

Theoretische Physik II  
für Lehramtskandidaten und Studenten mit  
Wahlfach Physik  
- Skriptum zur Vorlesung -

Prof. Dr. H.-J. Kull

Fraunhofer Institut für Lasertechnik  
und  
Lehr- und Forschungsgebiet Laserphysik  
Institut für Theoretische Physik A  
Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule  
Aachen

6. März 2002

# Vorbemerkungen

## Voraussetzungen und Zielsetzungen:

Die Vorlesung wendet sich an Lehramtskandidaten nach der Zwischenprüfung und an Studenten mit dem Wahlfach Physik. Vorausgesetzt werden Grundkenntnisse in Analysis (Differential- und Integralrechnung) und in linearer Algebra (Vektor- und Tensorrechnung). Die Vorlesung umfaßt eine Einführung in die klassische Elektrodynamik und die Quantenmechanik. Dabei sollen eine systematische Orientierung geboten, methodische Vorgehensweisen erlernt und grundlegende physikalische Inhalte vermittelt werden.

**Skriptum zur Vorlesung:** Das Skriptum ist im Kopierraum der Bibliothek der Physikalischen Institute und im Internet unter

<http://llp.ilt.fhg.de>

zugänglich. Ausdrücke sind auf eigene Kosten vorzunehmen.

**Literaturhinweise:** Begleitend zur Vorlesung werden folgende Lehrbücher empfohlen:

1. T. Fließbach: Elektrodynamik u. Quantenmechanik (Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 1995-1997)
2. Feynman Lectures on Physics II u. III (Addison-Wesley, New York, 1963)
3. L.D. Landau, E.M. Lifschitz: Lehrbuch der Theoretischen Physik II, III u. VIII (Akademie-Verlag, Berlin, 1981)
4. J.J. Sakurai: Modern Quantum Mechanics (Addison-Wesley, New York, 1994)
5. J.D. Jackson: Classical Electrodynamics (John Wiley, New York, 1962)
6. S. Großmann: Mathematischer Einführungskurs für die Physik (Teubner Studienbücher Physik, Stuttgart, 1991)

Tabelle 1: Physikalische Konstanten

---

Gravitationskonstante	$G = 6.67 \times 10^{-11} \text{ m}^3/\text{kg s}^2$
Fallbeschleunigung	$g = 9.81 \text{ m/s}^2$ (bei 50 Grad geogr. Breite)
Erdradius	$r_{\text{Äquator}} = 6378 \text{ km}$
Erdmasse	$m_{\text{Erde}} = 5,97 \times 10^{24} \text{ kg}$
Sonnenradius	$r_{\text{Sonne}} = 695300 \text{ km}$
Sonnenmasse	$m_{\text{Sonne}} = 1,99 \times 10^{30} \text{ kg}$
Lichtgeschwindigkeit	$c = 2.997(9) \times 10^8 \text{ m/sec}$
Elektrische Feldkonstante	$\epsilon_0 = 10^7/(4\pi c^2) = 8.854(1) \times 10^{-12} \text{ Asec}/(\text{Vm})$
Magnetische Feldkonstante	$\mu_0 = 1/(\epsilon_0 c^2) = 4\pi \times 10^{-7} = 1.256(6) \times 10^{-6} \text{ Vsec}/(\text{Am})$
Elektrische Elementarladung	$e = 1.602(1) \times 10^{-19} \text{ As}$
Elektronenruhemasse	$m_e = 9.109(5) \times 10^{-31} \text{ kg}$
Protonenruhemasse	$m_p = 1.672(6) \times 10^{-27} \text{ kg}$
Boltzmann-Konstante	$k_B = 1.380(6) \times 10^{-23} \text{ J/K}$
Stefan-Boltzmann-Konstante	$\sigma = 5.670(5) \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{K}^4\text{m}^2)$
Plancksches Wirkungsquantum	$h = 6.626(1) \times 10^{-34} = 2\pi \cdot 1.054(5) \times 10^{-34} \text{ Jsec}$
Bohrscher Radius	$a_0 = 0.529(1) \times 10^{-10} \text{ m}$

---

Tabelle 2: Zehnerpotenzen

---

$10^{-3}$	Milli (m)	$10^3$	Kilo (k)
$10^{-6}$	Mikro ( $\mu$ )	$10^6$	Mega (M)
$10^{-9}$	Nano (n)	$10^9$	Giga (G)
$10^{-12}$	Piko (p)	$10^{12}$	Tera (T)
$10^{-15}$	Femto (f)	$10^{15}$	Peta (P)

---

# Inhaltsverzeichnis

<b>I</b>	<b>Elektrodynamik</b>	<b>1</b>
<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>2</b>
1.1	Elektrische Ladungen . . . . .	3
1.2	Elektrische und magnetische Felder . . . . .	3
1.3	Ladungs- und Stromdichte . . . . .	6
1.4	Maxwell-Gleichungen . . . . .	8
1.5	Einheitensysteme . . . . .	9
<b>2</b>	<b>Vektoranalysis</b>	<b>11</b>
2.1	Vektoren . . . . .	11
2.2	Differentiation von Vektorfeldern . . . . .	14
2.3	Integration von Vektorfeldern . . . . .	17
2.3.1	Gradient . . . . .	17
2.3.2	Divergenz . . . . .	18
2.3.3	Rotation . . . . .	20
2.4	Potentiale von Vektorfeldern . . . . .	22
2.4.1	Randwertprobleme . . . . .	22
2.4.2	Helmholtz'scher Hauptsatz der Vektoranalysis . . . . .	23
2.4.3	Wirbelfreie Vektorfelder: . . . . .	24
2.4.4	Quellenfreie Vektorfelder . . . . .	27
2.5	Taylor-Reihe einer Funktion mit mehreren unabhängigen Variablen . . . . .	29
2.6	Distributionen . . . . .	30

<b>3</b>	<b>Elektrostatik</b>	<b>33</b>
3.1	Grundgleichungen der Elektrostatik . . . . .	33
3.1.1	Elektrostatisches Feld . . . . .	33
3.1.2	Elektrostatisches Potential . . . . .	34
3.1.3	Feldgleichungen . . . . .	35
3.2	Elektrostatik vorgegebener Ladungsverteilungen . . . . .	37
3.2.1	Radialsymmetrische Felder . . . . .	37
3.2.2	Dipole . . . . .	39
3.2.3	Multipolentwicklung . . . . .	41
3.2.4	Elektrostatische Energie . . . . .	43
3.3	Elektrostatik von Leitern . . . . .	44
3.3.1	Randwertprobleme der Potentialtheorie . . . . .	45
3.3.2	Bildladungen . . . . .	46
3.3.3	Komplexe Potentiale . . . . .	47
3.3.4	Plattenkondensator . . . . .	49
3.4	Elektrostatik von Dielektrika . . . . .	50
3.4.1	Polarisation . . . . .	51
3.4.2	Feldgleichungen . . . . .	53
3.4.3	Polarisierbarkeit von Atomen und Molekülen . . . . .	54
<b>4</b>	<b>Magnetostatik</b>	<b>57</b>
4.1	Interpretation der Grundgleichungen . . . . .	57
4.2	Magnetfelder stationärer Ströme . . . . .	61
4.3	Magnetisches Dipolmoment . . . . .	63
<b>5</b>	<b>Maxwell-Gleichungen</b>	<b>66</b>
5.1	Zeitentwicklung elektromagnetischer Felder . . . . .	66
5.2	Induktionsgesetz . . . . .	67
5.3	Erhaltungssätze . . . . .	69
5.3.1	Ladungserhaltung . . . . .	70
5.3.2	Energieerhaltung . . . . .	70
5.3.3	Impulserhaltung . . . . .	71
5.4	Elektromagnetische Wellen . . . . .	73

5.4.1	Wellen im Vakuum . . . . .	73
5.4.2	Wellen in Materie . . . . .	76
5.4.3	Reflexion an einer ebenen Grenzfläche . . . . .	78
5.4.4	Strahlung im thermischen Gleichgewicht . . . . .	81
<b>II Quantenmechanik</b>		<b>84</b>
<b>6 Grundkonzepte der Quantenmechanik</b>		<b>85</b>
6.1	Messung physikalischer Größen in der Quantenmechanik . . . . .	85
6.1.1	Stern-Gerlach-Versuch . . . . .	86
6.1.2	Messung einer Größe . . . . .	87
6.1.3	Messung mehrerer Größen . . . . .	88
6.1.4	Messung von polarisiertem Licht . . . . .	90
6.2	Zustandsvektoren . . . . .	91
6.2.1	Vektorraum . . . . .	91
6.2.2	Skalarprodukt . . . . .	92
6.2.3	Orthonormalsysteme . . . . .	93
6.3	Operatoren . . . . .	94
6.3.1	Lineare Operatoren . . . . .	94
6.3.2	Matrizendarstellung . . . . .	94
6.3.3	Operatorprodukte . . . . .	95
6.3.4	Adjungierter Operator . . . . .	95
6.3.5	Hermitescher Operator . . . . .	96
6.3.6	Äußeres Produkt . . . . .	96
6.3.7	Projektoren . . . . .	96
6.3.8	Unitäre Operatoren . . . . .	97
6.3.9	Eigenvektoren und Eigenwerte . . . . .	97
<b>7 Postulate der Quantenmechanik</b>		<b>99</b>
7.1	Quantenzustand und Observablen . . . . .	99
7.2	Elektronenspin . . . . .	101
7.2.1	Spinobservablen . . . . .	101
7.2.2	Basistransformationen . . . . .	102

7.2.3	Matrizendarstellung . . . . .	103
7.3	Interferenz . . . . .	105
7.3.1	Projektionswahrscheinlichkeit bei zwei Alternativen . . . . .	105
7.3.2	Regeln für Projektionswahrscheinlichkeiten . . . . .	106
7.4	Kompatible Observablen . . . . .	107
7.4.1	Eigenzustände . . . . .	107
7.4.2	Gleichzeitige Meßbarkeit . . . . .	108
7.4.3	Vollständiger Satz kompatibler Observablen . . . . .	108
7.5	Inkompatible Observablen . . . . .	108
7.5.1	Unschärferelation . . . . .	108
7.6	Ort und Impuls . . . . .	109
7.6.1	Ortsoperator . . . . .	109
7.6.2	Ortsdarstellung . . . . .	110
7.6.3	Impulsoperator . . . . .	111
7.6.4	Vertauschungsrelationen . . . . .	112
7.6.5	Ortsdarstellung des Impulsoperators . . . . .	112
7.6.6	Impulsdarstellung . . . . .	113
<b>8</b>	<b>Zeitentwicklung von Quantensystemen</b>	<b>115</b>
8.1	Zeitabhängige Zustandsvektoren . . . . .	115
8.1.1	Spinpräzession im Magnetfeld . . . . .	115
8.1.2	Stationäre Zustände . . . . .	116
8.1.3	Superpositionsprinzip quantenmechanischer Zustände . . . . .	118
8.2	Grundgleichungen der Zeitentwicklung . . . . .	118
8.2.1	Schrödingergleichung . . . . .	118
8.2.2	Zeitentwicklungsoperator . . . . .	119
8.2.3	Schrödingerbild . . . . .	121
8.2.4	Heisenbergbild . . . . .	121
8.2.5	Zeitentwicklung von Erwartungswerten . . . . .	121
8.3	Einteilchen-Schrödingergleichung . . . . .	122
8.3.1	Orstdarstellung der Schrödingergleichung . . . . .	123
8.3.2	Erhaltung der Wahrscheinlichkeit . . . . .	123
8.3.3	Ehrenfest-Theorem . . . . .	124

---

8.4	Schrödingergleichung des freien Teilchens . . . . .	125
8.4.1	Stationäre Zustände . . . . .	125
8.4.2	Interferenz ebener Wellen . . . . .	126
8.4.3	Ausbreitung von Wellenpaketen . . . . .	127
8.4.4	Kohärente Zustände . . . . .	128
8.5	Stufenpotentiale . . . . .	129
8.5.1	Reflexion an einer Stufe . . . . .	130
8.5.2	Potentialtopf . . . . .	133
8.6	Harmonischer Oszillator . . . . .	134
8.6.1	Stationäre Zustände . . . . .	136
8.6.2	Ortsdarstellung . . . . .	138
8.6.3	Erwartungswerte . . . . .	142
8.6.4	Kohärente Zustände . . . . .	143



**Teil I**

**Elektrodynamik**

# Kapitel 1

## Einleitung

Gegenstand der Elektrodynamik ist die elektromagnetische Wechselwirkung elektrischer Ladungen. In der *klassischen Elektrodynamik* wird diese Wechselwirkung durch ein *elektromagnetisches Feld* beschrieben. Das elektromagnetische Feld wird durch die *Maxwell-Gleichungen* bestimmt.

Die Elektrodynamik beinhaltet als Spezialfälle die *Elektrostatik* und die *Magnetostatik*. Im Rahmen der Elektrodynamik werden die elektrische und magnetische Wechselwirkung zu einer Theorie der elektromagnetischen Wechselwirkung zusammengefaßt. Es ist naheliegend zu vermuten, daß sich weitere Wechselwirkungen in diesem Sinne vereinheitlichen lassen. Die *Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung* vereinheitlicht bereits die elektromagnetische und die schwache Wechselwirkung. Am Ende dieser Entwicklung könnte eine einheitliche Feldtheorie aller bekannten fundamentalen Wechselwirkungen der Physik stehen, die auch die starke Wechselwirkung und die Gravitation einschließt.

Die Elektrodynamik zeitabhängiger Felder beschreibt die *Ausbreitung elektromagnetischer Wellen*. Nach dem *Einsteinschen Relativitätsprinzip* breiten sich elektromagnetische Wellen im Vakuum in jedem Inertialsystem mit Lichtgeschwindigkeit aus. Die Elektrodynamik sollte dem Einsteinschen Relativitätsprinzip genügen. Tatsächlich sind die Maxwell-Gleichungen *lorentzinvariant* und somit auch im Rahmen der speziellen Relativitätstheorie gültig.

Die quantentheoretische Beschreibung der elektromagnetischen Wechselwirkung wird als *Quantenelektrodynamik (QED)* bezeichnet. Die QED führt Photonen als Quanten des Strahlungsfeldes ein. Das grundlegende Problem der QED ist die Wechselwirkung von Photonen mit Elektronen und Positronen. Die Wechselwirkung des Elektrons mit seinem eigenen Strahlungsfeld modifiziert z.B. seine Wechselwirkung mit einem äußeren Magnetfeld (anomales magnetisches Moment) oder mit dem elektrischen Feld eines Atomkerns (Lambshift). QED Korrekturen konnten in einigen Fällen mit sehr hoher Genauigkeit berechnet und durch Experimente bestätigt werden.

Im Rahmen dieser Vorlesung befassen wir uns mit der klassischen Elektrodynamik, insbesondere mit den Teilgebieten Elektrostatik, Magnetostatik und mit elektromagnetischen Wellen.

## 1.1 Elektrische Ladungen

Es gibt positive und negative elektrische Ladungen, die sich als ganzzahlige Vielfache der Elementarladung  $e$  darstellen lassen,

$$Q = Ze, \quad Z = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Die Ladungszahl  $Z$  gibt die Ladung in Einheiten der Elementarladung an. Die bekannten Elementarteilchen haben die Ladungszahlen  $Z = +1$  (Proton),  $Z = -1$  (Elektron) oder  $Z = 0$  (Neutron). In Atomkernen wird die abstoßende Coulombkraft der Protonen durch die anziehende Kernkraft kompensiert. Daher sind auch Atomkerne mit großer Ladungszahl möglich. Diese positiven Ladungen werden im Atom durch die Elektronenhülle neutralisiert. Ionen sind geladene Teilchen, die weniger oder mehr Elektronen besitzen als das entsprechende neutrale Teilchen. Geladene Leiter oder ionisierte Gase (Plasmen) besitzen freie Elektronen mit makroskopischen Ladungszahlen, bei denen die Quantennatur der Ladung meist vernachlässigbar ist.

