

Theoretische Physik

Band 7A

Walter Greiner
Joachim Reinhardt

Feldquantisierung



Verlag Harri Deutsch

Theoretische Physik
Band 7A
Walter Greiner / Joachim Reinhardt
Feldquantisierung

Verlag Deutscher

Walter Greiner

Theoretische Physik

Band 1: Mechanik, Teil 1

Band 2: Mechanik, Teil 2

Band 3: Elektrodynamik

Band 4: Quantenmechanik, Teil 1: Einführung

Band 5: Quantenmechanik, Teil 2: Symmetrien

Band 6: Relativistische Quantenmechanik, Wellengleichungen

Band 7: Quantenelektrodynamik

Band 8: Eichtheorie der schwachen Wechselwirkung

Band 9: Thermodynamik und Statistische Mechanik

Band 10: Quantenchromodynamik

Ergänzungsbände

Band 2A: Hydrodynamik

Band 3A: Spezielle Relativitätstheorie

Band 4A: Quantentheorie, Spezielle Kapitel

Band 7A: Feldquantisierung

In Vorbereitung:

Physik der Elementarteilchen, Theoretische Grundlagen

Modelle der Elementarteilchen

Kernmodelle

Quantenstatistik

Allgemeine Relativitätstheorie und Gravitation

Theoretische Physik

Band 7A

Walter Greiner
Joachim Reinhardt

Feldquantisierung

Ein Lehr- und Übungsbuch

Mit zahlreichen Abbildungen, Beispielen
und Aufgaben mit ausführlichen Lösungen

1. Auflage 1993



Verlag Harri Deutsch

Professor Dr. rer. nat. Dr. h. c. mult. Walter Greiner ist Direktor des Instituts für Theoretische Physik der Universität Frankfurt am Main
Dr. phil. nat. Joachim Reinhardt ist Akademischer Oberrat am Institut für Theoretische Physik der Universität Frankfurt am Main

Die Deutsche Bibliothek – CIP-Einheitsaufnahme

Theoretische Physik. – Thun ; Frankfurt am Main : Deutsch
Bd. 7a. Greiner, Walter: Feldquantisierung. – 1993

Greiner, Walter:

Feldquantisierung / Walter Greiner ; Joachim Reinhardt. –
Thun ; Frankfurt am Main : Deutsch, 1993

(Theoretische Physik ; Bd. 7a)

ISBN 3-87144-975-X

NE: Reinhardt, Joachim:

ISBN 3-87144-975-X

1. Auflage 1993

© 1993 Verlag Harri Deutsch · Thun und Frankfurt am Main

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt.

Alle Rechte, auch die der Übersetzung, des Nachdrucks und der Vervielfältigung des Buches – oder von Teilen daraus – sind vorbehalten.

Kein Teil des Werkes darf ohne schriftliche Genehmigung des Verlages in irgendeiner Form (Fotokopie, Mikrofilm oder ein anderes Verfahren), auch nicht für Zwecke der Unterrichtsgestaltung, reproduziert oder unter Verwendung elektronischer Systeme verarbeitet werden. Zuwiderhandlungen unterliegen den Strafbestimmungen des Urheberrechtsgesetzes.

Vorwort

Die Theoretische Physik ist eine umfangreiche, breit gefächerte Wissenschaft geworden. Es ist für den jungen Studenten schwer, vor der Fülle des zu Erlernenden nicht zurückzuschrecken und sich vielmehr systematisch einen Überblick über das weite Feld von der Mechanik über die Elektrodynamik, die Quantentheorie, Feldtheorie, Kern- und Schwerionenphysik, Thermodynamik und Statistische Mechanik, Festkörperphysik, bis hin zur Physik der Elementarteilchen zu verschaffen.

Das alles soll außerdem in acht bis zehn Semestern einschließlich einer ordentlichen Diplomarbeit geschafft werden. Dies ist nur möglich, wenn die akademischen Lehrer mithelfen, die Studenten frühzeitig in die neuen Disziplinen einzuweihen; Interesse und Begeisterung zu wecken, wodurch wichtige zusätzliche Energien frei werden.

