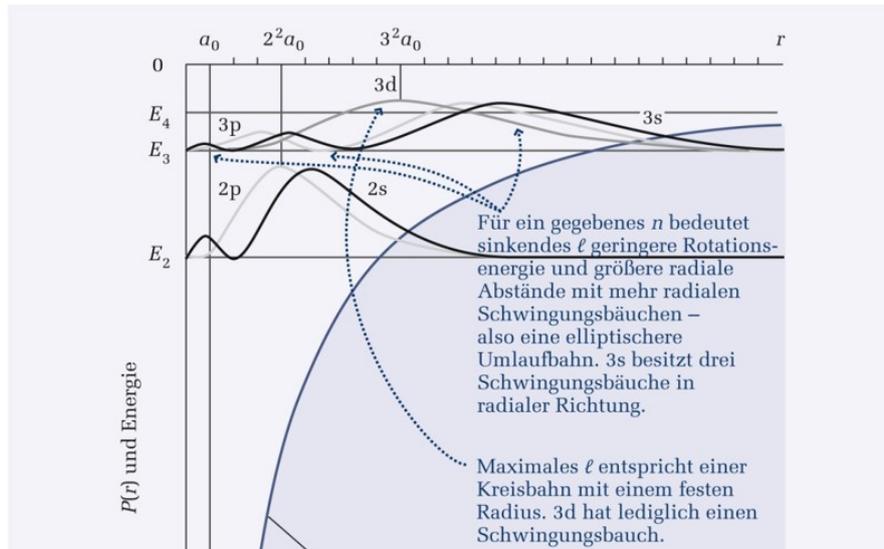
$n, \ell$	$R_{n,\ell}(r)$
1, 0	$\frac{1}{(1a_0)^{3/2}} 2e^{-r/a_0}$
2, 0	$\frac{1}{(2a_0)^{3/2}} 2\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$
2, 1	$\frac{1}{(2a_0)^{3/2}} \frac{r}{\sqrt{3}a_0} e^{-r/2a_0}$
3, 0	$\frac{1}{(3a_0)^{3/2}} \left(2 - \frac{4r}{3a_0} + \frac{4r^2}{27a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$
3, 1	$\frac{1}{(3a_0)^{3/2}} \frac{4\sqrt{2}r}{9a_0} \left(1 - \frac{r}{6a_0}\right) e^{-r/3a_0}$
3, 2	$\frac{1}{(3a_0)^{3/2}} \frac{2\sqrt{2}r^2}{27\sqrt{5}a_0^2} e^{-r/3a_0}$

Quelle: Moderne Physik, R. Harris, Pearson 2013

Die Wellenfunktion hat folgende Eigenschaften:

- Je größer der Drehimpuls  $l$  ist, desto stärker wird das Elektron vom Ursprung verdrängt.
- Je größer der Wert  $n$  ist, je dichter die Energie also am Nullpunkt liegt, desto ausgedehnter ist die Elektronenwolke.
- Die Anzahl der Radial-Nullstellen ist  $N = n - l - 1$ , der Wert von  $l$  ist demnach durch  $n - 1$  beschränkt.

### 3 Quantenmechanik



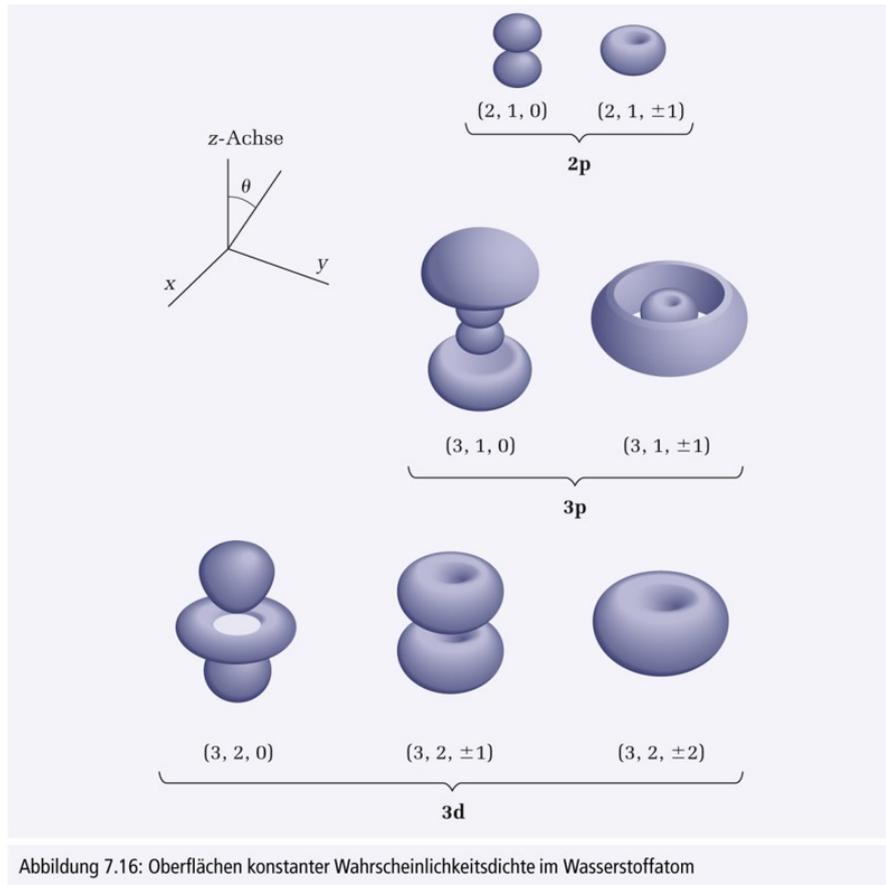
Quelle: Moderne Physik, R. Harris, Pearson 2013

Hier soll kurz die Notation der Atomphysik vorgestellt werden:

$n$	Schale	$l$	Symbol	$m$	Entartung
1	K	0	s	0	1
2	L	0	s	0	4
		1	p	-1,0,1	
3	M	0	s	0	9
		1	p	-1,0,1	
		2	d	-2,-1,0,1,2,	