Für die Ladung gilt ein Erhaltungssatz: Die Ladung eines abgeschlossenen Systems von Teilchen bleibt erhalten. Dies gilt auch dann, wenn es zu Umladungen oder zu Teilchenumwandlungen kommt. Beispiele hierfür sind die Photoionisation eines Atoms,  $A + \gamma \rightarrow A^+ + e$  oder der Betazerfall eines Neutrons,  $n \rightarrow p + e + \bar{\nu}$ . In beiden Fällen entstehen aus dem neutralen Anfangszustand geladene Teilchen mit der Gesamtladung Null.

## 1.2 Elektrische und magnetische Felder

Die *elektrische Feldstärke*  $\mathbf{E}$  wird durch die Kraft auf eine ruhende Probeladung  $q$  definiert,

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E}. \quad (1.1)$$

Die elektrische Feldstärke bezeichnet somit die Kraft pro Ladungseinheit. Sie ist von der Anwesenheit der Probeladung unabhängig.

Eine Probeladung ist streng genommen eine Idealisierung. Vernachlässigt wird hierbei die endliche Ausdehnung der Ladung sowie die Rückwirkung der Ladung auf das elektrische Feld. Eine solche Rückwirkung kann durch die Beeinflussung der restlichen Ladungen oder durch die Selbstwechselwirkung der Ladung mit dem eigenen Strahlungsfeld zustande kommen. Diese Effekte sind aber meist vernachlässigbar

klein, so daß die Annahme punktförmiger Ladungen in einem vorgegeben äußeren Feld eine gute Näherung darstellt.

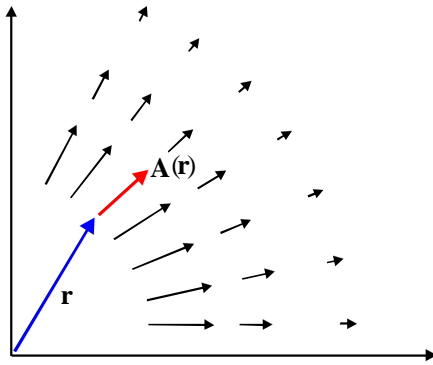


Abbildung 1.1: Vektorfeld  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$

Verschiebt man die Probeladung, so kann man jedem Ortsvektor  $\mathbf{r}$  einen Vektor der elektrischen Feldstärke  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  zuordnen. Eine Zuordnung,

$$\mathbf{r} \rightarrow A(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

die an jedem Punkt eines Gebietes den Wert einer Größe  $A$  definiert, nennt man ein *Feld*. Da  $\mathbf{E}$  ein Vektor ist, nennt man  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  ein *Vektorfeld*. Der Begriff des Vektorfeldes ist grundlegend für die Elektrodynamik. Vektorfelder spielen hier eine ähnliche Rolle, wie die Teilchenkoordinaten  $(q_i, p_i)$  in der Mechanik. Im Gegensatz zu dem diskreten Teilchenindex  $i$  ist der Ortsvektor  $\mathbf{r}$  hier aber eine kontinuierliche Variable. Im allgemeinen können Felder auch zeitabhängig sein, was durch ein zusätzliches Argument,  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ , angedeutet wird.

Für ein System von ruhenden Punktladungen läßt sich die Kraftwirkung auf jede Ladung mit Hilfe des *Coulomb-Gesetzes* und des *Superpositionsprinzips* angeben. Dies soll kurz erläutert werden, obwohl dies nicht der geeignete Weg ist, elektromagnetische Felder im allgemeinen zu berechnen. Zwischen zwei ruhenden Punktladungen  $i$  und  $j$  wirkt die *Coulomb-Kraft*,

$$\mathbf{F}_{ij} = q_i q_j \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3}, \quad \mathbf{F}_{ji} = -\mathbf{F}_{ij}. \quad (1.3)$$

Hierbei bezeichnet  $\mathbf{F}_{ij}$  die Kraft, die von der Ladung  $j$  auf die Ladung  $i$  ausgeübt und  $\mathbf{F}_{ji}$  ist die entgegengesetzt gerichtete gleich große Gegenkraft, die die Ladung  $i$  auf die Ladung  $j$  ausübt.

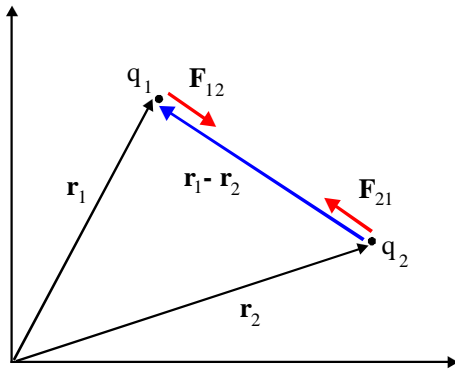


Abbildung 1.2: Richtung der Coulombkraft zwischen zwei Ladungen  $q_1, q_2$  mit entgegengesetztem Vorzeichen.

Die Coulomb-Kraft ist entlang der Verbindungslinie der Ladungen gerichtet und umgekehrt proportional zum Quadrat des Abstandes zwischen den Ladungen. Ladungen gleichen Vorzeichens stoßen sich ab, Ladungen entgegengesetzten Vorzeichens ziehen sich an. Das elektrische Feld am Ort der Ladung  $q_i$ , das von der Ladung  $q_j$  erzeugt wird, ist somit

$$\mathbf{E}_{ij} = q_j \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3}. \quad (1.4)$$

Wirken auf eine Ladung  $q_i$  die elektrischen Felder von mehreren Ladungen  $q_j$ , so gilt für das resultierende elektrische Feld ebenso wie für die resultierende Kraft das *Superpositionsprinzip*,

$$\mathbf{E}_i = \sum_j \mathbf{E}_{ij}, \quad \mathbf{F}_i = q_i \mathbf{E}_i = \sum_j q_i \mathbf{E}_{ij} = \sum_j \mathbf{F}_{ij}. \quad (1.5)$$

Wir erhalten somit die Kraft auf die Ladung  $i$ , indem wir die Coulomb-Kräfte, die von allen anderen Teilchen auf die Ladung  $i$  ausgeübt werden, addieren.

Neben der elektrischen Kraft gibt es auch eine magnetische Kraft, die auf bewegte Ladungen wirkt. Die magnetische Feldstärke  $\mathbf{B}$  wird durch die Kraft auf eine Probeladung  $q$  definiert, die sich mit der Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  bewegt,

$$\mathbf{F} = \frac{q}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}. \quad (1.6)$$

Hierbei bezeichnet  $c$  die Lichtgeschwindigkeit. Die magnetische Kraft unterscheidet sich von der elektrischen durch ihre Geschwindigkeitsabhängigkeit. Sie steht senkrecht auf der Bewegungsrichtung und verschwindet für eine ruhende Ladung. Die magnetische Feldstärke bildet ebenfalls ein Vektorfeld  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ , dessen Eigenschaften unabhängig sind von der Anwesenheit der Probeladung.

Die allgemeine Form der Kraft auf eine Ladung in einem äußeren elektrischen und

magnetischen Feld ist

$$\mathbf{F} = q \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right). \quad (1.7)$$

Sie wird als *Lorentz-Kraft* bezeichnet.

Die Bewegung einer Ladung in einem orts- und zeitabhängigen elektromagnetischen Feld erhält man durch die Lösung der Bewegungsgleichung,

$$\frac{d}{dt} \mathbf{r} = \mathbf{v}, \quad (1.8)$$

$$\frac{d}{dt} \mathbf{p} = q \left( \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \right),$$

mit dem relativistischen Impuls

$$\mathbf{p} = m\gamma\mathbf{v}, \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}.$$

Für kleine Geschwindigkeiten,  $v \ll c$ , gilt die Newtonsche Bewegungsgleichung mit  $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ .

### 1.3 Ladungs- und Stromdichte

Es ist naheliegend auch die Ladungen und deren Ströme durch Felder zu beschreiben. Hierzu definieren wir zunächst eine Dichte  $f_Z(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  im Phasenraum mit der Eigenschaft, daß  $f_Z(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3r d^3v$  die Anzahl der Ladungen mit der Ladungszahl  $Z$  darstellt, die sich am Punkt  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  im Volumenelement  $d^3r d^3v$  befinden. Damit können die Ladungsdichte  $\varrho(\mathbf{r})$  und die Stromdichte  $\mathbf{j}(\mathbf{r})$  auf folgende Weise dargestellt werden

$$\varrho(\mathbf{r}) = \sum_Z Ze \int d^3v f_Z(\mathbf{r}, \mathbf{v}), \quad (1.9)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sum_Z Ze \int d^3v \mathbf{v} f_Z(\mathbf{r}, \mathbf{v}).$$

Aus diesen Definitionen folgt unmittelbar,

$$dQ = \varrho(\mathbf{r})dV, \quad dI = \mathbf{j} \cdot d\mathbf{a}. \quad (1.10)$$

Hierbei bezeichnet  $dQ$  die Ladung des Volumenelements  $dV$  und  $dI$  den Strom, der durch ein Flächenelement  $d\mathbf{a}$  in Richtung der Flächennormalen hindurchtritt. Man beachte, daß

$$d\mathbf{a} \cdot \mathbf{v} dt f_Z(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3v$$

die Anzahl der Ladungen der Sorte  $Z$  darstellt, die mit der Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  im Zeitintervall  $dt$  durch die Fläche hindurchtreten. Da das Volumenelement  $d\mathbf{a} \cdot \mathbf{v} dt$  geschwindigkeitsabhängig ist, wird es mit der Dichte  $f_Z(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d^3v$  der Teilchen mit der Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  multipliziert.

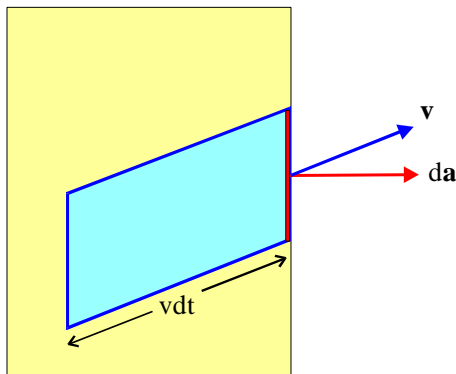


Abbildung 1.3: Volumenelement  $d\mathbf{a} \cdot \mathbf{v} dt$ , aus dem die Teilchen mit der Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  während der Zeit  $dt$  durch das Oberflächenelement  $d\mathbf{a}$  austreten.

Mit Hilfe der Dichten können Summationen über Ladungen durch Integrationen ersetzt werden. Hierzu verwenden wir die Substitutionsregeln,

$$\sum_{i \in V} q_i h(\mathbf{r}_i) \rightarrow \int_V dV \varrho(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}), \quad (1.11)$$

$$\sum_{i \in V} q_i \mathbf{v}_i h(\mathbf{r}_i) \rightarrow \int_V dV \mathbf{j}(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}),$$

wobei  $h(\mathbf{r})$  eine beliebige Funktion bezeichnet. Beispielsweise erhält man für die Gesamtladung  $Q$  innerhalb eines Volumens oder für die Gesamtkraft  $\mathbf{F}$  auf die Ladungen des Volumens die Ausdrücke,

$$Q = \int_V dV \varrho(\mathbf{r}), \quad \mathbf{F} = \int_V dV \left( \varrho \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{j} \times \mathbf{B} \right). \quad (1.12)$$

Für einzelne Punktladungen definiert man die Dichten mit Hilfe der *Diracschen Deltafunktion*. Sie besitzt definitionsgemäß die Eigenschaft

$$\int_V dV \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) h(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{für } \mathbf{r}_i \text{ außerhalb } V \\ h(\mathbf{r}_i) & \text{für } \mathbf{r}_i \text{ innerhalb } V \end{cases} \quad (1.13)$$

Im mathematischen Sinne ist die Deltafunktion eine Distribution, die der Funktion  $h(\mathbf{r})$  den Funktionswert  $h(\mathbf{r}_i)$  an der Stelle  $\mathbf{r}_i$  zuordnet. Die Schreibweise als Funktion hat nur symbolische Bedeutung, da es keine gewöhnliche Funktion mit der Eigenschaft (1.13) gibt. Unter Verwendung der Deltafunktion erhält man für die Ladungsdichte bzw. die Stromdichte eines Systems von  $N$  Punktladungen,

$$\varrho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N q_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) . \quad (1.14)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N q_i \mathbf{v}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) .$$

## 1.4 Maxwell-Gleichungen

Es stellt sich nun die Frage, welches elektromagnetische Feld von einer vorgegebenen Ladungsdichte  $\varrho(\mathbf{r}, t)$  bzw. Stromdichte  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  erzeugt wird. Die Antwort hierauf geben die *Maxwell-Gleichungen*,

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \partial_t \mathbf{E} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad (1.15)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.16)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \partial_t \mathbf{B} \quad (1.17)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi \varrho \quad (1.18)$$

Diese Gleichungen bestimmen das elektromagnetische Feld zu vorgegebenen Ladungs- und Stromdichten. In der Vektoranalysis lernt man genauer wie Vektorfelder durch die Angabe sogenannter Quellen und Wirbel für verschiedene Randwertprobleme bestimmt werden können. Die Maxwell-Gleichungen geben eine inhaltliche Ausdeutung dieser Sätze. Da es sich um physikalische Naturgesetze handelt, ist die inhaltliche Bedeutung nicht beweisbar. Im Rahmen der Elektrodynamik lernt man mit diesen Gleichungen umzugehen und sie auf unterschiedliche Fragestellungen anzuwenden.



## 1.5 Einheitensysteme

**Gaußsches System:** Die Ladung kann in unterschiedlichen Einheiten angegeben werden. Diesem Skriptum liegt das Gaußsche Maßsystem mit den Einheiten cm, g, s (cgs-System) zugrunde. Die Einheit der Ladung ist hier die *Elektrostatische Einheit* ESE. Die Definition der elektrostatischen Einheit wird durch das Coulomb-Gesetz festgelegt: Zwei Ladungen der Größe 1 ESE im Abstand von 1 cm ergeben eine Kraft von 1 dyn,

$$1\text{dyn} = \frac{(1\text{ESE})^2}{\text{cm}^2}. \quad (1.19)$$

Die elektrostatische Einheit ist daher

$$1\text{ESE} = \frac{\text{cm}^{3/2}\text{g}^{1/2}}{\text{s}}. \quad (1.20)$$

Die Elementarladung ist  $e = 4.803 \times 10^{-10}$  ESE. Das Gaußsche System hat den Vorteil, daß das elektrische und das magnetische Feld die gleiche Dimension besitzen und sie sich daher ohne zusätzliche Konstanten zum elektromagnetischen Feld zusammenfassen lassen.

**SI-System:** Das SI-System verwendet die Einheiten m, kg, s, A. Die Einheit der Ladung ist das Coulomb (C). Das Coulomb wird durch die Einheit der Stromstärke, das Ampère (A), als  $1\text{C} = 1\text{As}$  festgelegt. Für praktische Rechnungen empfiehlt sich das international eingeführte SI-System. Die Elementarladung besitzt hier den Wert  $e = 1.602 \times 10^{-19}\text{C}$ .