An der Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main haben wir daher schon seit 1965 die Theoretische Physik in das 1. Studiensemester vorverlegt. Darum werden die Mechanik 1 und 2, die Elektrodynamik, die Einführung in die Quantentheorie in einem Grundkurs vor dem Vordiplom in Verbindung mit vielen mathematischen Erläuterungen und Ergänzungen gelehrt. Nach dem 4. Semester sind Quantentheorie 2, Thermodynamik und Statistische Mechanik, Relativistische Quantentheorie und Quantenelektrodynamik (Einführung in die Quantenfeldtheorie) Pflichtvorlesungen. Neben diesem Grundkurs durch die Theoretische Physik werden eine ganze Reihe Ergänzungen und Spezialvorlesungen regelmäßig angeboten. Dazu gehören beispielsweise die Hydrodynamik, klassische Feldtheorie, Theoretische Optik, Theorie der Streuprozesse, Allgemeine Relativitätstheorie, Theorie der schwachen Wechselwirkung, Theorie der Elementarteilchen usw. Einige davon wie z. B. die zweisemestrigen Vorlesungen über Theoretische Kernphysik bzw. Theoretische Festkörperphysik gehören auch zu den Pflichten für das Diplom in Physik.

Der vorliegende Band der Vorlesungen befaßt sich mit der Feldquantisierung, also einem etwas spezielleren Thema, das nichtsdestoweniger das Herzstück vieler Entwicklungen in der Theoretischen Physik bildet. Die Erkenntnis, daß eine klassische Feldtheorie, nämlich die Elektrodynamik, um korpuskulare und nichtdeterministische Eigenschaften erweitert werden muß, stand an der Wiege der Quantentheorie. Etwa um 1930 wurde erkannt, daß nicht nur das Strahlungsfeld mit seinen Photonen, sondern auch alle Materiefelder einheitlich der „zweiten Quantisierung“ zu unterwerfen sind. Die Materie wird dabei durch operatorwertige Felder beschrieben, die bestimmte Kommutationsrelationen erfüllen. Dies führt auf eine Theorie für Systeme von mehreren Teilchen (Feldquanten) und erlaubt es auf natürliche Weise, die Erzeugung und Vernichtung von Teilchen zu beschreiben. Dies Quantenfeldtheorie ist die Sprache der modernen Theoretischen Physik. Nicht nur die Hochenergie- und Elementarteilchenphysik, sondern auch die Vielteilchentheorie, also etwa die Festkörper-, Kern- und Atomphysik machen von quantenfeldtheoretischen Methoden Gebrauch.

Das Ziel des vorliegenden Bands ist es, die Methoden der Feldquantisierung selbst, also ohne Hinblick auf spezielle Anwendungen, zu vermitteln. Entstanden ist dieses Buch als Begleiter des Bands 7 dieser Reihe (Quantenelektrodynamik), in dem das Schwergewicht auf der konkreten Berechnung physikalischer Prozesse lag, ohne daß näher auf die feldtheoretischen Grundlagen eingegangen wurde. Der Stoff dieses Bandes ist jedoch weitgehend in sich abgeschlossen, so daß die Kenntnis der Quantenelektrodynamik keine Voraussetzung für die Lektüre bildet. Vorausgesetzt werden jedoch Kenntnisse der (nichtrelativistischen und relativistischen) Quantenmechanik.

Zur Einleitung und Wiederholung befassen wir uns zunächst in den ersten beiden Kapiteln mit der klassischen und quantenmechanischen Beschreibung schwingender Systeme und mit der klassischen Feldtheorie, insbesondere den Symmetrien und Erhaltungsgrößen. Im Hauptteil werden nacheinander das freie nichtrelativistische Schrödinger-Feld und die freien relativistischen Felder mit Spin 0, Spin $\frac{1}{2}$ und Spin 1 der „kanonischen Quantisierung“ unterworfen und ausführlich untersucht. Die nächsten beiden Kapitel befassen sich mit der Wechselwirkung zwischen Quantenfeldern und beschreiben, wie man mit den Mitteln der Störungstheorie physikalische Observable, insbesondere die Streumatrix, systematisch berechnen kann. Dies wird ergänzt durch ein Kapitel über diskrete Symmetrietransformationen, die bei der Entwicklung und Untersuchung von Elementarteilchenmodellen eine große Rolle spielen.