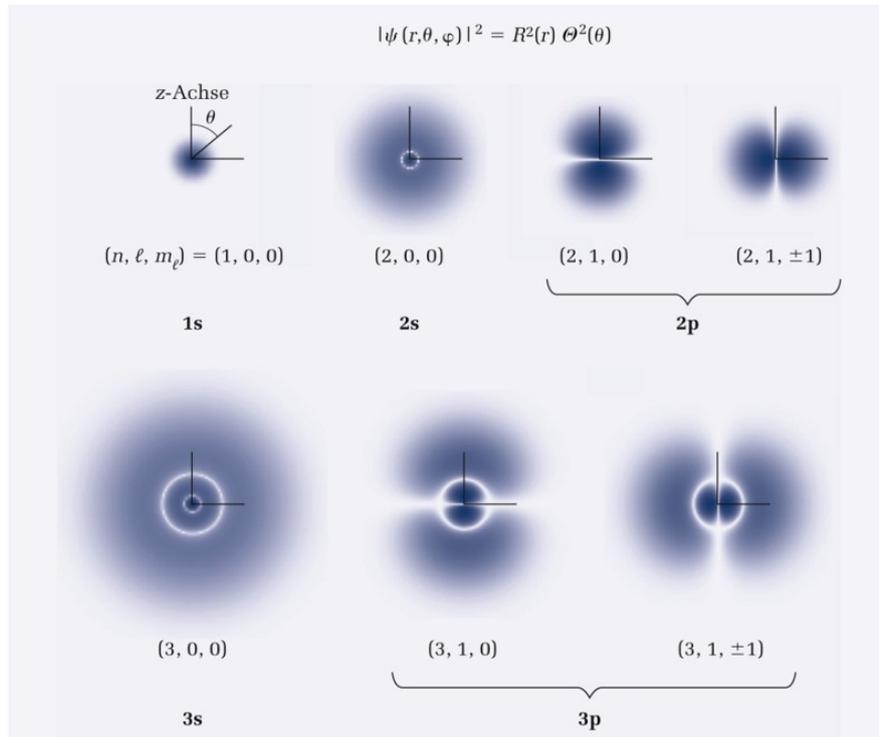
Die Wellenfunktion  $\Psi(r, \theta, \varphi)$  des Wasserstoffelektrons ist das Produkt aus Radialanteil und Kugelflächenfunktion. Die folgenden Abbildungen zeigen die Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\Psi|^2$  des Elektrons.

### 3 Quantenmechanik



Quelle: Moderne Physik, R. Harris, Pearson 2013

### 3 Quantenmechanik



Quelle: Moderne Physik, R. Harris, Pearson 2013

### 3.6.3 Elektron im Magnetfeld

Das Elektron kreist um den Atomkern und erzeugt dabei ein magnetisches Moment  $\vec{\mu}$ , das sich in einem äußeren Magnetfeld  $\vec{B}$  ausrichtet. Das ist das klassische Bild. Mithilfe des Korrespondenzprinzips kann man herleiten, dass ein geladenes Quantenteilchen ebenfalls eine magnetische Energie besitzt, allerdings wird das magnetische Moment zu einem Operator,

$$\begin{aligned} \text{Klassischer Dipol} \quad E_B &= -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B \\ \text{Dipol-Operator} \quad \hat{H}_B &= -\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B} = \frac{eB}{2m_0} L_z, \quad \hat{\vec{\mu}} = -\frac{e}{2m_0} \vec{L} \end{aligned}$$

Dabei haben wir die  $z$ -Achse in Richtung des Magnetfeldes gewählt. Der magnetische Hamilton-Operator enthält demnach nur den Drehimpulsoperator  $L_z$ . Der gesamte Hamilton-Operator für ein Wasserstoffelektron ist damit

$$\hat{H}_g = \hat{H} + \hat{H}_B$$

Und die Eigenzustände  $|nlm\rangle$  von  $\hat{H}$  sind ebenfalls die Eigenzustände im Magnetfeld,

$$\hat{H}_g |nlm\rangle = \left( -\frac{R_y}{n^2} + \frac{eB}{2m_0} \hbar m \right) |nlm\rangle \quad (3.52)$$

Das liefert den normalen **Zeemann-Effekt**, der schon 1890 gemessen wurde: Die Energieniveaus des atomaren Elektrons werden durch ein Magnetfeld  $(2l+1)$ -fach aufgespalten. Die Aufspaltung ist proportional zum Magnetfeld und beträgt

$$\Delta E = \hbar \omega_L \quad \text{mit der Lamorfrequenz} \quad \omega_L = \frac{eB}{2m_0}$$

Viele Experimente ergaben allerdings eine kompliziertere Aufspaltung, den anomalen Zeemann-Effekt. Denn der Spin des Elektrons liefert ein zusätzliches magnetisches Moment,

$$\hat{H}_g = \hat{H} + \frac{eB}{2m_0} (\vec{L} + g\vec{S}) \cdot \vec{B}, \quad g \simeq 2$$

Der Spin wurde erst 1922 entdeckt, er ist ein Drehimpuls mit der Quantenzahl  $l = s = \frac{1}{2}$ ,  $m = \pm \frac{1}{2}$ .

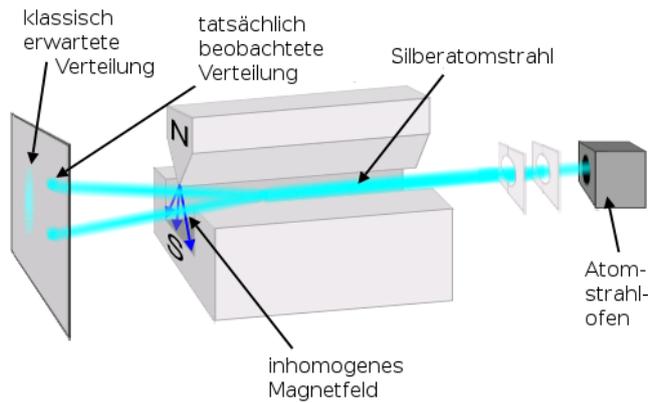
### 3.7 Spin

Die Quantenzahlen  $l$  der Bahndrehimpulse müssen ganzzahlig sein, wie wir gesehen haben. Die Mathematik, genauer die Drehimpulsalgebra, erlaubt aber auch halbzahlige Drehimpulse  $l = 1/2, 3/2, \dots$ . Und tatsächlich besitzen die Elementarteilchen einen Drehimpuls mit  $l = 1/2$ , den Spin.

Jedes Elementarteilchen hat einen inneren Drehimpuls. Dieser Spin erzeugt ein magnetisches Moment, das sich in einem äußeren Magnetfeld ausrichten will und mit anderen magnetischen Momenten wechselwirkt. Allerdings ist ein Elektron ein punktförmiges Teilchen, es konnte bis heute keine Ausdehnung gemessen werden. Eine punktförmige Ladung kann sich aber nicht selbst drehen und ein magnetisches Moment erzeugen, woher kommt also der Spin?

Der Spin wurde 1922 von Stern und Gerlach im Experiment gesehen. In einem äußeren Magnetfeld hat ein magnetisches Moment die Energie  $E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ . Die Kraft ist der negative Gradient dieser Energie. Wenn sich das Magnetfeld somit räumlich ändert, so wirkt eine Kraft auf das magnetische Moment, und die Stärke dieser Kraft hängt von der Richtung des Momentes ab. In einem Experiment mit einem Strahl von Silberatomen in einem räumlich inhomogenen Magnetfeld haben Stern und Gerlach entdeckt, dass das magnetische Moment der Atome nur zwei Einstellungen hat, der Strahl wurde durch das Feld in zwei Strahlen aufgespalten.

### 3 Quantenmechanik



Quelle: Wikipedia

Daraus hat man später geschlossen, dass das äußere Elektron des Silberatoms zwar keinen Bahn- aber einen zusätzlichen Drehimpuls mit  $s = 1/2$  hat, den Spin. Die Drehimpulse der inneren Elektronen kompensieren sich. 1927 konnte Pauli den Spin aus der relativistischen Quantenmechanik herleiten.

Nicht nur Elektronen haben einen Spin  $s = 1/2$ , sondern auch die anderen Elementarteilchen. Quarks und Neutrinos sind Fermionen mit  $s = 1/2$ , und das Photon hat als Boson  $s = 1$ . Und bei zusammengesetzten Teilchen addieren sich sämtliche Spins zu einem halb- oder ganzzahligen Gesamtspin, beispielsweise zu  $s = 1/2$  für Protonen, Neutronen und Silberatome.