**Umrechnungsformeln:** Einige Umrechnungsformeln zwischen diesen Maßsystemen sind in Tabelle 1.1 angegeben, wobei die Größen im SI-System durch \* gekennzeichnet sind. Im SI-System lautet die Coulomb- bzw. die Lorentz-Kraft,

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1^* q_2^*}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2},$$

$$\mathbf{F} = q^* (\mathbf{E}^* + \mathbf{v} \times \mathbf{B}^*).$$

Die Maxwell-Gleichungen lauten im SI-System

$$c^2 \nabla \times \mathbf{B}^* = \partial_t \mathbf{E}^* + \frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{j}^* \quad (1.21)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}^* = 0 \quad (1.22)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}^* = -\partial_t \mathbf{B}^* \quad (1.23)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E}^* = \frac{1}{\epsilon_0} \rho^*. \quad (1.24)$$

Tabelle 1.1: Umrechnungstabelle

SI-Größe	SI-Einheit	cgs-Größe
Ladung: $q^*$	$1[\text{C}] = 1[\text{As}]$	$q = \frac{q^*}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}}$
Stromstärke: $I^*$	$1[\text{A}]$	$I = \frac{I^*}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}}$
Elektrische Feldstärke: $E^*$	$1\left[\frac{\text{V}}{\text{m}}\right]$	$E = \sqrt{4\pi\epsilon_0} E^*$
Magnetische Induktion: $B^*$	$1[\text{T}] = 1\left[\frac{\text{Vs}}{\text{m}^2}\right]$	$B = c\sqrt{4\pi\epsilon_0} B^* = \sqrt{4\pi/\mu_0} B^*$

Elektrische Feldkonstante:

$$\epsilon_0 = 8,8543 \cdot 10^{-12} \frac{\text{As}}{\text{Vm}}, \quad \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = c^2 \times 10^{-7} \frac{\text{N}}{\text{A}^2} \approx 9 \times 10^9 \frac{\text{Vm}}{\text{As}}$$

Magnetische Feldkonstante:

$$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \frac{\text{Vs}}{\text{Am}} = \frac{1}{\epsilon_0 c^2}$$

Lichtgeschwindigkeit:  $c = 2.9979 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}$

# Kapitel 2

## Vektoranalysis

Die Maxwell-Gleichungen sind ein System partieller Differentialgleichungen für Vektorfelder. Die Differentiation und Integration von Vektorfeldern ist Gegenstand der Vektoranalysis. Besondere Bedeutung für die Elektrodynamik haben der *vektorielle Differentialoperator Nabla*, die *Integralsätze von Gauß und Stokes*, sowie der *Helmholtzsche Hauptsatz der Vektoranalysis*.

### 2.1 Vektoren

In der Physik verwendet man Vektoren gewöhnlich als koordinatenunabhängige Größen im dreidimensionalen physikalischen Raum, die einen Betrag und eine Richtung haben. Die Eigenschaften dieser Vektoren können durch die algebraische Definition des Vektorraumes verallgemeinert werden. Wir bedienen uns hier des einfachen Bildes dreidimensionaler Größen, da wir uns in der Darstellung der Vektoranalysis auf dreidimensionale Vektorfelder beschränken.

Man kann einen Vektor  $\mathbf{a}$  als eine geradlinige Verschiebung eines Punktes auffassen und graphisch durch einen Verschiebungspfeil darstellen. Durch ein Skalarprodukt (Inneres Produkt) wird der Betrag (die Norm) eines Vektors und der von zwei Vektoren eingeschlossene Winkel definiert,

$$a = \|\mathbf{a}\| = \sqrt{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}}, \quad \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = ab \cos \varphi . \quad (2.1)$$

Ein Vektor, der vom Koordinatenursprung  $O$  zu einem beliebigen Punkt  $M$  gerichtet ist, wird als Ortsvektor  $\mathbf{r}_M$  bezeichnet. Vektoren können addiert und mit Skalaren multipliziert werden, d.h. eine Linearkombination von Vektoren ist wieder ein Vektor. Die Addition zweier Vektoren ist bildlich durch zwei nacheinander ausgeführte Verschiebungen darstellbar. Verschiebt man zuerst von  $O$  nach  $P$  und danach von  $P$  nach  $Q$ , so entspricht dies einer direkten Verschiebung von  $O$  nach  $Q$ . Sei  $\mathbf{a}$  die

Verschiebung von  $P$  nach  $Q$ , so gilt

$$\mathbf{r}_Q = \mathbf{r}_P + \mathbf{a}. \quad (2.2)$$

Die Multiplikation eines Vektors mit einem Skalar ist durch die Multiplikation des Betrags des Vektors mit dem Skalar definiert.

**Orthonormalbasis:** In einem kartesischen Koordinatensystem mit den Koordinaten  $x_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) können Einheitsvektoren  $\mathbf{e}_i$  entlang der Koordinatenachsen eingeführt werden. Diese Einheitsvektoren bilden ein Orthonormalsystem, d.h. sie sind auf die Länge eins normiert und stehen paarweise senkrecht aufeinander,

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 0; & i \neq j \\ 1; & i = j \end{cases}. \quad (2.3)$$

Jeder Vektor kann dann als Summe von Verschiebungen entlang der Einheitsvektoren dargestellt werden,

$$\mathbf{a} = \sum_i a_i \mathbf{e}_i, \quad a_i = \mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_i. \quad (2.4)$$

Man sagt, der Vektor  $\mathbf{a}$  kann nach der Basis  $\{\mathbf{e}_i\}$  entwickelt werden und bezeichnet die Entwicklungskoeffizienten  $a_i$  als die Vektorkomponenten von  $\mathbf{a}$  oder als die Darstellung von  $\mathbf{a}$  bezüglich der Basis  $\{\mathbf{e}_i\}$ . Für das Skalarprodukt von 2 Vektoren  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  erhält man in Komponentenschreibweise,

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \left( \sum_i a_i \mathbf{e}_i \right) \cdot \left( \sum_j b_j \mathbf{e}_j \right) = \sum_{i,j} a_i b_j \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \sum_i a_i b_i. \quad (2.5)$$

**Orthogonale Transformationen:** Transformationen von einem Orthonormalsystem  $\{\mathbf{e}_i\}$  zu einem zweiten Orthonormalsystem  $\{\mathbf{e}'_i\}$  werden als orthogonale Transformationen bezeichnet. Man erhält eine orthogonale Transformation durch eine Drehung oder Spiegelung der Koordinatenachsen. Orthogonale Transformationen erhalten die Orthonormalitätseigenschaft der Basis, d.h. es gilt auch in der neuen Basis

$$\mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}'_j = \delta_{ij} \quad (2.6)$$

Entwickelt man jeweils einen Basisvektor der einen Basis nach der anderen Basis, so ergeben sich die Transformationsgleichungen,

$$\mathbf{e}'_i = \sum_k \alpha_{ik} \mathbf{e}_k, \quad (2.7)$$

$$\mathbf{e}_i = \sum_k \alpha_{ki} \mathbf{e}'_k, \quad (2.8)$$

mit

$$\alpha_{ik} = \mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}_k, \quad \alpha_{ki} = \mathbf{e}'_k \cdot \mathbf{e}_i.$$

Aus der Bedingung für die Orthonormalität der Basisvektoren erhält man die Relationen

$$\mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}'_j = \sum_k \alpha_{ik} \mathbf{e}_k \cdot \mathbf{e}'_j = \sum_k \alpha_{ik} \alpha_{jk} = \delta_{ij} \quad (2.9)$$

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \sum_k \alpha_{ki} \mathbf{e}'_k \cdot \mathbf{e}_j = \sum_k \alpha_{ki} \alpha_{kj} = \delta_{ij} \quad (2.10)$$

Die Zeilen und Spalten von  $\alpha_{ij}$  sind also jeweils paarweise orthogonal zueinander. Die Umkehrmatrix einer orthogonalen Matrix  $\alpha$  ist die transponierte Matrix,

$$\boxed{\alpha^{-1} = \alpha^T.} \quad (2.11)$$

Durch das Transformationsverhalten bei orthogonalen Transformationen unterscheidet man zwischen Skalaren, Vektoren und Tensoren. Die Komponenten eines Vektors transformieren sich wie,

$$a'_i = \mathbf{a} \cdot \mathbf{e}'_i = \sum_k \alpha_{ik} \mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_k = \sum_k \alpha_{ik} a_k. \quad (2.12)$$

Diese Transformationsgesetz unterscheidet die Darstellung eines Vektors von einem beliebigen Zahlentripel. Man definiert daher Vektoren durch das Transformationsgesetz (2.12). Skalare sind Zahlen, die invariant sind gegenüber orthogonalen Transformationen. Zum Beispiel ist das Skalarprodukt  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$  ein Skalar, denn es gilt,

$$\sum_i a'_i b'_i = \sum_{i,k,l} \alpha_{ik} \alpha_{il} a_k b_l = \sum_{k,l} \delta_{kl} a_k b_l = \sum_k a_k b_k \quad (2.13)$$

Allgemeiner definiert man Tensoren  $n$ -ter Stufe als  $n$ -fach indizierte Größen  $T_{ijk\dots}$  mit dem Transformationsverhalten

$$\boxed{T'_{ijk\dots} = \sum_{lmn\dots} \alpha_{il} \alpha_{im} \alpha_{in} T_{lmn\dots}} \quad (2.14)$$

Ein Vektor ist also ein Tensor 1-ter Stufe. Ein Skalar, d.h. eine nichtindizierte invariante Größe, ein Tensor 0-ter Stufe. Einen Tensor 2-ter Stufe erhält man z.B. durch das direkte Produkt zweier Vektoren,  $T_{ij} = a_i b_j$ . Skalare, Vektoren und Tensoren können vom Ort und von der Zeit abhängen. Man spricht dann von einem skalaren Feld (z.B. Temperaturfeld), einem Vektorfeld (z.B. Geschwindigkeitsfeld), bzw. einem Tensorfeld.

## 2.2 Differentiation von Vektorfeldern

Bei der Differentiation von Vektorfeldern ergeben sich zwei Fragestellungen. Erstens muß man klären, wie Funktionen von mehreren unabhängigen Variablen differenziert werden und zweitens welche Ableitungen eines Vektorfeldes wieder ein Vektorfeld darstellen.

Wir betrachten zuerst ein skalares Feld  $f(\mathbf{r})$ . Die Funktion  $f(\mathbf{r})$  ist an der Stelle  $\mathbf{a}$  differenzierbar, falls ihre Änderung in einer Umgebung von  $\mathbf{a}$  durch eine lineare Abbildung approximiert werden kann. In Koordinatendarstellung besitzt diese lineare Abbildung die Form

$$df = f(a_1 + dx_1, a_2 + dx_2, a_3 + dx_3) - f(a_1, a_2, a_3) = \frac{\partial f}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial f}{\partial x_3} dx_3 . \quad (2.15)$$

Man nennt  $df$  das totale Differential der Funktion  $f$  und

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \left. \frac{df}{dx_1} \right|_{dx_2=0, dx_3=0}$$

die partielle Ableitung von  $f$  nach der Koordinate  $x_1$ . Die partielle Ableitung bezeichnet also die Ableitung nach einer Koordinate  $x_i$  bei festgehaltenen Werten der restlichen Koordinaten. Für partielle Ableitungen gibt es viele unterschiedliche Schreibweisen, z.B. auch

$$\partial_{x_i} f, \quad \partial_i f, \quad f_{x_i}, \quad f_{,i} .$$

Differenziert man die partielle Ableitung nach  $x_i$  noch einmal partiell nach  $x_k$ , so erhält man eine zweite partielle Ableitung. Dabei können  $x_i$  und  $x_k$  gleiche oder verschiedene Koordinaten bezeichnen. Analog definiert man die  $n$ -te partielle Ableitungen,

$$\frac{\partial^n f}{\partial x_{i_n} \cdots \partial x_{i_1}} = \frac{\partial}{\partial x_{i_n}} \cdots \frac{\partial}{\partial x_{i_1}} f . \quad (2.16)$$

Partielle Ableitungen besitzen i.a. bei orthogonalen Transformationen keinen Tensorcharakter. Die partielle Ableitung eines skalaren Feldes ist z.B. kein skalares Feld:

$$f'(x', y', z') = f(x, y, z), \quad \text{aber} \quad \partial_{x'} f'(x', y', z') \neq \partial_x f(x, y, z) . \quad (2.17)$$

Größen wie  $\partial_x f(x, y, z)$  sind vom speziellen Koordinatensystem abhängig und daher für die Formulierung physikalischer Gesetze ungeeignet. Man kann jedoch die partiellen Ableitungen eines skalaren Feldes als Komponenten eines Vektorfeldes

$$\nabla f = \sum_{i=1}^3 \mathbf{e}_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \quad (2.18)$$

zusammenfassen. Dieses Vektorfeld wird als der *Gradient* von  $f$  bezeichnet. Die Vektoreigenschaft des Gradienten folgt aus der Invarianz des totalen Differentials (2.15), das nun vektoriell als Skalarprodukt zweier Vektoren,

$$df = \nabla f \cdot d\mathbf{r} \quad (2.19)$$

geschrieben werden kann. Die Änderung  $df$  ist am größten, wenn die Spanne  $d\mathbf{r}$  in Richtung des Gradienten weist.

Explizit zeigt man die Vektoreigenschaft des Gradienten durch eine orthogonale Transformation der Koordinaten,

$$\begin{aligned} x'_i &= \sum_k \alpha_{ik} x_k, & x_k &= \sum_i \alpha_{ik} x'_i \\ \frac{\partial f'(x'_i)}{\partial x'_i} &= \sum_k \frac{\partial f(x_k)}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial x'_i} = \sum_k \alpha_{ik} \frac{\partial f(x_k)}{\partial x_k}. \end{aligned}$$

Die Komponenten des Gradienten transformieren sich hierbei wie Vektorkomponenten. Allgemeiner kann man die drei partiellen Ableitungen eines Tensorfeldes  $n$ -ter Stufe  $T_{jkl\dots}$  als ein Tensorfeld  $(n+1)$ -ter Stufe mit den Komponenten  $\partial_{x_i} T_{jkl\dots}$  auffassen. Auch hier gilt das richtige Transformationsgesetz für die Tensorkomponenten

$$\begin{aligned} \frac{\partial T'_{jkl}(x'_i)}{\partial x'_i} &= \sum_{qrst} \alpha_{jr} \alpha_{ks} \alpha_{lt} \frac{\partial T_{rst}(x_q)}{\partial x_q} \frac{\partial x_q}{\partial x'_i} \\ &= \sum_{qrst} \alpha_{iq} \alpha_{jr} \alpha_{ks} \alpha_{lt} \frac{\partial T_{rst}(x_q)}{\partial x_q}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Da sich die partiellen Ableitungen unabhängig von der speziellen Funktion auf welche sie wirken wie ein Vektor transformieren, faßt man sie zum vektoriellen Differentialoperator *Nabla* zusammen. Dieser wird definiert als

$$\nabla := \sum_i \mathbf{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i}. \quad (2.21)$$

Bei der Anwendung des Nablaoperators müssen gleichzeitig die Regeln der Differentiation und der Vektormultiplikation beachtet werden. In Verbindung mit der Skalar-Multiplikation mit einem skalaren Feld  $f$  oder dem Skalarprodukt bzw. Vektorprodukt mit einem Vektorfeld  $\mathbf{A}$  erhält man die folgenden Ableitungsoperationen. Sie werden hier koordinatenabhängig formuliert. Ihre koordinatenunabhängige Bedeutung wird später durch die Integralsätze deutlich.