Der letzte Teil des Buchs enthält die Beschreibung eines Formalismus, der in Konkurrenz zur „klassischen“ Technik der kanonischen Quantisierung steht, nämlich der Methode der Pfadintegration. Obwohl im Prinzip äquivalent zur kanonischen Methode, erfreut sich die Pfadintegral-Quantisierung steigender Beliebtheit. Neben ihrer formalen Eleganz besteht der Hauptgrund dafür in der Flexibilität beim Einbau von Zwangsbedingungen, wie sie bei der Beschreibung von Eichtheorien auftreten. Es ist heute unumgänglich, beide Zugänge zur Feldquantisierung zu kennen.

Wie schon erwähnt liegt das Hauptaugenmerk dieser Vorlesung auf einer detaillierten Beschreibung der Methoden der Feldquantisierung selbst, nicht auf deren Anwendung. Die Vorlesung ist so gehalten wie die anderen Grundvorlesungen auch: Zusammen mit ausführlichen Erläuterungen des notwendigen mathematischen Werkzeugs, vielen Beispielen und durchgerechneten Aufgaben, versuchen wir den Stoff so klar und interessant wie möglich darzustellen.

Die Behandlung eines wichtigen Bereichs der Quantenfeldtheorie, nämlich der Theorie der Renormierung, geht über den Rahmen dieses Bandes hinaus. Dies ist einem weiteren Band der Reihe vorbehalten, in dem dieses Thema im Zusammenhang mit den für die moderne Teilchenphysik grundlegenden nichtabelschen Eichtheorien behandelt wird.¹

Unser besonderer Dank gilt Herrn Dipl. Phys. Christian Hofmann, der das Manuskript sorgfältig (und hoffentlich erfolgreich) auf Fehler überprüfte und viele Verbesserungs-

¹W. Greiner und A. Schäfer: *Eichtheorie*, in Vorbereitung.

vorschläge machte. Wir bemühen uns, das Layout aller Bände dieser Reihe einheitlich zu gestalten. Dabei gilt unser Dank den Herren Dipl.-Phys. Ch. Best, K. Griepenkerl und M. Vidović, die zu diesem Zweck eine neue L^AT_EX-Umgebung erstellten. Ein besonderer Dank gebührt auch Frau Astrid Steidl, die einen großen Teil der Zeichnungen anfertigte.

Frankfurt am Main, im August 1992

Walter Greiner

Joachim Reinhardt

Inhaltsverzeichnis

I. Vielteilchensysteme und klassische Feldtheorie

1. Klassische und Quantenmechanik von Teilchensystemen	3
Einleitung	3
Klassische Mechanik von Massenpunkten	4
Quantenmechanik – Der harmonische Oszillator	6
Die lineare Kette (klassisch)	12
Die lineare Kette (quantenmechanisch)	21
2. Klassische Feldtheorie	35
Die Hamiltonsche Formulierung	39
Mathematische Ergänzung: Die Funktionalableitung	42
Erhaltungssätze in der klassischen Feldtheorie	45
Die Generatoren der Poincaré-Gruppe	57

II. Kanonische Quantisierung

3. Nichtrelativistische Quantenfeldtheorie: Das Schrödinger-Feld	65
Quantisierungsregeln für Bose-Teilchen	66
Quantisierungsregeln für Fermi-Teilchen	75
4. Spin-0-Felder: Die Klein-Gordon-Gleichung	86
Das neutrale Klein-Gordon-Feld	86
Das geladene Klein-Gordon-Feld	105
Symmetrietransformationen	110
Die invarianten Kommutationsrelationen	115
Der skalare Feynman-Propagator	123
Ergänzung: Die Δ -Funktionen	127
5. Spin-$\frac{1}{2}$-Felder: Die Dirac-Gleichung	134
Kanonische Quantisierung des Dirac-Felds	141
Entwicklung des Feldoperators nach ebenen Wellen	142
Der Feynman-Propagator für Dirac-Felder	152