#### 3.7.1 Hilbertraum und Spinoperator

Wie zu jeder Messgröße gehört zum Spin ein selbstadjungierter Operator  $\hat{S}$ . Dieser Operator ist ein Drehimpuls mit den Quantenzahlen  $l = s = \frac{1}{2}$  und  $m = \pm \frac{1}{2}$ . Üblicherweise verwendet man für den Spin die Notation  $S$  anstelle von  $L$ .

Wie bei jedem Drehimpuls gibt es eine Eigenbasis  $|sm\rangle$  zu den Operatoren

$$S^2 |sm\rangle = (S_x^2 + S_y^2 + S_z^2) |sm\rangle = \hbar^2 s(s+1) |sm\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |sm\rangle \quad (3.53)$$

$$S_z |sm\rangle = \hbar m |sm\rangle = \pm \hbar \frac{1}{2} |sm\rangle$$

Es gibt somit nur zwei Basisvektoren, der Hilbertraum ist zweidimensional mit der

### 3 Quantenmechanik

$z$ -Basis

$$\begin{aligned} |s = \frac{1}{2}, m = +\frac{1}{2}\rangle &= |z+\rangle = |\uparrow\rangle \\ |s = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2}\rangle &= |z-\rangle = |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Im Ortsraum hatten wir es mit einem unendlich dimensionalen Hilbertraum zu tun; hier gibt es nur zwei Dimensionen, aber immer noch drei Komponenten  $S_x, S_y, S_z$  für die drei räumlichen Richtungen.

Jeder Zustand kann nach dieser Basis entwickelt werden,

$$|\Psi\rangle = c_+|\uparrow\rangle + c_-|\downarrow\rangle \quad \text{mit} \quad |c_+|^2 + |c_-|^2 = 1$$

In zwei Dimensionen es nützlich, Matrizenmechanik zu verwenden. Man definiert und findet

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\Psi\rangle = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \\ \vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Der Spinoperator ist somit ein Vektor mit jeweils drei  $(2 \times 2)$ -Matrizen, den sogenannten ***Pauli-Matrizen***.

Anstelle der  $z$ -Richtung hätten wir jede andere Richtung wählen können und jeweils eine andere zweidimensionale Basis erhalten.

Dieser Formalismus ist nicht nur auf den Spin beschränkt, sondern wir können jedes Quantensystem, bei dem wir uns auf zwei Zustände beschränken können, durch einen zweidimensionalen Hilbertraum beschreiben. Und die folgenden Aussagen gelten entsprechend für solche Zwei-Niveau-Systeme.

## 3.7.2 Spinpräzession

Ein Spin besitzt ein magnetisches Moment, quantenmechanisch einen Operator

$$\vec{\mu} = -g \underbrace{\frac{e\hbar}{2m_0}}_{\mu_B} \frac{\vec{S}}{\hbar}$$

Die Größe  $\mu_B$  nennt man Bohrsches Magneton und  $g$  den Lande-Faktor.  $m_0$  ist die Masse des entsprechenden Teilchens.

Der Faktor  $g$  hat unterschiedliche Werte,

Bahn	$g = 1$
Elektronenspin	$g = 2.002319304(8T/36E)$
Proton	$g \simeq 5.6$
Neutron	$g \simeq -3.8$

Befindet sich der Spin in einem äußeren Magnetfeld, so erhält man den Hamilton-Operator

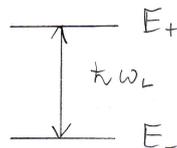
$$\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \mu_B B \sigma_z = \frac{\hbar\omega_L}{2} \sigma_z$$

Dabei verwenden wir im Folgenden  $g = 2$  und  $\vec{B} = B\vec{e}_z$ , und wir haben die **Lamorffrequenz**  $\omega_L = \frac{eB}{m_0}$  eingeführt. Bei Protonen ist der Faktor  $g$  etwa dreimal so groß und die Masse etwa 2000 mal schwerer als beim Elektron, deshalb erhält man eine entsprechend geringere Energie.

Dieser Hamilton-Operator hat somit die Eigenzustände und Eigenwerte

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} : E_+ = \frac{\hbar\omega_L}{2} \\ |\downarrow\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} : E_- = -\frac{\hbar\omega_L}{2} \end{aligned}$$

Wir haben es deshalb mit einem Zwei-Niveau-System zu tun, und der Abstand zwischen den beiden Energieniveaus ist  $\Delta E = \hbar\omega_L$ .



### 3 Quantenmechanik

Diese beiden stationären Zustände sind parallel oder antiparallel zum Magnetfeld ausgerichtet, die  $z$ -Komponente des Drehimpulses hat einen scharfen Wert. Beim allgemeinen Drehimpuls haben wir schon ausgerechnet, dass es dennoch Fluktuationen des Spins in die  $(x, y)$ -Richtung gibt, aber der Spin dreht sich nicht um das Magnetfeld.

Welcher Zustand dreht sich denn um das Magnetfeld? Jeder Zustand kann als Linearkombination dieser beiden stationären Basiszustände geschrieben werden,  $|\Psi(0)\rangle = c_+|\uparrow\rangle + c_-|\downarrow\rangle$ . Aus Gleichung 3.15 folgt die zeitabhängige Lösung der Schrödinger-Gleichung

$$|\Psi(t)\rangle = c_+ e^{-i\frac{\omega_L}{2}t} |\uparrow\rangle + c_- e^{+i\frac{\omega_L}{2}t} |\downarrow\rangle$$

Zur Übung lösen wir die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung mit der Matrizenmechanik:

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_+ \\ \dot{c}_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega_L}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \Rightarrow i\hbar\dot{c}_+ = \frac{\hbar\omega_L}{2}c_+ \Rightarrow c_+(t) = c_+(0)e^{-i\frac{\omega_L}{2}t} \Rightarrow$$

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} c_+ e^{-i\frac{\omega_L}{2}t} \\ c_- e^{+i\frac{\omega_L}{2}t} \end{pmatrix}$$

Die zeitliche Entwicklung eines jeden Zustandes können wir in diese Form bringen. Warum dreht sich ein solcher Zustand um das Magnetfeld? Um das zu sehen, betrachten wir einen Startzustand  $|\Psi(0)\rangle$ , der in die  $x$ -Richtung zeigt, der also ein Eigenzustand von  $S_x$  zum Eigenwert  $+\frac{\hbar}{2}$  ist. Dazu berechnen wir den entsprechenden Eigenvektor der Pauli-Matrix  $\sigma_x$ :