**Gradient:**

$$\nabla f = \sum_i \mathbf{e}_i \frac{\partial f}{\partial x_i}. \quad (2.22)$$

## Orthogonale Transformationen

### Basisvektoren:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}'_i &= \sum_k \alpha_{ik} \mathbf{e}_k; & \alpha_{ik} &= \mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}_k \\ \mathbf{e}_i &= \sum_k \alpha_{ik}^{-1} \mathbf{e}'_k; & \alpha_{ik}^{-1} &= \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}'_k = \alpha_{ki} \end{aligned}$$

### Orthonormalitätsbedingungen:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}'_j &= \sum_k \alpha_{ik} \mathbf{e}_k \cdot \mathbf{e}'_j = \sum_k \alpha_{ik} \alpha_{jk} = \delta_{ij} \\ \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j &= \sum_k \alpha_{ki} \mathbf{e}'_k \cdot \mathbf{e}_j = \sum_k \alpha_{ki} \alpha_{kj} = \delta_{ij} \\ \mathbf{e}_1 \cdot (\mathbf{e}_2 \times \mathbf{e}_3) &= +1; & \mathbf{e}'_1 \cdot (\mathbf{e}'_2 \times \mathbf{e}'_3) &= \det|\alpha| = \pm 1 \\ &+ : \text{Rechtssystem (Drehung)} \\ &- : \text{Linkssystem (Spiegelung)} \end{aligned}$$

### Skalare:

$$S' = S$$

### Vektoren:

$$\begin{aligned} a'_i &= \mathbf{a} \cdot \mathbf{e}'_i = \sum_k \alpha_{ik} \mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_k = \sum_k \alpha_{ik} a_k \\ a_i &= \mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_i = \sum_k \alpha_{ki} \mathbf{a} \cdot \mathbf{e}'_k = \sum_k a'_k \alpha_{ki} \end{aligned}$$

### Tensoren:

$$T'_{ij\dots k} = \sum_{mn\dots o} \alpha_{im} \alpha_{jn} \dots \alpha_{ko} T_{mn\dots o}$$

### Nabla:

$$\begin{aligned} x_k &= \sum_i x'_i \alpha_{ik}; & \frac{\partial x_k}{\partial x'_i} &= \alpha_{ik} \\ \frac{\partial}{\partial x'_i} &= \sum_k \frac{\partial x_k}{\partial x'_i} \frac{\partial}{\partial x_k} = \sum_k \alpha_{ik} \frac{\partial}{\partial x_k} \end{aligned}$$



**Divergenz:**

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \sum_i \frac{\partial A_i}{\partial x_i}. \quad (2.23)$$

**Rotation:**

$$\nabla \times \mathbf{A} = \sum_{jk} \frac{\partial A_k}{\partial x_j} \mathbf{e}_j \times \mathbf{e}_k = \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} \frac{\partial A_k}{\partial x_j} \mathbf{e}_i \quad (2.24)$$

Die Komponenten des Kreuzproduktes werden durch die Werte des Epsilon-Tensors

$$\epsilon_{ijk} = \mathbf{e}_i \cdot (\mathbf{e}_j \times \mathbf{e}_k) = \begin{cases} 1, & \text{ijk ist zyklische Vertauschung von 123} \\ -1, & \text{ijk ist antizyklische Vertauschung von 123} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

bestimmt.

**Zweite Ableitungen:**

$$\nabla \cdot (\nabla f) = \Delta f, \quad \Delta f = \sum_i \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}, \quad \text{Laplace-Operator}$$

$$\nabla \times (\nabla f) = 0, \quad \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = 0$$

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \Delta \mathbf{A}$$

## 2.3 Integration von Vektorfeldern

Im folgenden werden der Gradient, die Divergenz und die Rotation koordinatenunabhängig definiert. Aus diesen Definitionen ergeben sich unmittelbar Integralsätze für diese Ableitungsoperationen.

### 2.3.1 Gradient

Die Differenz eines skalaren Feldes  $f(\mathbf{r})$  in zwei Punkten  $\mathbf{r}_1$  und  $\mathbf{r}_2$  ist unabhängig vom Koordinatensystem,

$$\Delta f = f(\mathbf{r}_2) - f(\mathbf{r}_1). \quad (2.25)$$

Wir wählen nun ein spezielles Koordinatensystem und dicht benachbarte Punkte mit den Koordinatendifferenzen  $\Delta x_i$ . In linearer Approximation erhält man dann,

$$\Delta f = f(x_i + \Delta x_i) - f(x_i) = \sum_i \Delta x_i \partial_{x_i} f(x_i) \quad (2.26)$$

Setzt man nun koordinatenunabhängig  $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 = \Delta s \mathbf{t}$  mit einem Einheitsvektor  $\mathbf{t}$  entlang des Wegelementes, so erhält man die koordinatenunabhängige Definition des Gradienten,

$$\mathbf{t} \cdot \nabla f = \lim_{\Delta s \rightarrow 0} \frac{\Delta f}{\Delta s}. \quad (2.27)$$

Der Gradient ist also die Ableitung des Feldes in Richtung seiner stärksten Änderung.

**Kurvenintegral über Gradientenfelder:** Summiert man die infinitesimalen Änderungen der Funktion  $f$  vom Anfangspunkt 1 bis zum Endpunkt 2 einer Kurve, so erhält man das Kurvenintegral

$$\int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} d\mathbf{r} \cdot \nabla f = \int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} df = f(\mathbf{r}_2) - f(\mathbf{r}_1). \quad (2.28)$$

Das Kurvenintegral eines Gradientenfeldes ist gleich der Differenz der Werte des Feldes in den Endpunkten der Kurve. Es ist unabhängig von der Form des Weges zwischen den Endpunkten und es verschwindet für eine geschlossene Kurve.

Wählt man eine Parameterdarstellung  $\mathbf{r}(s)$  der Kurve mit der Weglänge  $s$  als Kurvenparameter, so kann das Linienintegral als gewöhnliches eindimensionales Integral der Tangentialkomponente des Vektorfeldes dargestellt werden

$$f(2) - f(1) = \int_0^s (\mathbf{t} \cdot \nabla f) ds, \quad ds = \sqrt{d\mathbf{r} \cdot d\mathbf{r}}, \quad \mathbf{t} = \frac{d\mathbf{r}(s)}{ds}. \quad (2.29)$$

Wählt man kartesische Koordinaten, so erfolgt die Integration entlang der Koordinatenachsen,

$$f(2) - f(1) = \sum_i \int_{x_{i,1}}^{x_{i,2}} \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i. \quad (2.30)$$

### 2.3.2 Divergenz

Der Fluß eines Vektorfeldes  $\mathbf{A}$  durch eine Oberfläche  $S$  wird durch das Oberflächenintegral

$$\Phi = \int_S \mathbf{A} \cdot d\mathbf{f} \quad (2.31)$$

definiert. Das vektorielle Flächenelement  $d\mathbf{f}$  hat den Betrag des skalaren Flächenelementes und die Richtung der nach außen gerichteten Flächennormalen.

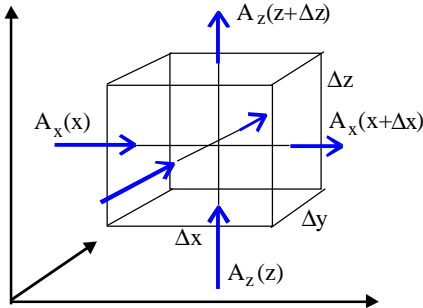


Abbildung 2.1: Fluß von  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  durch die Oberfläche eines Volumenelementes  $\Delta x \Delta y \Delta z$ .

Wir betrachten zunächst den Fluß durch die Oberfläche eines Volumenelementes  $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$  eines kartesischen Koordinatensystems. Die sechs Seitenflächen des Quaders ergeben zum Fluß die Beiträge

$$\begin{aligned} \Delta \Phi &= \Phi_x(x + \Delta x) - \Phi_x(x) + \\ &\quad \Phi_y(y + \Delta y) - \Phi_y(y) + \\ &\quad \Phi_z(z + \Delta z) - \Phi_z(z) \end{aligned} \quad (2.32)$$

wobei

$$\Phi_x = A_x \Delta y \Delta z, \quad \Phi_y = A_y \Delta z \Delta x, \quad \Phi_z = A_z \Delta x \Delta y . \quad (2.33)$$

gesetzt wurde. Entwickelt man die Funktionen  $\Phi_i(x_i + \Delta x_i)$  bis zur ersten Ordnung in  $\Delta x_i$ ,

$$\Phi_i(x_i + \Delta x_i) = \Phi_i(x_i) + \partial_{x_i} \Phi_i(x_i) \Delta x_i , \quad (2.34)$$

so erhält man aus (2.32) und (2.33)

$$\Delta \Phi = \sum_i \partial_{x_i} \Phi_i \Delta x_i = \left( \sum_i \partial_{x_i} A_i \right) \Delta V = (\nabla \cdot \mathbf{A}) \Delta V . \quad (2.35)$$

Die Divergenz eines Vektorfeldes kann damit koordinatenunabhängig definiert werden,

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta \Phi}{\Delta V} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta V} \int_S \mathbf{A} \cdot d\mathbf{f} \quad (2.36)$$

Die Divergenz eines Vektorfeldes ist gleich der Dichte des Flußes durch die Oberfläche eines Volumenelementes.

**Integralsatz von Gauß:** Durch Integration von (2.35) über ein endliches Volumen  $V$  mit der Oberfläche  $S$  folgt der Integralsatz von Gauß,

$$\int_V dV \nabla \cdot \mathbf{A} = \int_S d\mathbf{f} \cdot \mathbf{A} . \quad (2.37)$$

Bei der Integration des Flusses addieren sich die Beiträge von den Flächen der Volumenelemente innerhalb des Volumens zu Null und es bleibt nur noch die Integration über die Oberfläche des Volumens übrig.

**Integralsätze von Green:** Die Integralsätze von Green sind einfache Folgerungen aus dem Gaußschen Satz. Für zwei Funktionen  $\phi(\mathbf{r})$  und  $\psi(\mathbf{r})$  gilt nach der Produktregel,

$$\nabla \cdot (\phi \nabla \psi) = \nabla \phi \cdot \nabla \psi + \phi \Delta \psi \quad (2.38)$$

$$\nabla \cdot (\phi \nabla \psi) - \nabla \cdot (\psi \nabla \phi) = \phi \Delta \psi - \psi \Delta \phi. \quad (2.39)$$

Integriert man (2.39) über ein Volumen  $V$  so folgt mit (2.37) der *erste Greensche Satz*,

$$\int_V dV (\phi \Delta \psi - \psi \Delta \phi) = \int_S d\mathbf{f} \cdot (\phi \nabla \psi - \psi \nabla \phi) \quad (2.40)$$

Entsprechend erhält man mit (2.38) den *zweiten Greenschen Satz*,

$$\int_V dV (\phi \Delta \psi) = - \int_V dV (\nabla \phi \cdot \nabla \psi) + \int_S d\mathbf{f} \cdot (\phi \nabla \psi). \quad (2.41)$$

Die Numerierung der Greenschen Sätze entspricht der historischen Reihenfolge in der diese Sätze gefunden wurden. Der erste Greensche Satz wird zur Lösung von Randwertproblemen in Abschnitt (2.4.3), der zweite Greensche Satz zum Eindeutigkeitsbeweis in Abschnitt (2.4.1) benötigt.

### 2.3.3 Rotation

Die Zirkulation eines Vektorfeldes  $\mathbf{A}$  um eine Fläche  $S$  wird durch das Linienintegral

$$C = \oint_{\Gamma} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \quad (2.42)$$

entlang der geschlossenen Randkurve  $\Gamma$  der Fläche definiert.

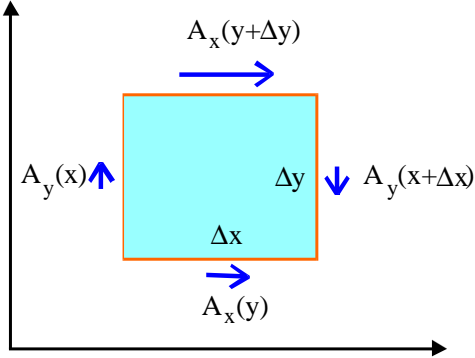


Abbildung 2.2: Zirkulation von  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  entlang dem Umfang eines Flächenelementes  $\Delta x \Delta y$

Wir betrachten zunächst die Zirkulation um ein Flächenelement  $\Delta S = \Delta x \Delta y$ , dessen Normalenrichtung in  $z$ -Richtung orientiert sei. Die vier Seiten der Fläche ergeben zur Zirkulation die Beiträge

$$\Delta C = C_x(y) - C_x(y + \Delta y) + C_y(x + \Delta x) - C_y(x) + \quad (2.43)$$

mit

$$C_x = A_x \Delta x, \quad C_y = A_y \Delta y. \quad (2.44)$$

Entwickelt man die Funktionen  $C_i(x_j + \Delta x_j)$  bis zur ersten Ordnung in  $\Delta x_j$ ,

$$C_i(x_j + \Delta x_j) = C_i(x_j) + \partial_{x_j} C_i(x_j) \Delta x_j, \quad (2.45)$$

so erhält man aus (2.43) und (2.44)

$$\Delta C = (\partial_x A_y - \partial_y A_x) \Delta S = (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot \mathbf{n} \Delta S. \quad (2.46)$$

Hierbei bezeichnet  $\mathbf{n}$  den Einheitsvektor in Richtung der Flächennormalen. Die koordinatenunabhängige Definition der Rotation ist daher

$$\boxed{(\nabla \times \mathbf{A}) \cdot \mathbf{n} = \lim_{\Delta S \rightarrow 0} \frac{\Delta D}{\Delta S} = \lim_{\Delta S \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta S} \oint d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}. \quad (2.47)}$$

Dies entspricht der Flächendichte der Zirkulation um ein Flächenelement. Die Rotation zeigt in Richtung der Flächennormale des Flächenelementes mit der größten Zirkulation.

**Integralsatz von Stokes:** Durch Integration von (2.46) über eine endliche Fläche  $S$  mit der Randkurve  $\Gamma$  folgt der Integralsatz von Stokes,

$$\boxed{\int_S d\mathbf{f} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = \oint_{\Gamma} d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} .} \quad (2.48)$$

Bei der Integration der Zirkulation addieren sich die Beiträge von den Seiten der Flächenelemente innerhalb der Fläche zu Null und es bleibt nur noch die Integration über den Rand der Fläche übrig.

## 2.4 Potentiale von Vektorfeldern

Vektorfelder lassen sich durch ein skalares Potential und ein Vektorpotential darstellen. Diese Potentiale können als Integrale über die Quellen- und Wirbelverteilungen des Vektorfeldes ausgedrückt werden.

### 2.4.1 Randwertprobleme

Um die räumliche Änderung eines Vektorfeldes  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  anzugeben, verwendet man in der Physik häufig die koordinatenunabhängigen Felder,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{F} &= \varrho(\mathbf{r}), \\ \nabla \times \mathbf{F} &= \boldsymbol{\omega}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.49)$$

Das Skalarfeld  $\varrho(\mathbf{r})$  wird die Quellenverteilung, das Vektorfeld  $\boldsymbol{\omega}(\mathbf{r})$  die Wirbelverteilung von  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  genannt. Kann man Vektorfelder aus ihren Quellen und Wirbeln bestimmen? Es stellt sich heraus, daß diese Aufgabe dann eindeutig lösbar ist, wenn man zusätzlich geeignete Randbedingungen für  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  vorgibt.

**Eindeutigkeitssatz für endliche Gebiete:** Sei  $G$  ein einfach zusammenhängendes endliches Gebiet, das von nur einer Randfläche  $\partial G$  umschlossen wird. Innerhalb von  $G$  seien die Quellen und Wirbel gemäß (2.49) vorgegeben. Auf dem Rand  $\partial G$  sei entweder die Normalkomponente  $F_n$  oder die Tangentialkomponente  $\mathbf{F}_t$  von  $\mathbf{F}$  vorgegeben. Dann ist das Randwertproblem eindeutig lösbar.