6. Spin-1-Felder: Die Maxwell- und Proca-Gleichungen	162
Die Maxwell-Gleichungen	162
Proca-Gleichung	175
Entwicklung des Vektorfelds nach ebenen Wellen	177
Kanonische Quantisierung des massiven Vektorfelds	182
7. Quantisierung des Photonensfelds	197
Das elektromagnetische Feld in Lorentz-Eichung	198
Kanonische Quantisierung in Lorentz-Eichung	203
Die Gupta-Bleuler-Methode	208
Der Feynman-Propagator für Photonen	214
Ergänzung: Einfache Herleitung von Propagatoren	217
Kanonische Quantisierung des elektromagnetischen Felds in Coulomb-Eichung	227
8. Wechselwirkende Quantenfelder	243
Das Wechselwirkungsbild	243
Der Zeitentwicklungsoperator	248
Die Streumatrix	253
Zerlegung in Normalform: Das Wick'sche Theorem	260
Die Feynman-Regeln der Quantenelektrodynamik	270
Anhang: Der Streuquerschnitt	308
9. Der Reduktionsformalismus	309
In- und Out-Felder	310
Die Lehmann-Källén-Spektraldarstellung	320
Die LSZ-Reduktionsformel	326
Störungstheorie für die n -Punkt-Funktion	335
10. Diskrete Symmetrietransformationen	345
Skalare Felder	346
Dirac-Felder	358
Das elektromagnetische Feld	367
Die Invarianz der S -Matrix	373
Das CPT -Theorem	377

III. Pfadintegral-Quantisierung

11. Die Pfadintegral-Methode	389
Pfadintegrale in der nichtrelativistischen Quantenmechanik	390
Feynmans Form des Pfadintegrals	396
Das Pfadintegral in mehreren Dimensionen	404
Zeitgeordnetes Produkt und n -Punkt-Funktion	411
Die Vakuum-Persistenz-Amplitude $W[J]$	416
12. Pfadintegrale in der Feldtheorie	421
Das Pfadintegral für skalare Quantenfelder	421
Feldtheorie im Euklidischen	428
Der Feynman-Propagator	433
Erzeugendes Funktional und Greensche Funktionen	440
Erzeugendes Funktional für wechselwirkende Felder	445
Greensche Funktion im Impulsraum	453
Ein-Teilchen-irreduzible Graphen und die effektive Wirkung.....	464
Pfadintegrale für Fermionenfelder	473
Erzeugendes Funktional und Greensfunktion für Fermionenfelder.....	486
Erzeugendes Funktional und Feynman-Propagator für freie Dirac-Felder ...	489

Aufgaben und Beispiele

1.1 Aufgabe:	Normalkoordinaten	18
1.2 Beispiel:	Die lineare Kette im äußeren Kraftfeld	24
1.3 Aufgabe:	Die Baker–Campbell–Hausdorff–Relation	32
2.1 Beispiel:	Die Symmetrisierung des Energie-Impuls-Tensors	55
2.2 Aufgabe:	Poincaré-Algebra für klassische Felder	60
3.1 Aufgabe:	Normierung von Fockraum-Zuständen	78
3.2 Beispiel:	Wechselwirkende Teilchensysteme - Die Hartree-Fock-Näherung	79
4.1 Aufgabe:	Kommutationsrelationen für Erzeuger und Vernichter	96
4.2 Aufgabe:	Die Kommutationsrelationen für den Drehimpulsoperator	98
4.3 Aufgabe:	Der Feldoperator in sphärischer Darstellung	100
4.4 Aufgabe:	Ladung eines Zustands	109
4.5 Aufgabe:	Kommutationsrelationen des Feldoperators mit den Generatoren	114
4.6 Aufgabe:	$\Delta_1(x - y)$ für gleiche Zeiten	122
5.1 Aufgabe:	Die symmetrisierte Dirac-Lagrangedichte	139
5.2 Aufgabe:	Der symmetrisierte Stromoperator	154
5.3 Aufgabe:	Der Impulsoperator	156
5.4 Aufgabe:	Helizitätszustände	157
5.5 Aufgabe:	Allgemeine Kommutationsrelationen und Mikrokausalität	159
6.1 Aufgabe:	Die Lagrange-Funktion des Maxwell-Feldes	172
6.2 Aufgabe:	Gekoppelte Maxwell- und Dirac-Felder	174
6.3 Beispiel:	Die Fourier-Zerlegung des Proca-Feldoperators	185
6.4 Aufgabe:	Invariante Kommutationsrelationen und Feynman-Propagator des Proca-Felds	192
7.1 Aufgabe:	Energiedichte des Photonenfelds in Lorentz-Eichung	201
7.2 Aufgabe:	Eichtransformationen und Pseudophotonen-Zustände	212
7.3 Aufgabe:	Der Feynman-Propagator für beliebige Werte des Eichparameters ζ	219
7.4 Aufgabe:	Die transversale Deltafunktion	234
7.5 Aufgabe:	Allgemeine Kommutationsrelationen des elektromagnetischen Felds	237
8.1 Beispiel:	Das Gell-Mann-Low-Theorem	254