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \Rightarrow c_+ = c_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow$$

$$|x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = |\Psi(0)\rangle \Rightarrow |\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega_L}{2}t} \\ e^{+i\frac{\omega_L}{2}t} \end{pmatrix}$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass eine Messung  $S_x$  zur Zeit  $t$  den Eigenwert  $+\frac{\hbar}{2}$  gibt, ist

$$P_{x+} = |\langle x+ | \Psi(t) \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega_L}{2}t} \\ e^{+i\frac{\omega_L}{2}t} \end{pmatrix} \right|^2 = \frac{1}{4} |e^{-i\frac{\omega_L}{2}t} + e^{+i\frac{\omega_L}{2}t}|^2 =$$

$$\cos^2\left(\frac{\omega_L}{2}t\right) = \frac{1 + \cos(\omega_L t)}{2}$$

$$P_{x-} = 1 - P_{x+} = \frac{1 - \cos(\omega_L t)}{2}$$

### 3 Quantenmechanik

Die Wahrscheinlichkeit, den Spin in  $x$ -Richtung zu messen, oszilliert demnach mit der Lamor-Frequenz  $\omega_L$  zwischen den  $+/-$  Richtungen hin und her. Damit können wir auch den Erwartungswert berechnen

$$\langle S_x \rangle = P_{x+} \cdot \frac{\hbar}{2} + P_{x-} \cdot \left(-\frac{\hbar}{2}\right) = \frac{\hbar}{2} \cos \omega_L t$$

Analog:  $\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \omega_L t, \quad \langle S_z \rangle = 0$

Der Mittelwert  $\langle \vec{S} \rangle$  dreht sich mit der Frequenz  $\omega_L = \frac{geB}{2m_0}$  um die  $\vec{B}$ -Achse.

Dabei bleiben Besetzungswahrscheinlichkeiten  $P_{z+}, P_{z-}$  zeitlich konstant, hier  $P_{z+} = P_{z-} = \frac{1}{2}$ . Und daraus folgt, dass die Energie erhalten ist,  $\langle \hat{H} \rangle_t = \text{konstant}$ .

Eine rotierende Magnetisierung kann man mit einer externen elektrischen Spule messen. Durch thermische Relaxation wird sich der Mittelwert des Spins allerdings immer antiparallel zum Magnetfeld ausrichten. Wie kann man die Besetzung der beiden Niveaus ändern, wie die Richtung der Magnetisierung drehen, wie erzeugt man Spinflips? Dazu wird ein zeitlich oszillierendes Magnetfeld benötigt.

#### 3.7.3 Spinresonanz

In einem statischen Magnetfeld rotiert das magnetische Moment mit der Frequenz  $\omega_L$  um die Feldachse. Ohne zusätzliche Kräfte bleibt dabei die Besetzungswahrscheinlichkeit der beiden Spinniveaus unverändert. Der Mittelwert der Energie bleibt konstant, so wie wir es ganz allgemein für zeitunabhängige Hamilton-Operatoren hergeleitet haben.

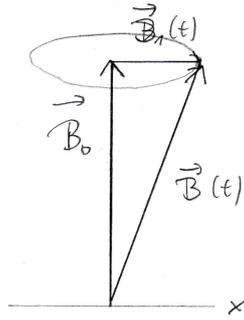
Wenn der Hamilton-Operator allerdings von der Zeit abhängt, beispielsweise durch ein zusätzliches oszillierendes Magnetfeld, so ist die Energie des Spins nicht erhalten<sup>2</sup>. In diesem Fall kann die Besetzungswahrscheinlichkeit geändert werden, und der Erwartungswert des Spins dreht sich von der Feldachse weg. Das wollen wir hier berechnen.

Dazu addieren wir zusätzlich zum starken konstanten ein zeitlich oszillierendes Magnetfeld.

$$\vec{B}(t) = B_0 \vec{e}_z + B_1 [\cos(\omega t) \vec{e}_x + \sin(\omega t) \vec{e}_y] \quad (3.54)$$

<sup>2</sup>Die Energieerhaltung gilt dann für das Gesamtsystem, Spin plus äußere Kräfte.

### 3 Quantenmechanik



Wie wir das schon beim klassischen harmonischen Oszillator gesehen haben, sollte die Antriebsfrequenz  $\omega$  in der Nähe der Rotationsfrequenz  $\omega_L = \frac{geB_0}{2m_0}$  liegen, um Resonanz zu erhalten.

Mit dem oszillierenden Magnetfeld erhalten wir den Hamilton-Operator ( $g = 2$ )

$$\hat{H} = \frac{\hbar e}{2m_0} (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \cdot \begin{pmatrix} B_x \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega_L}{2} \sigma_z + \hbar\omega_1 [\cos \omega t \sigma_x + \sin \omega t \sigma_y] =$$

$$\frac{\hbar\omega_L}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \hbar\omega_1 \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega t} \\ e^{+i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \omega_L = \frac{eB_0}{m_0}, \quad \omega_1 = \frac{eB_1}{2m_0}$$

Damit müssen wir die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung lösen,

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_+ \\ \dot{c}_- \end{pmatrix} = \hat{H} \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

Wir erhalten zwei gekoppelte Differenzialgleichungen für die komplexwertigen Koeffizienten des Spinvektors:

$$i\hbar \dot{c}_+ = \frac{\hbar\omega_L}{2} c_+ + \hbar\omega_1 e^{-i\omega t} c_-$$

$$i\hbar \dot{c}_- = -\frac{\hbar\omega_L}{2} c_- + \hbar\omega_1 e^{+i\omega t} c_+$$

Wie lösen wir dieses System von linearen Differenzialgleichungen? Im Gegensatz zu den schwingenden Systemen der klassischen Mechanik haben wir hier *zeitabhängige* Koeffizi-

### 3 Quantenmechanik

enten. Dazu gibt es einen Trick, den man ganz allgemein **Wechselwirkungsbild** nennt. Wir trennen die Bewegung des Spins im Magnetfeld  $\vec{B}_0$  vom zeitabhängigen Zustand ab:

$$d_+ = e^{i\frac{\omega_L}{2}t} c_+, \quad d_- = e^{-i\frac{\omega_L}{2}t} c_-$$

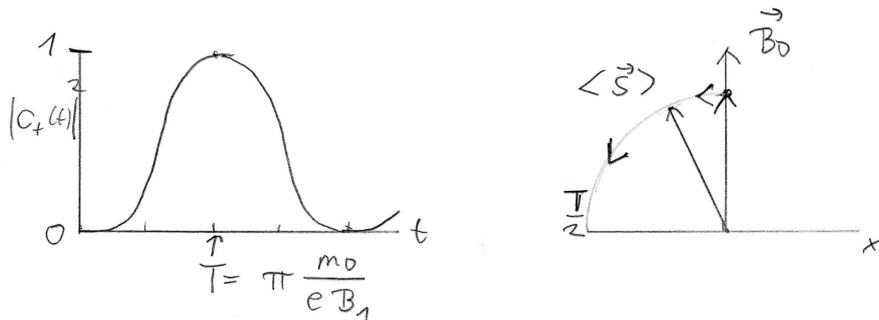
Nun betrachten wir den Fall der Resonanz,  $\omega = \omega_L$ , für den die Differenzialgleichungen der neuen Koeffizienten besonders einfach werden:

$$i\dot{d}_+ = \omega_1 d_-, \quad i\dot{d}_- = \omega_1 d_+ \Rightarrow \ddot{d}_+ = -\omega_1^2 d_+$$

Wenn am Anfang das obere Niveau unbesetzt ist,  $d_+(0) = 0$ , so erhalten wir

$$d_+(t) = \sin \omega_1 t$$

Die Besetzungswahrscheinlichkeit des oberen Niveaus,  $|c_+|^2 = |d_+|^2$ , oszilliert demnach mit der Frequenz  $2\omega_1 = \frac{eB_1}{m_0}$ . Dieses Phänomen nennt man **Rabi-Oszillationen**. Zusätzlich zur Rotation um die Achse  $\vec{B}_0$  wird der Erwartungswert des Spins gegen die Achse gedreht.