Zum Beweis dieses Satzes nehmen wir an es gäbe zwei Lösungen  $\mathbf{F}$  und  $\mathbf{F}'$  des Randwertproblems. Dann erfüllt  $\delta\mathbf{F} = \mathbf{F}' - \mathbf{F}$  das Randwertproblem

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \delta\mathbf{F} &= 0, & \nabla \times \delta\mathbf{F} &= 0, & \text{in } G \\ \delta F_n &= 0 \quad \text{oder} \quad \delta \mathbf{F}_t &= 0 & \quad \text{auf } \partial G. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Da  $\delta\mathbf{F}$  wirbelfrei ist, kann es wie eine konservative Kraft aus einem Potential  $\psi$  in der Form  $\delta\mathbf{F} = -\nabla\psi$  abgeleitet werden. Da  $\delta\mathbf{F}$  auch quellenfrei ist genügt das Potential der Laplace-Gleichung

$$\Delta\psi = 0. \quad (2.51)$$

Setzt man im 2. Greenschen Satz (2.41)  $\phi = \psi$  und berücksichtigt (2.51), so folgt

$$\int dV \delta\mathbf{F}^2 = - \int d\mathbf{f} \cdot (\psi\delta\mathbf{F}) \quad (2.52)$$

Für die Randbedingung  $\delta F_n = 0$  verschwindet das Oberflächenintegral. Für die Randbedingung  $\delta\mathbf{F}_t = 0$  gilt  $\psi = const$  auf  $\partial G$ . Dann verschwindet das Oberflächenintegral ebenfalls wegen

$$\int d\mathbf{f} \cdot (\psi\delta\mathbf{F}) = const \int d\mathbf{f} \cdot \delta\mathbf{F} = const \int dV \nabla \cdot \delta\mathbf{F} = 0. \quad (2.53)$$

Somit gilt für beide Randbedingungen

$$\int dV \delta\mathbf{F}^2 = 0 \quad \implies \quad \delta\mathbf{F} = 0. \quad (2.54)$$

Damit ist gezeigt, daß die Lösung eindeutig ist, d.h.  $\mathbf{F} = \mathbf{F}'$ .

**Eindeutigkeitssatz für unendliches Gebiet:** Der obige Beweis kann leicht für den Fall modifiziert werden, in dem das Gebiet bis ins Unendliche reicht und das Potential für  $r \rightarrow \infty$  wie  $r^{-\alpha}$  abfällt. Mit  $\psi \sim r^{-\alpha}$ ,  $\nabla_n\psi \sim r^{-\alpha-1}$  ergibt sich für das Oberflächenintegral die Abschätzung  $\sim r^{-2\alpha-1+2}$ . Es verschwindet also für  $\alpha > 1/2$ . Damit ist das Randwertproblem eindeutig lösbar, wenn das Feld schneller als  $r^{-3/2}$  abfällt. Sind die Quellen und Wirbel innerhalb eines endlichen Raumgebiets vorgegeben, so fallen die Felder für  $r \rightarrow \infty$  wie das Coulomb-Feld, d.h.  $\sim r^{-2}$ , ab. Dies ist hinreichend für die Eindeutigkeit der Lösung. Die Eindeutigkeit der Lösung läßt sich auch unter der wesentlich schwächeren Voraussetzung zeigen, daß das Feld höchstens wie  $\ln r$  ansteigt und an einer Stelle einen vorgegeben Wert besitzt (siehe S. Großmann, S.299).

## 2.4.2 Helmholtzscher Hauptsatz der Vektoranalysis

Unter der Voraussetzung  $\varrho \rightarrow 0$  und  $\boldsymbol{\omega} \rightarrow 0$  für  $r \rightarrow \infty$  gilt für die Lösung von (2.49) im unendlich ausgedehnten Raum der *Satz von Helmholtz*:

Das Vektorfeld  $\mathbf{F}$  läßt sich stets additiv zerlegen in einen wirbelfreien Anteil  $\mathbf{F}_\varrho$  und einen quellenfreien Anteil  $\mathbf{F}_\omega$ ,

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_\varrho + \mathbf{F}_\omega. \quad (2.55)$$

Dabei ist

$$\mathbf{F}_\varrho = \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{\varrho(\mathbf{r}')(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}. \quad (2.56)$$

und

$$\mathbf{F}_\omega = \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{\boldsymbol{\omega}(\mathbf{r}') \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}. \quad (2.57)$$

Der Satz gilt in leicht modifizierter Form auch unter schwächeren Voraussetzungen an den Feldabfall (siehe S. Großmann).

Die Zerlegungseigenschaft (2.55) ergibt sich, wenn man  $\mathbf{F}_\rho$  durch die Quellen und  $\mathbf{F}_\omega$  durch die Wirbel von  $\mathbf{F}$  definiert,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{F}_\rho &= \rho, & \nabla \times \mathbf{F}_\rho &= 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{F}_\omega &= 0, & \nabla \times \mathbf{F}_\omega &= \boldsymbol{\omega}. \end{aligned}$$

Die Summe der Felder  $\mathbf{F}_\rho + \mathbf{F}_\omega$  genügt dann den Bestimmungsgleichungen des Vektorfeldes  $\mathbf{F}$ . Es bleibt nun zu zeigen, daß man ein wirbelfreies Feld aus seinen Quellen und ein quellenfreies Feld aus seinen Wirbeln in der angegebenen Form bestimmen kann. Dieselben Problemstellungen kehren bei den Randwertproblemen der Elektrostatik und der Magnetostatik wieder, so daß sich die Mühe lohnt, sie in den folgenden beiden Abschnitten zu untersuchen.

### 2.4.3 Wirbelfreie Vektorfelder:

Wir setzen im folgenden voraus, daß das Vektorfeld  $\mathbf{F}$  in einem einfach zusammenhängenden Gebiet definiert und dort überall wirbelfrei ist,

$$\nabla \cdot \mathbf{F} = \rho, \quad \nabla \times \mathbf{F} = 0. \quad (2.58)$$

Dann ist  $\mathbf{F}$  durch ein *skalares Potential*  $\Phi$  in der Form

$$\mathbf{F} = -\nabla\phi \quad (2.59)$$

darstellbar. Das Potential ist nur bis auf eine Konstante bestimmt, da das Potential  $\phi' = \phi + C$  das gleiche Vektorfeld definiert.

Dies läßt sich auf folgende Weise zeigen: Aus dem Stokeschen Satz folgt, daß für ein rotationsfreies Feld jedes geschlossene Kurvenintegral verschwindet. Dann ist das Integral

$$\Phi(\mathbf{r}) = - \int_{r_0}^{\mathbf{r}} d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}') \quad (2.60)$$

unabhängig vom Integrationsweg. Bei festgehaltenem Anfangspunkt hängt  $\Phi(\mathbf{r})$  nur vom Endpunkt  $\mathbf{r}$  ab. Für diese Funktion gilt,

$$d\Phi = \nabla\Phi \cdot d\mathbf{r} = -\mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}. \quad (2.61)$$



Der Vektor  $\nabla\Phi + \mathbf{F}$  ist orthogonal zu jeder beliebigen Richtung von  $d\mathbf{r}$  und stellt daher den Nullvektor dar. Somit gilt (2.59).

Das Potential  $\phi$  kann nun durch das Randwertproblem

$$\Delta\phi = -\varrho \quad (2.62)$$

mit einer der folgenden Randbedingungen,

$$\begin{aligned} \phi &= f && \text{auf } \partial G, && \text{Dirichlet-Randbedingung} \\ \partial_n \phi &= g && \text{auf } \partial G, && \text{Neumann-Randbedingung} \\ \phi &\sim r^{-1} && \text{für } r \rightarrow \infty \end{aligned}$$

bestimmt werden. Hierbei bezeichnet  $\partial_n$  die Normalenableitung.

Zur Lösung dieser Aufgabe verwenden wir die Methode der Greenschen Funktion, die auch für viele andere Randwertaufgaben der Physik anwendbar ist. Die *Greensche Funktion* wird definiert durch ein Randwertproblem für eine Punktquelle,

$$\Delta'G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.63)$$

mit einer der folgenden Randbedingungen

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= 0 && \text{für } \mathbf{r}' \text{ auf } \partial G, && \text{Dirichlet-Greensche Funktion} \\ \partial_{n'}G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= -4\pi A_R && \text{für } \mathbf{r}' \text{ auf } \partial G, && \text{Neumann-Greensche Funktion} \\ G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &\sim r'^{-1} && \text{für } r' \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Die Normalenableitung auf dem Rand wird als konstant angenommen und so normiert, daß der Fluß von  $\partial_{n'}G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  durch die Randfläche den durch die Gleichung (2.63) vorgeschriebenen Wert besitzt. Hierbei bezeichnet  $A_R$  den Flächeninhalt der Randfläche.

Im folgenden wird nur die Greensche Funktion für den unendlich ausgedehnten Raum benötigt. Sie besitzt die Form,

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (2.64)$$

Dazu ist zu zeigen, daß für eine Testfunktion  $h(\mathbf{r})$  die Eigenschaft der Delta-Funktion,

$$\int_V d^3r' h(\mathbf{r}') \Delta' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \begin{cases} 0 & \text{für } \mathbf{r} \text{ außerhalb } V \\ -4\pi h(\mathbf{r}) & \text{für } \mathbf{r} \text{ innerhalb } V \end{cases} \quad (2.65)$$

erfüllt wird. Hier bedeutet eine gestrichene Größe, daß sie mit den gestrichenen Koordinaten auszuwerten ist. Sei zunächst  $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \neq 0$ . Mit der Darstellung des Laplace-Operators in Kugelkoordinaten erhält man,

$$\Delta \frac{1}{R} = \frac{1}{R^2} \partial_R \left( R^2 \partial_R \frac{1}{R} \right) = \frac{1}{R^2} \partial_R (-1) = 0. \quad (2.66)$$

Daher erhält man nur einen Beitrag zum Integral, wenn  $\mathbf{r}$  innerhalb des Integrationsgebietes liegt und der Grenzübergang  $R \rightarrow 0$  vollzogen wird. Dazu kann man ein beliebig kleines Kugelvolumen mit Radius  $R = \epsilon$  um den Punkt  $\mathbf{r}$  herausgreifen und dort die stetige Funktion  $h(\mathbf{r}')$  durch den konstanten Wert  $h(\mathbf{r})$  ersetzen. Das verbleibende Integral ergibt nach dem Gaußschen Satz

$$h(\mathbf{r}) \int_V d^3 r' \nabla' \cdot \left( \nabla' \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \right) = h(\mathbf{r}) \int_S d\mathbf{a}' \cdot \left( -\frac{\boldsymbol{\epsilon}}{\epsilon^3} \right) = -4\pi h(\mathbf{r}). \quad (2.67)$$

Der Ausgangspunkt zur Bestimmung des Potential mit der Greenschen Funktion ist der erste Greensche Satz (2.40). Identifiziert man darin  $\phi$  mit der gesuchten Lösung von (2.62) und  $\psi$  mit der Greenschen Funktion, so folgt

$$\int_V d^3 r' (\phi' \Delta' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \psi' \Delta' \phi') = \int_S da' (f' \partial_{n'} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') g'). \quad (2.68)$$

Mit den Quellen von  $\phi$  und  $G$  folgt für die verschiedenen Randbedingungen,

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_V d^3 r' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varrho' + \begin{cases} -\frac{1}{4\pi} \int_S da' \partial_{n'} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') f' \\ \phi_0 + \frac{1}{4\pi} \int_S da' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') g' \\ 0 \end{cases} \quad (2.69)$$

Die Konstante  $\phi_0$  wird durch die Randbedingung bestimmt. Das Vektorfeld selbst ist unabhängig von dieser Konstanten. Die Darstellung zeigt, daß das Potential  $\phi(\mathbf{r})$  durch seine Quellen und durch die Randwerte für  $\phi$  bzw.  $\partial_n \phi$  bestimmt wird. Die Lösung des Randwertproblems ist damit auf die Bestimmung der Greenschen Funktion und eine Integration zurückgeführt.

Verwendet man die Greensche Funktion (2.64) in (2.69) und vernachlässigt den Oberflächenbeitrag für  $r \rightarrow \infty$ , so erhält man für das skalare Potential eines wirbel-freien Feldes die Darstellung

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_V d^3 r' \frac{\varrho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (2.70)$$

Das zugehörige Vektorfeld  $\mathbf{F} = -\nabla \phi$  wird durch (2.56) angegeben.

## 2.4.4 Quellenfreie Vektorfelder

Sei  $\mathbf{F}$  nun ein quellenfreies Vektorfeld dessen Wirbel in einem einfach zusammenhängenden Gebiet vorgegeben sind,

$$\nabla \times \mathbf{F} = \boldsymbol{\omega}, \quad \nabla \cdot \mathbf{F} = 0. \quad (2.71)$$

Die Wirbelverteilung muß nach der ersten Gleichung die Bedingung  $\nabla \cdot \boldsymbol{\omega} = 0$  erfüllen.

Quellenfreie Felder lassen sich durch ein *Vektorpotential*  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  in der Form

$$\mathbf{F} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.72)$$

darstellen. Diese Darstellung ist nicht eindeutig, da  $\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi$  das gleiche Vektorfeld bestimmt. Eine Zusatzbedingung an das Gradientenfeld, wie z.B.  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ , nennt man eine Eichung von  $\mathbf{A}$ .

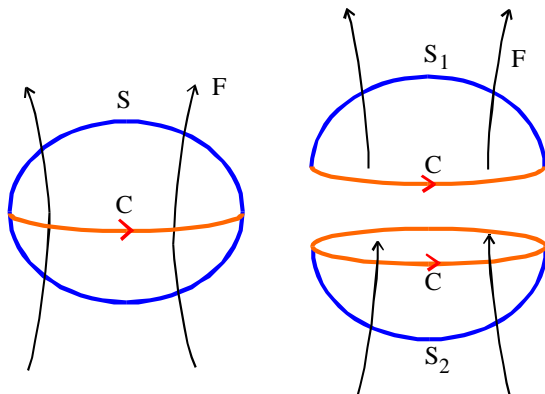


Abbildung 2.3: Fluß durch eine geschlossene Oberfläche  $S$  und durch die beiden von einer geschlossenen Kurve  $C$  berandeten Teilflächen  $S_1$  und  $S_2$ . Für ein quellenfreies Feld hängt der Fluß durch eine Teilfläche nur von der Lage der Randkurve  $C$  ab.

Das Vektorfeld (2.72) ist sicher quellenfrei. Die Umkehrung, daß sich ein quellenfreies Vektorfeld durch (2.72) darstellen läßt, muß noch gezeigt werden. Wir machen dazu eine analoge Überlegung wie im Fall des skalaren Potentials. Aus der Quellenfreiheit folgt mit dem Gaußschen Satz, daß der Fluß von  $\mathbf{F}$  durch eine beliebige geschlossene Oberfläche verschwindet. Unterteilt man die geschlossene Oberfläche entlang einer Kurve  $C$  in zwei Hälften  $S_1$  und  $S_2$ , so gilt

$$\int_{S_1} d\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{F} = \int_{S_2} d\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{F}, \quad d\mathbf{a}_{1,2} = \pm d\mathbf{a}. \quad (2.73)$$

Der Fluß

$$\phi_C = \int_S d\mathbf{a} \cdot \mathbf{F} \quad (2.74)$$

durch eine von der Kurve  $C$  berandete Fläche  $S$  hängt also nur von der Lage der Randkurve aber nicht von der Form der Fläche in dem von der Kurve umschlossenen Gebiet ab. Daher kann man diesen Fluß auch als ein Kurvenintegral entlang des Randes

$$\phi_C = \oint_C d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} \quad (2.75)$$

mit einem neuen Vektorfeld  $\mathbf{A}$  schreiben. Mit dem Stokeschen Satz folgt für ein beliebiges Flächenelement

$$d\mathbf{a} \cdot \nabla \times \mathbf{A} = d\mathbf{a} \cdot \mathbf{F}. \quad (2.76)$$

Da die Richtung von  $d\mathbf{a}$  beliebig gewählt werden kann, folgt daraus die Behauptung (2.72).