8.2 Aufgabe:	Beweis des Wickschen Theorems	267
8.3 Aufgabe:	Unverbundene Vakuumgraphen	281
8.4 Beispiel:	Møller-Streuung und Compton-Streuung	283
8.5 Aufgabe:	Die Feynman-Graphen der Photon-Photon-Streuung	288
8.6 Beispiel:	Die skalare Elektrodynamik	289
8.7 Beispiel:	Die ϕ^4 -Theorie	301
9.1 Aufgabe:	Herleitung der Yang-Feldman-Gleichung	318
9.2 Aufgabe:	Die Reduktionsformel für Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen	332
9.3 Aufgabe:	Die Bewegungsgleichung des Operators $\hat{U}(t)$	339
9.4 Beispiel:	Die S -Matrix der ϕ^4 -Theorie	340
10.1 Aufgabe:	Die Operatoren $\hat{\mathcal{P}}$ und $\hat{\mathcal{C}}$ für skalare Felder	356
10.2 Beispiel:	Klassifikation der Positronium-Zustände	370
10.3 Aufgabe:	Transformation der bilinearen Kovarianten	381
10.4 Beispiel:	Der Zusammenhang zwischen Teilchen und Antiteilchen	383
11.1 Aufgabe:	Das Pfadintegral für die Propagation eines freien Teilchens	398
11.2 Beispiel:	Die Weyl-Ordnung von Operatoren	401
11.3 Aufgabe:	Gaußsche Integrale in D Dimensionen	408
12.1 Aufgabe:	Konstruktion des Pfadintegrals in der Feldtheorie	425
12.2 Aufgabe:	Reihenentwicklung des erzeugenden Funktionals	447
12.3 Aufgabe:	Differentialgleichung für $W[J]$	449
12.4 Beispiel:	Die Störungsreihe der ϕ^4 -Theorie	455
12.5 Aufgabe:	Zusammenhängende Greensfunktionen	461
12.6 Aufgabe:	Grassmann-Integration	483
12.7 Beispiel:	Die Yukawa-Kopplung	492

Kapitel I

Klassische und Quantenmechanik
von Teilchen und Feldern

1.1 Einleitung

Teil I

Vielteilchensysteme und klassische Feldtheorie

Kapitel 1

Klassische und Quantenmechanik von Teilchensystemen

1.1 Einleitung

Gegenstand dieser Vorlesungen ist die quantentheoretische Behandlung von Systemen, die durch eine *Feldtheorie* beschrieben werden. Ausgehend von den Vorstellungen der klassischen Physik mag man beim Begriff des Felds zunächst an makroskopische Größen denken, wie zum Beispiel Strömungs- oder Temperaturfelder usw. Solche Felder interessieren uns hier jedoch nicht, denn sie sind abgeleitete Größen, die durch Mittelung über mikroskopische Teilchendichten etc. entstehen. Auf einem fundamentalen mikroskopischen Niveau wird die Materie jedoch ebenfalls durch Felder beschrieben: Hier ist es die *quantenmechanische Wellenfunktion* $\psi(\vec{x}, t)$, aus der die Dynamik aller Observablen eines Systems abgeleitet werden kann. In der Quantenmechanik ist die Wellenfunktion als ein gewöhnliches zahlenwertiges Feld (in Diracs Terminologie eine „c-Zahl“). Die Quantenfeldtheorie geht einen Schritt weiter und betrachtet die Wellenfunktion selbst als eine zu quantisierende Größe. Das heißt: Die Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ wird zu einem *Feldoperator* $\hat{\psi}(\vec{x}, t)$, für den gewisse Kommutationsbeziehungen gefordert werden. Diese sogenannte „zweite Quantisierung“ steht in Analogie zum Vorgehen in der gewöhnlichen Quantenmechanik, wo aus einem Satz von klassischen Koordinaten q_i quantenmechanische Operatoren \hat{q}_i werden. Ein technischer Unterschied besteht allerdings darin, daß es sich bei $\psi(\vec{x}, t)$ um ein Feld handelt, also um eine Größe, die von den Koordinaten als „kontinuierlichen Indizes“ abhängt, im Gegensatz zu dem diskreten Index von q_i .