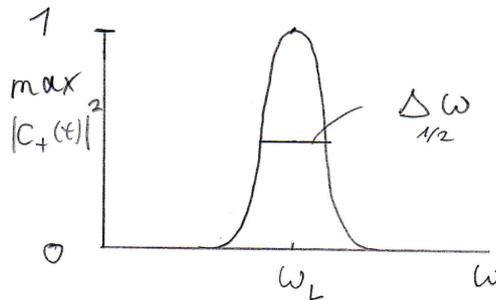
Wenn das Magnetfeld in einem Zeitintervall  $T = \pi \frac{m_0}{eB_1}$  eingestrahlt wird, so wird der Erwartungswert des Spins offenbar um  $\pi$  gedreht. Mit einem Puls der Dauer  $T/2$  kann somit der Spin, der anfangs in Richtung  $\vec{B}_0 = B_0 \vec{e}_z$  ausgerichtet ist, in die  $(x, y)$ -Ebene gedreht werden. Dort rotiert er mit der Frequenz  $\omega_L$  und sein magnetisches Moment induziert eine elektrische Spannung in einer äußeren Spule.

Wenn wir das magnetische Feld quantenmechanisch betrachten, so werden Photonen mit der Energie  $\hbar\omega_L$  emittiert und absorbiert. Bis zur Zeit  $T$  gibt es mehr Absorptionen, und danach bis  $2T$  mehr Emissionen. Für diese beiden Prozesse gilt Energie- und Drehimpulserhaltung, wobei das Photon einen Spin  $s = 1$  hat.

Was geschieht, wenn wir nicht mit der Larmor-Frequenz  $\omega_L$  antreiben? In diesem Fall kann die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung ebenfalls analytisch berechnet werden, allerdings ist die Rechnung etwas komplizierter. Bei einer Verstimmung der Frequenz wird

### 3 Quantenmechanik

der Spin nicht mehr vollständig gedreht, das Maximum der Besetzungswahrscheinlichkeit  $|c_+|^2$  ist kleiner als eins und nimmt mit wachsender Verstimung ab. Die Halbwertsbreite ist  $\Delta\omega = 2\omega_1 = \frac{eB_1}{m_0}$ .



Die Stärke des eingestreuerten Magnetfeldes bestimmt somit die Rabi-Frequenz und die Breite der Resonanz. Je stärker dieses Feld ist, desto schneller wird der Spin gekippt und desto breiter ist die Resonanz.

Wie groß muss die Antriebsfrequenz  $\omega$  sein? Wenn wir ein Magnetfeld der Stärke  $B_0 = 1$  Tesla einschalten, so erhalten wir für den Elektronenspin  $\omega_L \simeq \text{GHz}$  und für den Kernspin des Protons  $\omega_L \simeq 50 \text{ MHz}$ .

Die Kernspinresonanz der Wassermoleküle wird beispielsweise verwendet, um Bilder vom Inneren des Menschen zu erzeugen. Dazu werden zusätzlich zum starken äußeren Feld und zum oszillierenden Feld noch Gradientenfelder eingeschaltet, so dass die Resonanz nur in einzelnen Schichten des Gewebes auftritt. Mithilfe der Fouriertransformation werden damit Bilder erzeugt.

#### 3.7.4 Addition zweier Spins

Bei rotationsinvarianten physikalischen Systemen ist nicht der einzelne, sondern der Gesamtdrehimpuls erhalten. Das hatten wir in der klassischen Mechanik gesehen, und es gilt ebenso in der Quantenmechanik. Im einfachsten Fall haben wir es mit zwei Spins zu tun, beispielsweise bei zwei Elektronen in einem Atom oder einem Elektron- und einem Kern-Spin. Der Gesamtspin wird durch die Summe der beiden Spinoperatoren beschrieben.

$$\boxed{\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2} \quad (3.56)$$

### 3 Quantenmechanik

Was bedeutet diese Gleichung mathematisch? Zunächst müssen wir den Hilbertraum der beiden Spins konstruieren. Nach den Postulaten der Quantenmechanik ist ein Vielteilchen-Hilbertraum das Tensorprodukt der Einteilchen-Hilberträume. Und ein Tensorprodukt wird durch eine Produktbasis definiert, die aus Einteilchen-Basiszuständen besteht. In unserem Fall bedeutet das:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 : \quad \text{Basis} \quad | \uparrow \rangle | \uparrow \rangle, | \uparrow \rangle | \downarrow \rangle, | \downarrow \rangle | \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle | \downarrow \rangle \quad (3.57)$$

Der Hilbertraum der beiden Spins ist demnach vierdimensional, es gibt vier Basisvektoren. Jeder Zustand  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$  kann nach dieser Basis entwickelt werden:

$$|\Psi\rangle = \sum_{nm} c_{nm} |n\rangle |m\rangle$$

Die Einteilchen-Operatoren wirken jeweils auf ihr Teilchen,  $S_1$  wirkt auf  $\mathcal{H}_1$  und  $S_2$  auf  $\mathcal{H}_2$ :

$$\vec{S}|\Psi\rangle = \sum_{nm} c_{nm} \left( \vec{S}_1 |n\rangle \right) |m\rangle + \sum_{nm} c_{nm} |n\rangle \left( \vec{S}_2 |m\rangle \right)$$

Die Summe zweier Drehimpulse ist ebenfalls ein Drehimpuls. Deshalb gilt für  $\vec{S}$  die Drehimpulsalgebra:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \quad [S^2, S_z] = 0$$

Da die beiden Operatoren  $S^2, S_z$  miteinander vertauschen, gibt es dazu eine gemeinsame Eigenbasis:

$$S^2 |sm\rangle = \hbar^2 s(s+1) |sm\rangle, \quad S_z |sm\rangle = \hbar m |sm\rangle, \quad -s \leq m \leq s$$

Das ist eine andere Basis als diejenige der Operatoren  $S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}$ , Gl. 3.57. Nun gilt:  $S^2$  vertauscht mit  $S_z$  und mit  $S_1^2, S_2^2$ , aber nicht mit  $S_{1z}, S_{2z}$ . Die Operatoren  $S_1^2, S_2^2$  haben jeweils nur einen Eigenwert  $\frac{3}{4}\hbar^2$ , deshalb brauchen wir den Zustand  $|sm\rangle$  nicht mit deren Quantenzahlen zu markieren.

Somit gibt es zwei Basissysteme:

### 3 Quantenmechanik

$$\begin{aligned} \text{Basis bzgl. } S^2, S_z, S_1^2, S_2^2 : |sm\rangle \in \mathcal{H} & \quad (3.58) \\ \text{Basis bzgl. } S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z} : |m_1\rangle|m_2\rangle \in \mathcal{H} & \end{aligned}$$

Jeder Vektor der einen Basis kann selbstverständlich nach der anderen Basis entwickelt werden. Im allgemeinen Fall, bei der Addition beliebiger Drehimpulse, sind die entsprechenden Entwicklungskoeffizienten unter dem Namen **Clebsch-Gordan-Koeffizienten** tabelliert.