Setzt man (2.72) in (2.71) ein, so ergibt sich für das Vektorpotential die Bestimmungsgleichung,

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \Delta \mathbf{A} = \boldsymbol{\omega}. \quad (2.77)$$

Wählt man die Eichung  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ , so vereinfacht sich diese Gleichung zu,

$$\Delta \mathbf{A} = -\boldsymbol{\omega}. \quad (2.78)$$

Jede Komponente von  $\mathbf{A}$  erfüllt dieselbe Gleichung, wie das skalare Potential in (2.62). Wir können daher die Lösung dieser Gleichung übernehmen und erhalten für das Vektorpotential eines quellenfreien Feldes die Darstellung

$$\mathbf{A} = \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{\boldsymbol{\omega}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (2.79)$$

Diese Lösung erfüllt wegen  $\nabla \cdot \boldsymbol{\omega} = 0$  bereits die Eichung von  $\mathbf{A}$ ,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{A} &= \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \boldsymbol{\omega}' \cdot \nabla \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ &= \frac{-1}{4\pi} \int d^3r' \boldsymbol{\omega}' \cdot \nabla' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ &= \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{\nabla' \cdot \boldsymbol{\omega}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = 0. \end{aligned} \quad (2.80)$$

Das zugehörige Vektorfeld ergibt sich durch Bildung der Rotation,

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \nabla \times \mathbf{A} = \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \nabla \left( \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \times \boldsymbol{\omega}' \\ &= \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{\boldsymbol{\omega}' \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}. \end{aligned} \quad (2.81)$$

**Wirbelfreie Vektorfelder:** Gilt  $\nabla \times \mathbf{F} = 0$ ,  $\nabla \cdot \mathbf{F} \rightarrow 0$  für  $r \rightarrow \infty$  so kann  $\mathbf{F}$  durch seine Quellen mit Hilfe eines skalaren Potentials  $\phi$  dargestellt werden:

$$\mathbf{F} = -\nabla\phi, \quad \phi = \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{\nabla' \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

**Quellenfreie Vektorfelder:** Gilt  $\nabla \cdot \mathbf{F} = 0$ ,  $\nabla \times \mathbf{F} \rightarrow 0$ , für  $r \rightarrow \infty$  so kann  $\mathbf{F}$  durch seine Wirbel mit Hilfe eines Vektorpotentials  $\mathbf{A}$  dargestellt werden,

$$\mathbf{F} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{A} = \frac{1}{4\pi} \int d^3r' \frac{\nabla' \times \mathbf{F}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

**Allgemeines Vektorfeld:** Gilt  $\nabla \cdot \mathbf{F} \rightarrow 0$ ,  $\nabla \times \mathbf{F} \rightarrow 0$ , für  $r \rightarrow \infty$  so läßt sich  $\mathbf{F}$  in die Summe aus einem wirbelfreien Feld  $\mathbf{F}_1$  und einem quellenfreien Feld  $\mathbf{F}_2$  zerlegen:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2, \quad \mathbf{F}_1 = -\nabla\Phi, \quad \mathbf{F}_2 = \nabla \times \mathbf{A}.$$

## 2.5 Taylor-Reihe einer Funktion mit mehreren unabhängigen Variablen

Sei  $f = f(x_i)$  eine hinreichend oft differenzierbare Funktion der unabhängigen Variablen  $x_i$ ,  $i = 1, 2, 3, \dots$ . Für  $x_i \rightarrow 0$  kann die Funktion nach Potenzen der Variablen  $x_i$  entwickelt werden. Bis zur quadratischen Ordnung lautet diese Entwicklung

$$f(x_i) = f(0) + \sum_i x_i \frac{\partial f(0)}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} x_i x_j \frac{\partial^2 f(0)}{\partial x_i \partial x_j} + O(x_i^3). \quad (2.82)$$

**Beweis:** Eine allgemeine Entwicklung der Funktion  $f$  nach Potenzen von  $x_i$  lautet,

$$f(x_i) = c + \sum_i c_i x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} c_{ij} x_i x_j + O(x_i^3). \quad (2.83)$$

Die Entwicklungskoeffizienten  $c$ ,  $c_i$ ,  $c_{ij}$  stellen noch zu bestimmende Konstanten dar. Die Matrix  $c_{ij}$  kann ohne Einschränkung symmetrisch ( $c_{ij} = c_{ji}$ ) gewählt werden, da der antisymmetrische Anteil bei der Summation über die symmetrische Matrix  $x_i x_j$  verschwindet. Die ersten und zweiten partiellen Ableitungen von (2.83) sind

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x_k} &= c_k + \frac{1}{2} \sum_j c_{kj} x_j + c_{jk} x_j + O(x_i^2) = c_k + \sum_j c_{kj} x_j + O(x_i^2), \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_k} &= c_{ki} + O(x_i). \end{aligned} \quad (2.84)$$

Aus (2.83) und (2.84) ergeben sich die Entwicklungskoeffizienten

$$c = f(0) , \quad c_i = \frac{\partial f(0)}{\partial x_i} , \quad c_{ij} = \frac{\partial^2 f(0)}{\partial x_i \partial x_j} \quad (2.85)$$

in Übereinstimmung mit der Reihenentwicklung (2.82).

## 2.6 Distributionen

Die Delta-Funktion ist ein Beispiel einer Distribution. Distributionen sind keine gewöhnlichen Funktionen. Einige Eigenschaften von Distributionen werden im folgenden zusammengefaßt.

**Funktionale:** Eine Abbildung  $G$ , die einer Funktion  $f(x)$  eine reelle Zahl  $G(f)$  zuordnet, wird als Funktional bezeichnet. Distributionen sind definiert als lineare stetige Funktionale.

**Funktionale, die durch Funktionen darstellbar sind:** Sei  $G(x)$  eine gewöhnliche Funktion. Dann wird dieser Funktion durch das Integral

$$G(f) = \int_{-\infty}^{\infty} dx G(x)f(x) \quad (2.86)$$

eine Distribution  $G(f)$  zugeordnet. Hierbei wird angenommen, daß das Integral für alle Funktionen  $f$  des Definitionsgebietes von  $G$  konvergiert.

**Delta-Distribution:** Es gibt jedoch auch Distributionen, die sich nicht durch gewöhnliche Funktionen darstellen lassen. Die Delta-Distribution sei definiert durch die Abbildung,

$$\delta_a(f) = f(a), \quad (2.87)$$

d.h. sie ordnet der Funktion  $f(x)$  ihren Funktionswert an der Stelle  $x = a$  zu. Symbolisch schreibt man auch diese Distribution als Integral

$$\delta_a(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - a)f(x). \quad (2.88)$$

Die hierdurch definierte Delta-Funktion wurde von Dirac eingeführt. Sie ist keine gewöhnliche Funktion. Ausführlicher ist damit ein Grenzübergang

$$\delta_a(f) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta_\epsilon(x - a)f(x) \quad (2.89)$$

gemeint, wobei man eine Funktion  $\delta_\epsilon(x)$  mit dieser Eigenschaft als Darstellung der Delta-Funktion bezeichnet. Wichtig ist, daß der Grenzübergang  $\epsilon \rightarrow 0$  erst nach der

Integration ausgeführt wird. Beispiele für Darstellungen der  $\delta$ -Funktion sind:

$$\delta_\epsilon(x) = \begin{cases} 0, & |x| > \frac{\epsilon}{2} \\ \frac{1}{\epsilon}, & |x| < \frac{\epsilon}{2} \end{cases}$$

$$\delta_\epsilon(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} \quad (2.90)$$

$$\delta_\epsilon(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \epsilon} e^{-\frac{x^2}{2\epsilon^2}}$$

**Theta-Funktion:** Das Integral über die Delta-Funktion

$$\theta(x - a) = \int_{-\infty}^x dx' \delta(x' - a) = \begin{cases} 1 & \text{für } x > a \\ 0 & \text{für } x < a \end{cases}$$

wird als Theta-Funktion bezeichnet. Umgekehrt kann man die Delta-Funktion als Ableitung der Theta-Funktion auffassen.

**Variablensubstitution:** Die Delta-Funktion besitzt folgende Eigenschaften, die man durch Variablensubstitution beweisen kann.

$$\begin{aligned} \delta(-x) &= \delta(x) \\ \delta(ax) &= \frac{1}{|a|} \delta(x) \\ \delta(\psi(x)) &= \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{|\psi'(x_i)|}; \quad \psi(x_i) = 0; \quad \psi'(x_i) \neq 0 \end{aligned}$$

In der letzten Formel ist die Funktion  $\psi(x)$  eine Funktion, die nur einfache Nullstellen an den Stellen  $x = x_i$  besitzt.

**Mehrdimensionale Delta-Funktion:** Die Delta-Funktion läßt sich auf eine beliebige Anzahl von Dimensionen erweitern. Bei Verwendung kartesischer Koordinaten in drei Dimensionen gilt

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \delta(x - x') \delta(y - y') \delta(z - z') \quad (2.91)$$

**Distributionen als Lösungen von Differentialgleichungen:** Distributionen treten häufig als Lösungen von Differentialgleichungen auf. Die Ableitung einer Distribution wird definiert als

$$G'(f) = -G(f') . \quad (2.92)$$

Diese Definition ergibt sich auch, wenn man die Distributionen, die von einer gewöhnliche Funktion  $G(x)$  und deren Ableitung  $G'(x)$  erzeugt werden, miteinander vergleicht:

$$G'(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx G'(x) f(x) = - \int_{-\infty}^{+\infty} dx G(x) f'(x) = -G(f') . \quad (2.93)$$

Für die Ableitung (2.92) einer Distribution braucht jedoch die Ableitung  $G'(x)$  nicht zu existieren.

Ein Beispiel einer Distributionslösung ist die Greensche Funktion

$$\Delta G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') , \quad G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} . \quad (2.94)$$

Sie ist im Punkt  $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$  nicht differenzierbar. Der Gradient bestimmt das Vektorfeld,

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} . \quad (2.95)$$

Die Divergenz des Vektorfeldes bestimmt die Punktquelle. Faßt man beide Seiten der Gleichung als Distributionen auf, so können diese auf eine reguläre Funktion  $u$  angewandt werden und man erhält

$$\begin{aligned} \int d^3r' u(\mathbf{r}') \Delta' G(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) &= -4\pi \int d^3r' u(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \\ \int d^3r' G(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \Delta' u(\mathbf{r}') &= -4\pi u(\mathbf{r}) . \\ u(\mathbf{r}) &= \frac{-1}{4\pi} \int d^3r' G(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \Delta' u(\mathbf{r}') . \end{aligned} \quad (2.96)$$

Sei nun  $u$  die gesuchte Lösung der Poisson-Gleichung (3.21) zu einer stetigen Ladungsdichte  $\varrho$ . Dann erhält man für diese Lösung mit (2.96) die Integraldarstellung

$$u(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int d^3r' G(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \varrho(\mathbf{r}') . \quad (2.97)$$

Für die Integraldarstellung der Lösung  $u$  genügt es, daß die Greensche Funktion als Distribution existiert.



# Kapitel 3

## Elektrostatik

Von ruhenden Ladungen werden zeitunabhängige elektrische Felder hervorgerufen. Die Grundgesetze der Elektrostatik bestimmen das elektrische Feld zu einer beliebigen vorgegebenen Ladungsverteilung. Für makroskopische Körper sind zusätzliche Annahmen erforderlich, da die genaue Verteilung der Ladungen hier nicht bekannt ist. Man unterscheidet hierbei grundsätzlich zwischen der Elektrostatik von Leitern und der von Nichtleitern. Letztere werden auch als Dielektrika bezeichnet.

### 3.1 Grundgleichungen der Elektrostatik

#### 3.1.1 Elektrostatisches Feld

**Punktladungen:** Eine Punktladung  $q_i$  am Ort  $\mathbf{r}_i$  erzeugt im Punkt  $\mathbf{r}$  das elektrische Feld

$$\mathbf{E}_i(\mathbf{r}) = q_i \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^3}. \quad (3.1)$$

Das elektrostatische Feld, welches von  $N$  Punktladungen  $q_i$ , die sich an den Orten  $\mathbf{r}_i$  befinden, in einem Punkt  $\mathbf{r}$  erzeugt wird, ergibt sich durch die vektorielle Addition der Felder der einzelnen Ladungen,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{E}_i(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N q_i \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^3}. \quad (3.2)$$

Dieses Gesetz wird als Superpositionsprinzip bezeichnet. Zusammen mit dem Coulomb-Gesetz bestimmt es das elektrostatische Feld einer beliebigen vorgegebenen Anordnung von Ladungen.

**Ladungsdichte:** Ladungsverteilungen im Raum können durch eine Ladungsdichte angegeben werden. Die Ladungsdichte  $\varrho(\mathbf{r})$  wird definiert durch die Ladung  $\varrho(\mathbf{r})d^3r$

in einem Volumenelement  $d^3r$  am Ort  $\mathbf{r}$ . Für makroskopische Systeme wird die Ladungsdichte eine stetige Funktion des Ortes, da die Schwankungen der Teilchenzahl benachbarter Volumenelemente mit wachsender Teilchenzahl rasch abnehmen. Die Summation über Ladungen kann durch die Substitution,

$$\sum_i q_i f(\mathbf{r}_i) \rightarrow \int_V d^3r' \varrho(\mathbf{r}') f(\mathbf{r}') , \quad (3.3)$$

ersetzt werden.

**Feld einer stetigen Ladungsverteilung:** Das elektrische Feld einer vorgegebenen Ladungsdichte erhält man aus (3.2) und (3.3) zu,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \int_V d^3r' \varrho(\mathbf{r}') \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} . \quad (3.4)$$

Dieses Ergebnis gilt zunächst für Punkte  $\mathbf{r}$  außerhalb der Ladungsverteilung. Liegt der Aufpunkt  $\mathbf{r}$  innerhalb der Ladungsverteilung, so muß noch gezeigt werden, daß die Umgebung des Punktes keinen Beitrag zum Gesamtfeld ergibt, da die Kraft auf eine punktförmige Probeladung im Punkt  $\mathbf{r}$  im Prinzip nur durch die Ladungen außerhalb dieses Punktes erzeugt werden darf. Betrachtet man eine Kugel  $K$  mit einem beliebig kleinen Radius  $\epsilon$  um den Punkt  $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$ , so erhält man für eine stetige Ladungsdichte im Grenzfall  $\epsilon \rightarrow 0$  die Abschätzung,

$$\left| \int_K d^3r' \varrho(\mathbf{r}') \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \right| \leq 4\pi \varrho(\mathbf{r}) \int_0^\epsilon dr \rightarrow 0 . \quad (3.5)$$

Da dieser Beitrag verschwindet, gilt (3.4) für alle Punkte innerhalb und außerhalb der Ladungsverteilung.

### 3.1.2 Elektrostatisches Potential

Um ein Teilchen gegen eine Kraft  $\mathbf{F}$  von  $\mathbf{a}$  nach  $\mathbf{b}$  zu bewegen, muß die Arbeit

$$W = - \int_{\mathbf{a}}^{\mathbf{b}} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \quad (3.6)$$

verrichtet werden. Im allgemeinen hängt die Arbeit vom Weg ab. Nur für konservative Kräfte ist Sie wegunabhängig. Wir betrachten nun die Arbeit, die notwendig ist, um eine Ladung  $q$  in einem elektrostatischen Feld aus dem Unendlichen an den Ort  $\mathbf{r}$  zu bringen.