Die Idee der Feldquantisierung hat weitreichende Konsequenzen; sie ist aus der modernen Physik nicht wegzudenken. Zunächst liefert sie eine elegante Sprache zur quantenmechanischen Beschreibung von Teilchensystemen. Wichtiger noch ist, daß die Feldquantisierung in natürlicher Weise zu der Erkenntnis führt, daß Feldquanten *erzeugt und vernichtet* werden können. Hierbei kann es sich um Elementarteilchen handeln (in der Hochenergiephysik) oder auch um Quasiteilchen, d.h. kollektive Anregungen in einem makroskopischen (z.B. Phononen in der Festkörperphysik) oder mikroskopischen (z.B. Schwingungen in der Kernphysik) Systemen. Natürlich gehört auch die Emission und Absorption von Lichtquanten, also von Photonen, zu diesen Prozessen. Tatsächlich war es das elektromagnetische Feld, bei dem am frühesten die

Notwendigkeit einer Feldquantisierung erkannt wurde.

Nach den Regeln der Quantentheorie unterliegen die Felder *Fluktuationen*, die sich sogar im Vakuum, also bei Abwesenheit von reellen Teilchen bemerkbar machen können. Die Beschreibung der Effekte solcher Vakuumfluktuationen in wechselwirkenden Systemen ist von zentraler Bedeutung in der Quantenfeldtheorie. In dieser Vorlesung werden wir darauf und auf das damit eng verbundene Thema der Renormierung allerdings nur wenig eingehen. Unser Hauptthema ist der Übergang von klassischen zu Quantenfeldern.

Im folgenden ersten Kapitel werden wir zur Vorbereitung kurz an den Formalismus der klassischen Mechanik für Punktteilchen erinnern. Anschließend erwähnen wir das Verfahren zur Quantisierung solcher Systeme, speziell am Beispiel des harmonischen Oszillators. Schließlich wird ein System von harmonisch gekoppelten Massenpunkten (die schwingende Kette) diskutiert. Im Kontinuumslimit liefert dies ein Modell für eine einfache Feldtheorie.

1.2 Klassische Mechanik von Massenpunkten

In stark geraffter Form sollen hier die Grundgleichungen der Punktmechanik zusammengestellt werden¹. Wir betrachten ein strukturloses Teilchen der Masse m in einer Dimension, welches sich unter dem Einfluß eines zeitunabhängigen Potentials $V(q)$ bewegt. Die Zeitentwicklung der Trajektorie $q(t)$ wird durch die Newtonsche Bewegungsgleichung

$$m\ddot{q} = -\frac{\partial V}{\partial q} \quad (1.1)$$

mit gewissen Anfangsbedingungen $q(t_0)$ und $\dot{q}(t_0)$ bestimmt. Eine alternative und flexiblere formale Beschreibung erhält man mit Hilfe der Lagrange-Funktion

$$L(q, \dot{q}) = T - V = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - V(q) \quad (1.2)$$

und der daraus gewonnenen Wirkung

$$W = \int_{t_0}^{t_1} d\tau L(q(\tau), \dot{q}(\tau)) . \quad (1.3)$$

Die Bewegungsgleichung kann man dann aus einem Variationsproblem ableiten, nämlich dem Hamiltonschen Prinzip der extremalen Wirkung. Das Teilchen wird

¹Vergleiche Greiner, Mechanik, Band 1,2 dieses Kurses

derjenigen Bahn folgen, für welche die Wirkung unter Variation einen stationären Wert annimmt

$$\delta W = 0. \quad (1.4)$$

Variiert werden $q(t)$ und $\dot{q}(t)$ mit der Randbedingung $\delta q(t_0) = \delta q(t_1) = 0$. Die Variationsrechnung liefert daraus eine Bestimmungsgleichung für die Trajektorie $q(t)$ in Form der Differentialgleichung von Euler und Lagrange

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0, \quad (1.5)$$

was wegen der Lagrange-Funktion (2) genau mit Newtons Gleichung übereinstimmt.