Wie sieht diese Transformation für die beiden Spins aus? In diesem Fall ist diese Entwicklung etwas durchsichtiger. Denn es gilt

$$S_z|m_1\rangle|m_2\rangle = (S_{1z} + S_{2z})|m_1\rangle|m_2\rangle = \hbar(m_1 + m_2)|m_1\rangle|m_2\rangle$$

Damit kennen wir den Eigenwert von  $S_z$ ,

$$\hbar m = \hbar(m_1 + m_2) \in \{-\hbar, 0, \hbar\} \quad (3.59)$$

Der Wert von  $m$  läuft zwischen  $-s$  und  $s$ , daraus folgt

Die Quantenzahl  $s$  kann nur die Werte  $s = 1$  oder  $s = 0$  annehmen, es gibt nur die Zustände  $|1m\rangle$  und  $|00\rangle$ .

Wie sehen diese Eigenzustände von  $S^2$  und  $S_z$  aus? Eine leichte Rechnung mit den Auf- und Absteige-Operatoren gibt

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle \right] \\ |1, -1\rangle &= |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle \\ |0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle \right] \end{aligned}$$

Diese Zustände sind nicht nur Eigenzustände des gesamten Drehimpulses, sondern sie haben auch die Symmetrie, die wir für ununterscheidbare Teilchen gefordert haben. Die ersten drei Zustände, das **Triplet  $s = 1$** , sind symmetrisch beim Vertauschen der beiden Spins, während der vierte Zustand, das **Singulett  $s = 0$** , antisymmetrisch ist.

### 3 Quantenmechanik

Das hat Konsequenzen für die Atomphysik. Denn für ununterscheidbare Fermionen muss die gesamte Wellenfunktion antisymmetrisch sein. Diese ist aber das Produkt aus Orts- und Spin-Zustand. Daraus folgt, dass das Triplett einen antisymmetrischen Ortsanteil hat, und das Singulett einen symmetrischen:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle = \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)|1, 0\rangle &\Rightarrow \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = -\Psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1) \\ |\Psi\rangle = \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)|0, 0\rangle &\Rightarrow \Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \Psi(\vec{x}_2, \vec{x}_1) \end{aligned}$$

Wie wir schon gesehen haben, bewirkt der antisymmetrische Anteil des Ortsraumes eine Abstoßung zwischen zwei Elektronen, denn aus Symmetriegründen können sie sich nicht am selben Ort aufhalten. Das wiederum bewirkt eine geringere Coulomb-Energie. Das Triplett hat demnach eine geringere Energie als das entsprechende Singulett. Das wird auch gemessen, beispielsweise bei den Energieniveaus von Helium.

#### 3.7.5 Drehimpuls-Addition

Zwei Spins addieren sich zu Singulett oder Triplett-Zuständen. Wie sehen solche Zustände für die Summe zweier beliebiger Drehimpulse aus?

$\vec{L}_1$  und  $\vec{L}_2$  seien zwei Drehimpulse. Der Hilbertraum der Summe  $\vec{J} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$  wird durch die Basiszustände  $|l_1, m_1\rangle|l_2, m_2\rangle$  definiert. Aber wie beim Spin sind diese Produktzustände keine Eigenzustände  $|j, m\rangle$  von  $J^2$  und  $J_z$ , sondern sie sind eine Überlagerung der Produkt Zustände,

$$|j, m\rangle = \sum C_{l_1, m_1, l_2, m_2} |l_1, m_1\rangle |l_2, m_2\rangle$$

Die Koeffizienten  $C$  sind tabelliert und werden **Clebsch-Gordan-Koeffizienten** genannt. Die Eigenwerte zum Gesamtdrehimpuls sind

$$J^2|j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle; \quad J_z|j, m\rangle = \hbar m|j, m\rangle; \quad -j \leq m \leq j$$

Nicht alle Koeffizienten kommen vor, sondern man kann zeigen:

$$m = m_1 + m_2; \quad |l_1 - l_2| \leq j \leq |l_1 + l_2|$$

Wenn demnach die Quantenzahlen der einzelnen Drehimpulse gegeben sind, so kann die Quantenzahl  $j$  des Gesamtdrehimpulses mehrere Werte annehmen. Die magnetische Quantenzahl  $m$  ist dagegen fixiert.

### Spin-Bahn-Kopplung

Am Beispiel der Spin-Bahn-Kopplung wollen wir das untersuchen. Klassisch gesehen, kreist ein Elektron um die Kernladung und erzeugt dabei ein Magnetfeld, das mit dem Spin wechselwirkt. Das magnetische Moment der Bahnbewegung wechselwirkt mit dem magnetischen Moment des Spins, somit erhalten wir eine Energie proportional zum Skalarprodukt  $\vec{L} \cdot \vec{S}$ . Dieses klassische Bild erhält man ebenso aus der relativistischen Quantenmechanik. Der Hamilton-Operator des Elektrons enthält somit den Operator  $\vec{L} \cdot \vec{S}$ .

Welche Energiewerte liefert dieser Operator? Dazu müssen wir seine Eigenwerte bestimmen. Wir quadrieren den Gesamtdrehimpuls:

$$J^2 = (\vec{L} + \vec{S})^2 = L^2 + S^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S} \quad \Rightarrow \quad \vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)$$

Somit erhalten wir die Eigenwerte von  $\vec{L} \cdot \vec{S}$ :

$$\frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

Wie vorher festgestellt, kann die Quantenzahl  $j$  nur zwei Werte annehmen,  $j = l \pm \frac{1}{2}$  und mit  $s = \frac{1}{2}$  erhalten wir

$$\text{Eigenwerte von } \vec{L} \cdot \vec{S} : \quad \frac{\hbar^2}{2} \begin{cases} +l \\ -(l+1) \end{cases}$$

Die Spin-Bahn-Wechselwirkung hebt somit die  $l$ -Entartung des Wasserstoff-Spektrums auf

$$E_n \quad \rightarrow \quad E_{n,l}$$

Diese Aufspaltung wird in der Feinstruktur der atomaren Spektren gemessen.

### 3.8 Verschränkte Zustände

Der Gesamtspin zweier Elektronen und das Pauli-Prinzip lieferten Singulett- und Triplett-Zustände, also Überlagerungen von Produkt-Zuständen. Diese Zustände sind aber nicht nur für die Atom- und Molekülphysik wichtig, sondern sie führen uns einerseits zu den philosophischen Grundlagen der Quantenmechanik und andererseits zu interessanten Anwendungen wie der Quantenkryptographie und den Quantencomputern. Nicht nur

### 3 Quantenmechanik

Philosophen, sondern auch Geheimdienste und Banken interessieren sich für Quantenmechanik.

Erst in den letzten Jahren, also 90 Jahre nach der Entwicklung der Quantenmechanik, ist es gelungen, die Grundlagen der Quantenmechanik in sorgfältigen Experimenten nachzuweisen. Quantenkryptographie kann schon kommerziell erworben werden. Quantencomputer dagegen sind erst mit wenigen Bits realisiert worden, was selbstbewusste US-Firmen nicht davon abhält, Elektronik unter dem Namen Quantencomputer zu verkaufen.