**Punktladung bei  $\mathbf{r} = 0$ :** Wird das elektrostatische Feld durch eine Punktladung  $q_1$  am Ort  $\mathbf{r}_1 = 0$  erzeugt, dann gilt für die an  $q$  verrichtete Arbeit

$$W = - \int_{\infty}^{\mathbf{r}} \frac{qq_1 \mathbf{r} \cdot d\mathbf{r}}{r^3} = -qq_1 \int_{\infty}^r \frac{dr}{r^2} = q\Phi(\mathbf{r}) , \quad \Phi(\mathbf{r}) = \frac{q_1}{r} . \quad (3.7)$$

Die Funktion  $\Phi(\mathbf{r})$  wird als elektrostatisches Potential der Punktladung bezeichnet. Das elektrische Feld ergibt sich aus diesem Potential durch Gradientenbildung,

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi . \quad (3.8)$$

Die Coulombkraft ist daher konservativ.

**Punktladung bei  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1$ :** Das Potential einer Punktladung  $q_1$  am Ort  $\mathbf{r}_1$  erhält man durch eine Verschiebung des Koordinatenursprungs,

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{q_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} . \quad (3.9)$$

**System von Punktladungen:** Wegen der linearen Beziehung (3.8), gilt das Superpositionsprinzip entsprechend für das elektrostatische Potential:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_i \frac{q_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} . \quad (3.10)$$

**Stetige Ladungsverteilung:** Ersetzt man die Summation über Ladungen wiederum durch eine Integration über das Volumen so erhält man

$$\Phi(\mathbf{r}) = \int_V d^3r' \frac{\varrho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} , \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\Phi(\mathbf{r}) . \quad (3.11)$$

Mit Hilfe des Potentials (3.11) kann das elektrische Feld durch nur eine Integration (und 3 anschließende Differentiationen) berechnet werden. Dieser Weg ist in der Regel einfacher als die direkte Ausführung der drei Integrationen (3.4) für die Komponenten des elektrischen Feldes.

### 3.1.3 Feldgleichungen

Räumliche Vektorfelder können durch die Angabe ihrer Quellen (Divergenz) und Wirbel (Rotation) bestimmt werden. Die entsprechenden Differentialgleichungen werden als Feldgleichungen bezeichnet.

**Feldgleichungen für eine Punktladung:** Wir betrachten zuerst die Rotation und die Divergenz des elektrischen Feldes

$$\mathbf{E} = q \frac{\mathbf{r}}{r^3} \quad (3.12)$$

einer Punktladung  $q$  bei  $\mathbf{r} = 0$ . Da die Rotation eines radialsymmetrischen Feldes  $f(r)\mathbf{r}$  verschwindet, gilt für (3.12)

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0 . \quad (3.13)$$

Hierfür ist nur die Symmetrie des Feldes, nicht die Abstandsabhängigkeit wesentlich. Die Divergenz kann leicht mit Hilfe des Gaußschen Satzes berechnet werden. Zunächst betrachten wir ein Volumenelement in Kugelkoordinaten um einen Punkt  $\mathbf{r} \neq 0$ . Der Fluß von  $\mathbf{E}$  durch die Oberfläche des Volumenelementes verschwindet, da der Fluß nur in radialer Richtung auftritt und das Flächenelement der Kugeloberfläche  $r^2 d\Omega$  die zur Coulomb-Kraft reziproke Abstandsabhängigkeit besitzt,

$$\int d\mathbf{f} \cdot \mathbf{E} = \int d\Omega r^2 E \Big|_r^{r+dr} = 0. \quad (3.14)$$

Damit ist die Divergenz des Coulomb-Feldes (3.12) außerhalb des Koordinatenursprungs überall Null. Die Divergenz im Koordinatenursprung ergibt sich, indem man den Gaußschen Satz auf ein Kugelvolumen  $V(r)$  um den Koordinatenursprung anwendet und danach den Kugelradius  $r$  gegen Null gehen läßt. Der Fluß durch die Kugeloberfläche ist

$$\int d\mathbf{f} \cdot \mathbf{E} = \int d\Omega r^2 \frac{q}{r^2} = 4\pi q. \quad (3.15)$$

Die Divergenz des Feldes bei  $\mathbf{r} = 0$  ist demnach

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{4\pi q}{V(r)} \equiv 4\pi q \delta(\mathbf{r}). \quad (3.16)$$

Die Ladungsdichte der Punktladung wird hier mit Hilfe der Diracschen Delta-Funktion angegeben. Sie besitzt die Eigenschaften

$$\begin{aligned} \delta(\mathbf{r}) &= 0 ; \quad \mathbf{r} \neq 0, \\ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{r \leq \epsilon} d^3r \delta(\mathbf{r}) &= 1, \\ \int d^3r' f(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= f(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Die Ladungsdichte eines Systems von Punktladungen ist entsprechend

$$\varrho(\mathbf{r}) = \sum_i q_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i). \quad (3.18)$$

Die Integration über das Volumen ergibt auch hier die Gesamtladung,

$$\int d^3r \varrho(\mathbf{r}) = \sum_i q_i \int d^3r \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = \sum_i q_i. \quad (3.19)$$

**Feldgleichungen einer Ladungsverteilung:** Aus den Feldgleichungen für eine Punktladung ergeben sich mit Hilfe des Superpositionsprinzips die allgemeinen Feldgleichungen der Elektrostatik

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi \varrho(\mathbf{r}). \quad (3.20)$$

Die erste der beiden Gleichung wird durch die Einführung des Potentials (3.8) gelöst. Die Bestimmung des elektrischen Feldes für eine gegebene Ladungsverteilung ist damit auf das Potentialproblem

$$\Delta\Phi = -4\pi\rho(\mathbf{r}) , \quad \mathbf{E} = -\nabla\Phi \quad (3.21)$$

zurückgeführt. Die homogene Gleichung ( $\rho(\mathbf{r}) = 0$ ) wird als Laplace-Gleichung, die inhomogene ( $\rho(\mathbf{r}) \neq 0$ ) als Poisson-Gleichung bezeichnet.

## 3.2 Elektrostatik vorgegebener Ladungsverteilungen

### 3.2.1 Radialsymmetrische Felder

Symmetrische Ladungsverteilungen besitzen i.a. besonders einfache symmetrische Lösungen. Im folgenden betrachten wir radialsymmetrische elektrische Felder deren Potential und Ladungsdichte nur vom Abstand vom Koordinatenursprung abhängt.

**Ladungsdichte:** Wir betrachten eine homogene ebene Schicht, einen homogenen Zylinder und eine homogene Kugel, deren Ladungsdichten einheitlich in der Form,

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_0 \theta(R - r) , & (3.22) \\ \text{Ebene Schicht (n=1):} & \quad r = \sqrt{x^2} \\ \text{Zylinder (n=2):} & \quad r = \sqrt{x^2 + y^2} \\ \text{Kugel (n=3):} & \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \end{aligned}$$

dargestellt werden können. Aus der konstanten Ladungsdichte  $\rho_0$  erhält man die Gesamtladung  $Q$  der Kugel, die Ladung pro Längeneinheit  $\lambda$  des Zylinders und die Ladung pro Flächeneinheit  $\sigma$  der ebenen Schicht gemäß

$$\begin{aligned} Q &= \rho_0 \frac{4\pi}{3} R^3 \quad \text{für } n = 3 , \\ \lambda &= \rho_0 \pi R^2 \quad \text{für } n = 2 , \\ \sigma &= \rho_0 2R \quad \text{für } n = 1 . \end{aligned}$$

**Elektrisches Feld:** Das elektrische Feld besitzt aus Symmetriegründen nur eine vom Abstand abhängige radiale Komponente  $E(r)$ , die durch die Poisson-Gleichung

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{r^{n-1}} \partial_r (r^{n-1} E) = 4\pi\rho$$

bestimmt wird. Als Lösung für  $E(r)$  erhalten wir

$$r > R: \quad r^{n-1}E(r) = R^{n-1}E(R); \quad E(r) = E(R) \left(\frac{R}{r}\right)^{n-1}$$

$$r < R: \quad r^{n-1}E(r) = 4\pi\rho_0 \int_0^r dr' r'^{n-1} = 4\pi\rho_0 \frac{r^n}{n}; \quad E(r) = E(R) \frac{r}{R};$$

$$E(R) = \frac{4\pi\rho_0}{n}R = \begin{cases} 2\pi\sigma; & \text{für } n = 1 \\ 2\lambda/R; & \text{für } n = 2 \\ Q/R^2; & \text{für } n = 3 \end{cases}$$

**Potential:** Das zugehörige Potential ist dann für

**n=1:**

$$\Phi(R) = 0; \quad \Phi(r) = - \int_R^r E(r') dr' = -R \int_1^{r/R} E(r'/R) d(r'/R)$$

$$r < R: \quad \Phi(r) = -E(R) \frac{R}{2} \left(\frac{r^2}{R^2} - 1\right)$$

$$= E(R) \frac{R}{2} \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)$$

$$r > R: \quad \Phi(r) = -RE(R) \left(\frac{r}{R} - 1\right)$$

**n=2:**  $\Phi(R) = 0$

$$r < R: \quad \Phi(r) = -E(R) \frac{R}{2} \left(1 - \frac{r}{R}\right)$$

$$= \lambda \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)$$

$$r > R: \quad \Phi(r) = -RE(R) \int_1^{r/R} \frac{dx}{x}$$

$$= -RE(R) \ln\left(\frac{r}{R}\right)$$

$$= -2\lambda \ln\left(\frac{r}{R}\right)$$

$\mathbf{n=3}$ :  $\Phi(R = \infty) = 0$

$$\begin{aligned}
 r < R: \quad \Phi(r) &= Q/R - RE(R) \int_1^{r/R} dx x \\
 &= Q/R - RE(R) \frac{1}{2} \left( \frac{r^2}{R^2} - 1 \right) \\
 &= \frac{Q}{R} \left( \frac{3}{2} - \frac{r^2}{2R^2} \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 r > R: \quad \Phi(r) &= -RE(R) \int_1^{r/R} \frac{dx}{x^2} \\
 &= -RE(R) \frac{R}{r} \\
 &= \frac{Q}{r}
 \end{aligned}$$

### 3.2.2 Dipole

Zwei Punktladungen  $q_1, q_2$  an den Orten  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  mit dem relativen Abstand  $\mathbf{d} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  und der Gesamtladung  $q_1 + q_2 = 0$  ( $q_1 > 0$ ) erzeugen am Ort  $\mathbf{r}$  das Potential eines physikalischen Dipols

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{q_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} + \frac{q_2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|}$$

In sehr großer Entfernung ( $r \gg r_{1,2}$ )

$$\begin{aligned}
 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{1,2}|^2 &= r^2 + r_{1,2}^2 - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_{1,2} \\
 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{1,2}| &= r \left( 1 - \frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}_{1,2}}{r} \right); \quad \mathbf{r} = r\hat{\mathbf{r}} \\
 \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{1,2}|} &= \frac{1}{r} \left( 1 + \frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}_{1,2}}{r} \right)
 \end{aligned}$$

ergibt sich das Potential eines mathematischen Dipols

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{q_1 + q_2}{r} + \frac{(q_1\mathbf{r}_1 + q_2\mathbf{r}_2) \cdot \hat{\mathbf{r}}}{r^2} = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{r^3} \quad (3.23)$$

mit dem Dipolmoment

$$\mathbf{p} = q_1\mathbf{r}_1 + q_2\mathbf{r}_2 = q_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) .$$

Neutrale Atome besitzen wegen ihrer Spiegelsymmetrie kein permanentes Dipolmoment. Nichtspiegelsymmetrische Moleküle können ein permanentes Dipolmoment besitzen (*polare Moleküle*). Zum Beispiel besitzt das Wassermolekül ein permanentes Dipolmoment. Die H-Atome sind unter einem Winkel von etwa  $108^\circ$  an das O-Atom gebunden.

**Äquipotentialflächen:** Wenn die Dipolrichtung als Polarachse gewählt wird, ist das Dipolpotential

$$\Phi = \frac{p \cos \Theta}{r^2}$$

und die Äquipotentialflächen des Dipols können aus der Gleichung  $r^2 = \frac{p \cos \Theta}{\Phi}$  bestimmt werden.

**Feldstärke:** Für die zugehörige elektrische Feldstärke gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= -\nabla\Phi = -\frac{\mathbf{p}}{r^3} - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} \nabla \frac{1}{r^3} \\ &= 3 \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{r}}{r^5} - \frac{\mathbf{p}}{r^3} \end{aligned} \quad (3.24)$$

Wegen der Rotationssymmetrie des Feldes um die Dipolachse kann das Feld in zwei Komponenten zerlegt werden. Die Komponenten des elektrischen Feldes senkrecht und parallel zum Dipol lauten:

$$E_{\perp} = 3p \frac{\cos \Theta \sin \Theta}{r^3} \quad (3.25)$$

$$E_{\parallel} = 3p \frac{\cos^2 \Theta - 1}{r^3} \quad (3.26)$$

**Potentielle Energie:** Ein Dipol in einem äußeren Potential  $\Phi$  besitzt die potentielle Energie

$$U = q_1\Phi(\mathbf{r}_1) + q_2\Phi(\mathbf{r}_2) = q_1[\Phi(\mathbf{d}) - \Phi(0)] \quad (3.27)$$

$$= q_1 \mathbf{d} \cdot \nabla \Phi \quad (3.28)$$

$$= -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E} \quad (3.29)$$

Der Zustand minimaler Energie entspricht der Parallelorientierung von Dipol und Feld.

**Drehmoment:** Im Feld  $\mathbf{E}$  erfährt der Dipol  $\mathbf{p}$  ein Drehmoment

$$\mathbf{T} = \mathbf{r}_1 \times q_1 \mathbf{E} + \mathbf{r}_2 \times q_2 \mathbf{E} \quad (3.30)$$

$$= q_1 (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times \mathbf{E} \quad (3.31)$$

$$= \mathbf{p} \times \mathbf{E} \quad (3.32)$$

Wenn  $\mathbf{p}$  und  $\mathbf{E} = E\mathbf{e}_x$  in der  $xy$ -Ebene liegen, ist die  $z$ -Komponente des Drehmoments

$$T_z = -p_y E = -pE \sin \alpha = -\frac{\partial U}{\partial \alpha}$$



Das Drehmoment versucht, den Dipol parallel zum Feld auszurichten.