Eine weitere äquivalente Formulierung ergibt sich, wenn man den kanonisch konjugierten Impuls

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \quad (1.6)$$

als unabhängige Variable anstelle der Geschwindigkeit \dot{q} einführt. Mittels einer Legendre-Transformation geht man von dem Variablenpaar (q, \dot{q}) zu (q, p) über. Dazu wird die Hamilton-Funktion

$$H(q, p) = p \dot{q}(p) - L(q, \dot{q}(p)) \quad (1.7)$$

definiert. Die Bewegung des Partikels wird dann durch ein System von zwei gekoppelten Differentialgleichungen erster Ordnung

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad (1.8a)$$

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (1.8b)$$

bestimmt. Diese Hamiltonschen Bewegungsgleichungen sind wiederum zur Newtonschen Gleichung äquivalent (aber allgemeiner als diese).

Abschließend erinnern wir noch an die Formulierung mittels Poissonklammern. Die Poissonklammern zweier dynamischer, d.h. von p und q abhängiger Größen $A(p, q)$ und $B(p, q)$ sind definiert durch

$$\{A, B\}_{\text{PK}} = \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial q}. \quad (1.9)$$

Mit den Hamiltongleichungen (8) erkennt man, daß sich die Zeitableitung einer dynamischen Größe durch deren Poissonklammer mit der Hamilton-Funktion ausdrücken läßt

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial p} \dot{p} + \frac{\partial A}{\partial q} \dot{q} = \frac{\partial A}{\partial t} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} \\ &= \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\}_{\text{PK}}. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Insbesondere ist die Hamilton-Funktion selbst eine Erhaltungsgröße, wenn keine explizite Zeitabhängigkeit im Potential (oder gegebenenfalls der Masse) auftritt

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} + \{H, H\}_{\text{PK}} = \frac{\partial H}{\partial t}. \quad (1.11)$$

Die Poissonklammern der Koordinaten untereinander sind mit (1.9)

$$\{p, p\}_{\text{PK}} = \{q, q\}_{\text{PK}} = 0, \quad (1.12a)$$

$$\{q, p\}_{\text{PK}} = 1. \quad (1.12b)$$

Alle Gleichungen dieses Abschnitts lassen sich problemlos auf Systeme mit mehreren (zunächst endlich vielen) Freiheitsgraden erweitern. Aus q und p werden dann mehrkomponentige „Vektoren“ $q_i, p_i, i = 1, \dots, N$, und die Bewegungsgleichungen enthalten entsprechende Indizes. Über wiederholte Indizes ist zu summieren.

Die Methoden von Lagrange und Hamilton bieten eine elegante und flexible Beschreibung dynamischer Systeme. Sie lassen sich für beliebige Sätze von generalisierten Koordinaten q_i anwenden, es muß nur die Lagrange- bzw. Hamilton-Funktion bekannt sein. Auch der Übergang zwischen verschiedenen Koordinaten läßt sich durch kanonische Transformationen elegant formulieren.

1.3 Quantenmechanik – Der harmonische Oszillator

Von der klassischen zur quantenmechanischen Beschreibung eines Systems kann man gelangen, indem man von den klassischen zahlenwertigen dynamischen Variablen zu linearen Operatoren in einem Hilbertraum übergeht. Im bisher betrachteten eindimensionalen Fall wird also ersetzt $q \rightarrow \hat{q}$ und $p \rightarrow \hat{p}$. Quantenmechanische Operatoren kommutieren im allgemeinen nicht miteinander. Den Kommutationsrest zweier Operatoren $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ kann man durch folgendes Postulat aus den klassischen Poissonklammern (1.9) erhalten

$$\{A, B\}_{\text{PK}} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}]. \quad (1.13)$$

Für die Orts- und Impulsoperatoren bedeutet dies nach (1.12) Heisenbergs fundamentale Quantisierungsbedingung