#### Spukhafte Fernwirkung

Die beiden Zustände  $\frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle \pm |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle]$  haben eine interessante, naturphilosophische Konsequenz. Mathematisch gesehen sind sie **verschränkt (entangled)**, d.h. sie können nicht als Produkt  $|\Psi_1\rangle|\Psi_2\rangle$  geschrieben werden. Wir wollen nun zwei Teilchen erzeugen, deren Spins verschränkt sind, und danach in unterschiedliche Richtungen aussenden.



Wenn sie weit weg voneinander sind, dann messen wir den Spin  $S_{1z}$  des ersten Teilchens. Wenn diese Messung den Wert  $+\hbar/2$  gibt, dann hat sich nach den quantenmechanischen Postulaten der Zustand geändert, wir erhalten

$$|\Psi\rangle = |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle$$

Beim zweiten Spin erhalten wir somit bei einer Messung auf der anderen Seite immer den Wert  $-\hbar/2$ . Obwohl die beiden Teilchen weit entfernt voneinander sind, hat sich durch die erste Messung der Zustand des zweiten Teilchens spontan geändert. Das geschieht schneller als ein Signal, das mit Lichtgeschwindigkeit übertragen wird. Allerdings widerspricht das nicht der Relativitätstheorie, denn damit kann man keine Informationen übertragen; der zweite Beobachter weiß ja nicht, was der erste gemessen hat.

Die naheliegende Vermutung, dass die beiden Spins schon vor der Messung antiparallel ausgerichtet sind, läßt sich durch andere Arten von Messungen widerlegen, wie wir später sehen werden. Es gibt also keine „versteckten Variablen“, die das Messergebnis deterministisch festlegen.

### 3 Quantenmechanik

Albert Einstein hat immer wieder versucht, Gegenbeispiele für diese „spukhafte Fernwirkung“ zu konstruieren. Aber mittlerweile haben Physiker dieses Phänomen experimentell bestätigt.

#### 3.8.1 Quantencomputer

Verschränkte Zustände spielen eine große Rolle bei Quantencomputern. Banken und Geheimdienste haben großen Respekt vor der Quantenmechanik, denn im Prinzip kann man mit Quantencomputern die heutigen Verschlüsselungssysteme knacken. So lernen derzeit auch Informatiker die Quantenmechanik.<sup>3</sup>

Wir wollen hier versuchen, das Prinzip der Quantencomputer zu verstehen. Was unterscheidet sie von klassischen Computern?

#### Klassische Computer

Im herkömmlichen Computer werden Bits 0,1 auf  $N$  Kondensatoren gespeichert und verarbeitet. Die Folge dieser Bits enthält sowohl das Programm als auch die Daten.

Zustände:  $2^N$  Folgen  $x = (1, 0, 1, 0, 0, \dots, 1)$   
Algorithmus:  $x_{t+1} = A(x_t)$   
Funktion A: Produkt von 2-Bit Operationen

Als Beispiel einer 2-Bit Operation wählen wir das exklusive Oder, XOR:

00	→	0
01	→	1
10	→	1
11	→	0

#### Quantencomputer

In der Quantenmechanik ersetzen wir die Bits durch Zwei-Niveau-Zustände. Die beiden Zustände  $|0\rangle, |1\rangle$  sind eine Basis des Hilbertraums  $\mathcal{H}_1$ , und eine Überlagerung dieser

---

<sup>3</sup>N. David Mermin, Quantum Computer Science, <http://www.lassp.cornell.edu/mermin/qcomp/CS483.html>

### 3 Quantenmechanik

beiden Basiszustände wird **QBit** genannt.  $N$  viele QBits spannen den Hilbertraum  $\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_1$  auf.

Zustände:	$2^N$ Basiszustände $ x\rangle =  1\rangle 0\rangle 1\rangle 0\rangle 0\rangle\dots 1\rangle$
Algorithmus:	Zeitliche Entwicklung durch die Schrödingergleichung: Abbildung des Hilbertraumes in sich selbst durch einen unitären Operator $\hat{U}$
Operator $\hat{U}$ :	Produkt von 1- und 2-QBit-Operatoren
Messung eines Qbits:	Projektor $ 0\rangle\langle 0 $

Neu ist hier, dass der quantenmechanische Zustand eine beliebige Superposition der  $2^N$  Basiszustände sein kann. Dadurch ergeben sich viel mehr Möglichkeiten als im klassischen Fall.

Als Beispiel für eine 2-QBit Operation wählen wir wieder XOR:

$$\begin{aligned} |0\rangle|0\rangle &\rightarrow |0\rangle|0\rangle \\ |0\rangle|1\rangle &\rightarrow |0\rangle|1\rangle \\ |1\rangle|0\rangle &\rightarrow |1\rangle|1\rangle \\ |1\rangle|1\rangle &\rightarrow |1\rangle|0\rangle \end{aligned}$$

Die Abbildung ist unitär, weil die vier Basiszustände in sich selbst abgebildet werden. Es ist eine Art Drehung im Hilbertraum. Im Gegensatz zum klassischen XOR bleibt der Raum erhalten und die Abbildung kann invertiert werden. Das Ergebnis von XOR steht im zweiten Qbit und kann durch den Projektor  $1 \otimes |1\rangle\langle 1|$  ausgelesen werden.

Eine wichtige 1-Bit Operation ist die Hadamard-Abbildung  $H$ . Wir haben Sie schon bei der Spinresonanz kennen gelernt, denn sie entspricht einem  $\pi/2$  Puls.

$$\begin{aligned} H|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \\ H|1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \end{aligned}$$

Was ist nun der Unterschied zum klassischen Computer? Beim Quantencomputer wirkt ein Algorithmus auch auf eine Überlagerung von sämtlichen Basiszuständen,  $\hat{U}$  kann alle

### 3 Quantenmechanik

$2^N$  Zustände auf einmal berechnen.

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{2^N} c_i |x_i\rangle \quad \rightarrow \quad \hat{U}|\Psi\rangle = \sum_i c_i \hat{U}|x_i\rangle$$

Das spart offensichtlich eine erhebliche Rechenzeit, denn anstelle von exponentiell vielen Rechnungen benötigt ein Quantencomputer nur eine einzige Operation.

Wie erzeugt man eine Überlagerung sämtlicher Basiszustände? Wir starten mit dem Grundzustand, der sich experimentell relativ leicht herstellen lässt, und wenden darauf die Hadamard-Abbildung auf jedes einzelne der  $N$  QBits an. Dann erhalten wir eine vollständige Überlagerung mit konstanten Koeffizienten:

$$H \otimes \dots \otimes H |0\rangle|0\rangle\dots|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \dots \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}^N} \sum_i |x_i\rangle$$

Unser modernes Verschlüsselungssystem basiert auf der Zahlentheorie. Große Zahlen lassen sich schnell miteinander multiplizieren aber je nach Länge der Zahl mit den gegenwärtigen Großrechnern nicht wieder faktorisieren. Vor einigen Jahren wurde ein Algorithmus für den Quantencomputer vorgestellt, der es erlaubt, große Zahlen relativ schnell zu faktorisieren. Ein Quantencomputer könnte also, falls er je existieren wird, unsere heutigen Verschlüsselungssysteme knacken.

Allerdings ist das auch fast der einzige Algorithmus, der bisher für Quantencomputer entwickelt wurde. Es gibt demnach noch viel Platz für die zukünftige Forschung: einerseits muss die Quantenmechanik großer Systeme stabilisiert und kontrolliert werden, andererseits müssen Algorithmen für Quantencomputer entwickelt werden.

#### 3.8.2 Vollständigkeit der Quantenmechanik

Die Schrödinger-Gleichung ist deterministisch: die Wellenfunktion des Anfangszustandes entwickelt sich entlang einer wohl definierten Bahn im Hilbertraum. Der Messprozess dagegen bringt ein stochastisches Element in die Quantenmechanik. Im Allgemeinen liefert eine Messung am selben Zustand eine Verteilung der Messergebnisse. Nach der Messung hat sich der Zustand geändert.

Gibt es eine Theorie, die Wahrscheinlichkeitsaussagen für Messergebnisse vermeidet? Einstein war überzeugt davon. Er glaubte, dass die Quantenmechanik unvollständig sei, dass es eine deterministische Gleichung für noch unbekannt verdeckte Variablen gäbe, die Messergebnisse mit Sicherheit bestimmen würden. Gott würfelt nicht, dieser Spruch wird Einstein zugeschrieben.

### 3 Quantenmechanik

Am Beispiel zweier verschränkter Spins wollen wir das Problem erläutern. Eine Quelle sendet zwei Teilchen mit jeweils einem Spin in entgegengesetzte Richtungen aus. Der Zustand der beiden Spins sei ein Singulett

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$$

Dabei haben wir die Abkürzung  $|+-\rangle = |+\rangle|-\rangle = |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle$  verwendet.

Alice und Bob messen nun gleichzeitig eine der drei Komponenten des Spins jeweils am linken und rechten Spin. Es gelten die folgenden Rechenregeln für die Paulimatrizen

$$\sigma_x|+\rangle = |-\rangle, \quad \sigma_x|-\rangle = |+\rangle, \quad \sigma_y|+\rangle = -i|-\rangle, \quad \sigma_y|-\rangle = i|+\rangle$$

Damit finden wir folgende Eigenschaft der beiden Messungen

$$\begin{aligned}\sigma_z^A \sigma_z^B |\Psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[(-1)|+-\rangle - (-1)|-+\rangle] = -|\Psi\rangle \\ \sigma_x^A \sigma_x^B |\Psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|-+\rangle - |+-\rangle] = -|\Psi\rangle \\ \sigma_y^A \sigma_y^B |\Psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[(-i)i|-+\rangle - (-i)i|+-\rangle] = -|\Psi\rangle\end{aligned}$$

Obwohl die einzelnen Messergebnisse mit der Wahrscheinlichkeit  $1/2$  die beiden Werte  $\pm 1$  ergeben, liefert das Produkt der Messungen immer den Wert  $-1$ , es gilt immer

$$m_z^A m_z^B = m_x^A m_x^B = m_y^A m_y^B = -1$$

Die Messergebnisse sind somit streng korreliert. Das widerspricht aber noch nicht der Existenz der versteckten Variablen, denn Einstein würde sagen, dass die Informationen  $m_x, m_y, m_z$  für jeden Spin schon bei der Erzeugung des Teilchenpaares vorhanden sei. Diese Eigenschaft wird **lokaler Realismus** genannt. Eine deterministische Gleichung für die versteckten Variablen würde die entsprechenden Werte liefern.

Es hat vier Jahrzehnte nach der Entwicklung der Quantenmechanik gebraucht, die Existenz versteckter Variablen zu widerlegen. 1964 hat John Bell für den Fall versteckter Variablen eine Ungleichung für die Korrelation der Messergebnisse gefunden, die von der Quantenmechanik widerlegt wurden.

Korrelationen erhält man erst durch zahlreiche Wiederholungen der Experimente. 15 Jahre später haben Greenberger, Horne und Zeilinger (GHZ)<sup>4</sup> ein Experiment vorgeschlagen, dass mit einer einzigen Messung die Existenz versteckter Variablen widerlegt.

<sup>4</sup>Fundamental Theories of Physics, Vol. 37, pp 69-72, Springer 1989

### 3 Quantenmechanik

Die Mathematik dazu ist recht einfach, denn man benötigt nur die Eigenschaften der Pauli-Matrizen für drei Spins. Aber es hat viele Jahrzehnte gedauert, bis die naturphilosophischen Konsequenzen dieser Eigenschaften verstanden wurden. Das entsprechende Experiment zur GHZ- Vorhersage wurde im Jahr 2000 durchgeführt<sup>5</sup>.

#### GHZ-Zustände

Eine Quelle sendet drei Teilchen in verschiedene Richtungen mit verschränkten Spins. Der Gesamtzustand der Spins sei

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+++ \rangle - |-- \rangle)$$



Nun wird bei allen drei Teilchen eine Spinkomponente gemessen, und zwar an einem Teilchen  $x$ -Komponente und gleichzeitig an den beiden anderen Teilchen  $y$ -Komponente. Es gibt somit drei verschiedene mögliche Messungen  $xyy, yxy, yyx$ . Das Messergebnis erhalten wir wie vorher aus dem Produkt der entsprechenden Pauli-Matrizen:

$$\sigma_x^1 \sigma_y^2 \sigma_y^3 |\Psi\rangle = (-i)^2 |-- \rangle - i^2 |+++ \rangle = |\Psi\rangle$$

Alle drei Messergebnisse sind somit streng korreliert, und ihr Produkt ergibt den Wert  $+1$ . Das gleiche gilt offensichtlich für die beiden anderen Messungen. Wenn die Messergebnisse schon vor der Messung vorliegen, wenn also lokaler Realismus existiert, so

---

<sup>5</sup>Jian-Wei Pan, Dik Bouwmeester, Matthew Daniell, Harald Weinfurter und Anton Zeilinger ,Nature 403, 515-519 (2000)

### 3 Quantenmechanik

erhalten wir

$$\begin{aligned}m_x^1 m_y^2 m_y^3 &= +1 \\m_y^1 m_x^2 m_y^3 &= +1 \\m_y^1 m_y^2 m_x^3 &= +1\end{aligned}$$

Wenn wir diese drei Zeilen miteinander multiplizieren, erhalten wir wegen  $m^2 = 1$

$$m_x^1 m_x^2 m_x^3 = +1$$

Die Existenz der versteckten Variablen sagt also voraus, dass bei gleichzeitiger Messung der  $x$ -Komponente das Produkt der Messwerte den Wert  $+1$  hat. Machen wir also das Experiment:

$$\sigma_x^1 \sigma_x^2 \sigma_x^3 |\Psi\rangle = |---\rangle - |+++ \rangle = -|\Psi\rangle \quad \Rightarrow \quad m_x^1 m_x^2 m_x^3 = -1$$

Die Gesetze der Quantenmechanik sagen uns, dass das Produkt der Komponenten der drei Spins immer den Wert  $-1$  hat, im Gegensatz zur obigen Herleitung. Das ist wirklich verblüffend: die Existenz der Messergebnisse ist im Widerspruch zur Quantenmechanik. Es gibt keine versteckten Variablen, Gott würfelt doch!