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar, \quad (1.14)$$

wobei auf der rechten Seite der Einheitsoperator $\hat{1}$ hinzuzudenken ist. Ein Zustand des Quantensystems wird durch einen Vektor im Hilbertraum beschrieben; in Diracs Notation handelt es sich um einen ket-Vektor $|\Psi\rangle$. Es gilt das Superpositionsprinzip. Passend zum Raum der Vektoren $|\Psi\rangle$ wird ein dualer Vektorraum von adjungierten Vektoren (bra-Vektoren $\langle\Phi|$) konstruiert. Der Überlapp zweier Vektoren $\langle\Phi|\Psi\rangle$ ist eine komplexe Zahl und besitzt die üblichen Eigenschaften eines Skalarprodukts:

$$\begin{aligned} \langle\Phi|\alpha\Psi_1 + \beta\Psi_2\rangle &= \alpha\langle\Phi|\Psi_1\rangle + \beta\langle\Phi|\Psi_2\rangle \\ \langle\Phi|\Psi\rangle^* &= \langle\Psi|\Phi\rangle \\ \langle\Phi|\Phi\rangle = 0 &\leftrightarrow |\Phi\rangle = 0. \end{aligned}$$

Gemäß der probabilistischen Natur der Quantenmechanik bedeutet das Betragsquadrat $|\langle\Phi|\Psi\rangle|^2$ die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein im Zustand $|\Psi\rangle$ präpariertes System im Zustand $|\Phi\rangle$ angetroffen wird. Meßbaren Größen werden Operatoren \hat{O} zugeordnet. Diese observablen Operatoren müssen hermitesch (selbstadjungiert²) sein, d.h. der durch

$$\langle\Phi|\hat{O}^\dagger\Psi\rangle = \langle\hat{O}\Phi|\Psi\rangle \quad (1.15)$$

definierte hermitesch adjungierte Operator \hat{O}^\dagger muß mit \hat{O} übereinstimmen. Dies stellt sicher, daß die Meßwerte reelle Zahlen sind.

Der statistische Mittelwert einer Meßgröße wird durch den Erwartungswert des zugehörigen Operators in einem Quantenzustand beschrieben

$$O = \langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle. \quad (1.16)$$

Bei häufiger Wiederholung einer solchen Messung (in einem Ensemble von identisch präparierten Systemen) werden die Meßwerte eine statistische Schwankung aufweisen, die durch

$$(\Delta O)^2 = \langle\Psi|(\hat{O} - O)^2|\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{O}^2|\Psi\rangle - \langle\Psi|\hat{O}|\Psi\rangle^2 \quad (1.17)$$

²Die für die Gleichsetzung dieser Begriffe wichtige mathematische Frage des Definitionsbereichs der Operatoren soll hier nicht betrachtet werden.

gegeben ist. Die Schwankung verschwindet (d.h. der Meßwert ist scharf definiert), wenn $|\Psi\rangle$ ein Eigenzustand

$$\hat{O}|\Psi\rangle = O|\Psi\rangle \quad (1.18)$$

des Operators \hat{O} mit dem Eigenwert O ist. $|\Psi\rangle$ kann nicht gleichzeitig Eigenzustand zweier nicht miteinander kommutierender Operatoren \hat{A}, \hat{B} sein. In diesem Fall gilt die Unschärferelation

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \Psi \rangle|, \quad (1.19)$$

und speziell für Orts- und Impulsvariable

$$\Delta p \Delta q \geq \frac{1}{2} \hbar. \quad (1.20)$$

Die Eigenzustände eines selbstadjungierten Operators bilden eine Basis des Hilbertraums, d.h. jeder Vektor läßt sich nach diesem Satz entwickeln. Hierbei treten eine Summe über die diskreten Eigenzustände und ein Integral über das kontinuierliche Spektrum auf.

Die Eigenzustände des Ortsoperators beschreiben ein Teilchen, das sich an einem bestimmten Punkt aufhält

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle. \quad (1.21)$$

Dementsprechend verschwindet der Überlapp mit einem an anderer Stelle lokalisierten Zustand. Man normiert „auf Deltafunktion“

$$\langle q'|q\rangle = \delta(q - q'). \quad (1.22)$$

Weiterhin gilt die Vollständigkeitsrelation

$$1 = \int dq |q\rangle \langle q|. \quad (1.23)$$

Durch Projektion eines Zustandsvektors $|\Psi\rangle$ auf Orts-Eigenzustände erhält man die Schrödinger-Wellenfunktion in Ortsdarstellung

$$\psi(q) = \langle q | \Psi \rangle. \quad (1.24)$$