**Kraft im inhomogenen Feld:** Im Gegensatz zum homogenen Feld erfährt ein Dipol in einem inhomogenen Feld eine Kraft,

$$\begin{aligned}\mathbf{F} &= q_1 \mathbf{E}(\mathbf{r}_1) + q_2 \mathbf{E}(\mathbf{r}_2) \\ &= q_1 (\mathbf{d} \cdot \nabla) \mathbf{E} \\ &= \mathbf{p} \cdot \nabla \mathbf{E} .\end{aligned}\tag{3.33}$$

Mit der Identität

$$0 = \mathbf{p} \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \nabla(\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}) - \mathbf{p} \cdot \nabla \mathbf{E}$$

kann man die Kraft auch als Ableitung der potentiellen Energie des Dipols schreiben,

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

### 3.2.3 Multipolentwicklung

Wir betrachten das Potential in einem Punkt  $P$  am Ort  $\mathbf{r}$  außerhalb einer um den Koordinatenursprung lokalisierten Ladungsverteilung.  $R$  sei der Abstand des Aufpunktes  $P$  von einem Quellpunkt  $P'$  am Ort  $\mathbf{r}'$  innerhalb der Ladungsverteilung:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \int d^3r' \frac{\varrho(\mathbf{r}')}{R}, \quad \mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}', \quad R = \sqrt{\sum_i (x_i - x'_i)^2}\tag{3.34}$$

**Entwicklung von  $\frac{1}{R}$ :** Für große Abstände von der Ladungsverteilung ( $r \gg r'$ ) kann die Funktion  $\frac{1}{R}$  bezüglich der Koordinaten  $x'_i$  des Quellpunktes in eine Taylorreihe entwickelt werden:

$$\frac{1}{R} = c + \sum_i c_i x'_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} c_{ij} x'_i x'_j + O(x_i^3).\tag{3.35}$$

Die Entwicklungskoeffizienten lauten:

$$c = \left. \frac{1}{R} \right|_{\mathbf{r}'=0} = \frac{1}{r}\tag{3.36}$$

$$\begin{aligned}c_i &= \left. \frac{\partial}{\partial x'_i} \frac{1}{R} \right|_{\mathbf{r}'=0} = - \left( \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{R} \right)_{\mathbf{r}'=0} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{r} \\ &= - \left( -\frac{1}{r^2} \right) \frac{x_i}{r} = \frac{x_i}{r^3}\end{aligned}\tag{3.37}$$

$$\begin{aligned}c_{ij} &= \left. \frac{\partial^2}{\partial x'_j \partial x'_i} \frac{1}{R} \right|_{\mathbf{r}'=0} = \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_i} \frac{1}{r} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( -\frac{x_i}{r^3} \right) \\ &= 3 \frac{x_i x_j}{r^5} - \frac{\delta_{ij}}{r^3}\end{aligned}\tag{3.38}$$

Die Matrix  $c_{ij}$  ist spurfrei:

$$\sum_i c_{ii} = \Delta' \frac{1}{R} \Big|_{\mathbf{r}'=0} = \Delta \frac{1}{r} = \sum_i \left( \frac{3x_i^2}{r^5} - \frac{1}{r^3} \right) = 0 \quad (3.39)$$

**Multipolentwicklung:** Setzt man (3.35) in (3.34) ein, so ergibt sich eine Entwicklung des Potentials nach Multipolen der Ladungsverteilung

$$\Phi(\mathbf{r}) = \Phi_0(\mathbf{r}) + \Phi_1(\mathbf{r}) + \Phi_2(\mathbf{r}) + \dots \quad (3.40)$$

$$\Phi_0(\mathbf{r}) = c \int d^3r' \varrho(\mathbf{r}')$$

$$\Phi_1(\mathbf{r}) = \sum_i c_i \int d^3r' \varrho(\mathbf{r}') x'_i$$

$$\Phi_2(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} c_{ij} \int d^3r' \varrho(\mathbf{r}') x'_i x'_j$$

$\Phi_n(\mathbf{r})$  ist von der Ordnung  $r^{-(n+1)}$ . Die ersten drei Multipolordnungen ergeben die folgenden Beiträge:

**Monopol**

$$\Phi_0(\mathbf{r}) = \frac{Q}{r} \quad \propto \frac{1}{r} \quad (3.41)$$

Gesamtladung:

$$Q = \int d^3r \varrho(\mathbf{r}) \quad (3.42)$$

**Dipol:**

$$\Phi_1(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{r^3} \quad \propto \frac{1}{r^2} \quad (3.43)$$

Dipolmoment:

$$\mathbf{p} = \int d^3r \varrho(\mathbf{r}) \mathbf{r} \quad (3.44)$$

Das Dipolmoment hängt i.a. vom Ursprung des Koordinatensystems ab. Bei einer Verschiebung des Koordinatenursprungs  $\mathbf{r} = \tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{a}$  transformiert sich das Dipolmoment gemäß

$$\mathbf{p} = \tilde{\mathbf{p}} + Q\mathbf{a}.$$

Verschwindet die Gesamtladung, so ist das Dipolmoment unabhängig vom Koordinatenursprung:

$$\mathbf{p} = \tilde{\mathbf{p}} \quad \text{für } Q = 0.$$

**Quadrupol:**

$$\Phi_2(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} Q_{ij} \frac{x_i x_j}{r^5} \quad (3.45)$$

Quadrupolmoment:

$$Q_{ij} = \int d^3r (3x_i x_j - r^2 \delta_{ij}) \varrho(\mathbf{r}) \quad (3.46)$$

Der Quadrupolmomententensor ist symmetrisch und spurfrei. Er besitzt daher i.a. nur 5 unabhängige Elemente. Wählt man als Koordinatensystem das Hauptachsensystem des symmetrischen Tensors, so sind von den 3 Diagonalelementen nur 2 voneinander unabhängig.

**Beweis:** Den Tensor des Quadrupolmoments  $Q_{ij}$  erhält man aus den Entwicklungskoeffizienten  $c_{ij}$ , indem man ausnutzt, daß  $c_{ij}$  spurfrei ist:

$$\begin{aligned} \Phi_2 &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} c_{ij} \int d^3r' x'_i x'_j \varrho(\mathbf{r}') \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} c_{ij} \int d^3r' \left( x'_i x'_j - \frac{1}{3} r'^2 \delta_{ij} \right) \varrho(\mathbf{r}') \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} c_{ij} \frac{1}{3} Q_{ij}. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Da die Spur  $\sum_i Q_{ii}$  des Quadrupolmoments verschwindet, folgt

$$\begin{aligned} \Phi_2 &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left( 3 \frac{x_i x_j}{r^5} - \frac{\delta_{ij}}{r^3} \right) \frac{1}{3} Q_{ij} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} Q_{ij} \frac{x_i x_j}{r^5}. \end{aligned}$$

### 3.2.4 Elektrostatische Energie

**Punktladung im äußeren Potential:** Um die Punktladung  $q$  aus dem Unendlichen an den Ort  $\mathbf{r}$  zu bringen, muß gegen das elektrostatische Feld die Arbeit

$$U = -q \int_{-\infty}^{\mathbf{r}} \mathbf{E} d\mathbf{r} = q \Phi(\mathbf{r}) \quad (3.48)$$

aufgebracht werden.

**Ladungsverteilung im äußeren Potential:** Beim Übergang zu einer kontinuierlichen Ladungsverteilung erhält man entsprechend:

$$U = \int d^3r \varrho(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}). \quad (3.49)$$

**N Punktladungen im eigenen Feld:** Die elektrostatische Energie eines Systems von  $N$  Punktladungen kann man berechnen, indem man die Ladungen  $q_i$  nacheinander aus dem Unendlichen an die Orte  $\mathbf{r}_i$  bringt. Für die  $i$ -te Ladung ist dann die Arbeit

$$U_i(\mathbf{r}_i) = q_i \sum_{j=1}^{i-1} \frac{q_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} = \sum_{j=1}^{i-1} U_{ij}; U_{ij} = \frac{q_i q_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (3.50)$$

aufzubringen. Summiert man über alle Ladungen, so ergibt sich die Aufladungsarbeit

$$U = \sum_{i=2}^N U_i(\mathbf{r}_i) = \sum_{i=2}^N \sum_{j=1}^{i-1} U_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij}. \quad (3.51)$$

**Ladungsverteilung im eigenen Feld:** Für eine kontinuierliche Ladungsverteilung kann man die Doppelsumme durch ein Doppelintegral ersetzen:

$$U = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{\varrho(\mathbf{r})\varrho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{2} \int d^3r \varrho(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}). \quad (3.52)$$

**Feldenergie:** Der elektrostatischen Energie (3.52) der Ladungsverteilung  $\rho(\mathbf{r})$  entspricht eine Feldenergie des elektrostatischen Feldes  $\mathbf{E} = -\nabla\Phi$ . Wegen  $\Phi \rightarrow 0$  für  $r \rightarrow \infty$  gilt:

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2} \int d^3r \frac{1}{4\pi} (\nabla \cdot \mathbf{E}) \Phi = \frac{1}{2} \int d^3r \frac{1}{4\pi} \nabla \cdot (\Phi \mathbf{E}) + \frac{1}{8\pi} \int d^3r E^2 \\ &= \int d^3r \frac{1}{8\pi} E^2. \end{aligned} \quad (3.53)$$

**Energiedichte des elektrischen Feldes:**

$$u = \frac{1}{8\pi} E^2 \quad (3.54)$$

### 3.3 Elektrostatik von Leitern

In Leitern gibt es frei bewegliche Elektronen, die einen Strom hervorrufen können. Im Gleichgewicht verteilen sich die Elektronen so, daß das elektrische Feld innerhalb des Leiters verschwindet und kein Strom fließt. Aufgrund der Poisson-Gleichung verschwindet auch die Ladungsdichte innerhalb des Leiters, das Potential nimmt einen konstanten Wert an. Die Ladungen, die das Feld im Inneren des Leiters zum Verschwinden bringen, müssen an dessen Oberfläche verteilt sein. Die Aufgabe besteht in der Bestimmung des elektrostatischen Feldes außerhalb des Leiters und der Ladungsverteilung auf der Oberfläche des Leiters.

**Randbedingungen:** An der Leiteroberfläche gelten für die Normalenkomponente  $\mathbf{E} \cdot \mathbf{n}$  und die Tangentialkomponente  $\mathbf{E} \cdot \mathbf{t}$  die Randbedingungen

$$\mathbf{E} \cdot \mathbf{t} = 0, \quad \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} = 4\pi\sigma. \quad (3.55)$$

Hierbei bezeichnet  $\mathbf{t}$  einen Tangentialvektor,  $\mathbf{n}$  den Normalenvektor und  $\sigma$  die Flächenladungsdichte eines Flächenelementes auf der Oberfläche des Leiters. Die erste Bedingung folgt mit dem Stokeschen Satz aus  $\nabla \times \mathbf{E} = 0$ . Die zweite Bedingung folgt mit dem Gaußschen Satz aus  $\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho$ .

### 3.3.1 Randwertprobleme der Potentialtheorie

Gesucht wird das elektrostatische Potential, das von  $N$  geladenen Leitern mit Oberflächen  $R_i$  im ladungsfreien Raum erzeugt wird. Auf den Leiteroberflächen sind entweder die Potentiale oder die Flächenladungsdichten vorgegeben. Für das gesuchte Potential  $\Phi$  ergeben sich daher die beiden Randwertprobleme:

i) vorgegebene Potentiale:

$$\begin{aligned} \Delta\Phi &= 0 \\ \Phi &= \Phi_i \quad \text{auf } R_i \text{ (Dirichlet-Randbedingung)} \end{aligned} \quad (3.56)$$

ii) vorgegebene Ladungen:

$$\begin{aligned} \Delta\Phi &= 0 \\ \partial_n\Phi_i &= -4\pi\sigma_i \quad \text{auf } R_i \text{ (von Neumann-Randbedingung)} \end{aligned} \quad (3.57)$$

**Eindeutigkeit der Lösung:** Für eine beliebige Funktion  $\psi$  gilt die Identität (1. Greenscher Satz):

$$\begin{aligned} \int_V dV \nabla \cdot (\psi \nabla \psi) &= \int_V dV \psi \Delta\psi + \int_V dV (\nabla\psi)^2 \\ &= \int_{\partial V} df_i (\partial_n\psi) \psi. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Sei  $\psi = \Phi^{(1)} - \Phi^{(2)}$  für zwei Lösungen  $\Phi^{(1)}, \Phi^{(2)}$ :

$$\sum_i \int_{R_i} df_i (\partial_n\psi) \psi = \int_V dV (\nabla\psi)^2 = 0 \quad (3.59)$$

Daher muß  $\nabla\psi = 0$ ,  $\psi = \text{const.}$  gesetzt werden. Für die Dirichlet-Randbedingung gilt  $\psi = 0$  auf  $R_i$  und damit auch  $\psi = 0$  in  $V$ . Die Lösung für  $\mathbf{E} = -\nabla\Phi$  ist für beide Randbedingungen eindeutig.

**Kapazitätskoeffizienten:**

$$\Phi_i = \sum_j P_{ij} Q_j \quad (\text{Superpositionsprinzip}) \quad (3.60)$$

$$Q_i = \sum_j C_{ij} \Phi_j \quad (\text{Umkehrfunktion}) \quad (3.61)$$

Ladungen hängen nur von den Potentialen  $\Phi_j$  und geometrischen Koeffizienten  $C_{ij}$  ab. Die elektrostatische Energie der Leiter kann mit (3.52) und (3.61) durch die Beziehung

$$U = \frac{1}{2} \sum_i Q_i \Phi_i = \frac{1}{2} \sum_{i,j} C_{ij} \Phi_i \Phi_j \quad (3.62)$$

dargestellt werden.

### 3.3.2 Bildladungen

Ein metallischer Leiter in einem elektrischen Feld kann in einigen Fällen durch eine Konfiguration von Punktladungen ersetzt werden, die innerhalb des vom Leiter eingenommenen Volumens verteilt ist. Diese Ladungen werden als Bildladungen bezeichnet, da sie bei einem Leiter mit einer ebenen Oberfläche als Spiegelbilder der wahren Ladungen im Außenraum darstellbar sind. Die Methode der Bildladungen erfordert lediglich, daß eine Äquipotentialfläche der Ladungsverteilung, bestehend aus den wahren Ladungen und den Bildladungen, mit der Leiteroberfläche zusammenfällt.

Im einfachsten Fall einer einzigen Punktladung  $Q$  sind die Äquipotentialflächen Kugeln. Die Äquipotentialfläche  $r = R$  kann daher auch als Oberfläche einer metallischen Kugel mit Radius  $R$  angesehen werden, die die Gesamtladung  $Q$  besitzt. Im Außenraum  $r > R$  ist das Feld der Kugel identisch mit dem Feld der Punktladung.

Im Fall von zwei Punktladungen erhält man ein Dipolfeld, dessen Äquipotentialflächen ebenso als Leiteroberflächen gewählt werden können. Eine Ladung des Dipols liegt dann im Innenraum des Leiters und stellt somit eine Bildladung dar. Die zweite Ladung ist eine wahre Ladung im Außenraum des Leiters.

**Punktladung vor einer leitenden Platte:** Ein einfacher Spezialfall liegt vor, wenn die Symmetrieebene senkrecht zur Dipolachse als Leiteroberfläche gewählt wird. Die wahre Ladung  $q$  befinde sich auf der x-Achse im Abstand  $a$  von der Ebene  $x = 0$ . Die Bildladung  $q' = -q$  befinde sich spiegelbildlich zur Ebene  $x = 0$  an der Stelle  $x = -a$ . In einem beliebigen Punkt  $P$  mit dem Abstand  $r$  zur Ladung  $q$  und  $r'$  zu Bildladung  $q'$  wird das Dipolfeld durch,

$$\Phi = \frac{q}{r} - \frac{q}{r'}, \quad r^2 = (x - a)^2 + \varrho^2, \quad r'^2 = (x + a)^2 + \varrho^2 \quad (3.63)$$

gegeben, wobei  $\varrho$  den Abstand des Punktes  $P$  von der x-Achse bezeichnet.

**Randbedingungen:** Auf der Oberfläche bei  $x = 0$  gilt  $r = r'$ . Daher erfüllt (3.63) die Randbedingung  $\Phi = 0$  für  $x = 0$ .

**Influenzladung:** Die Ladung  $q$  ruft auf der Oberfläche des ungeladenen Leiters Ladungen mit entgegengesetztem Vorzeichen hervor. Diese werden Influenzladungen genannt. Zur Berechnung der Flächenladungsdichte auf der Platte bilden wir die Normalenableitung des Potentials bei  $x = 0$ :

$$E_n = - \left. \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right|_{x=0} = -q \frac{2a}{(a^2 + \rho^2)^{3/2}} \quad (3.64)$$

Hierbei wurden die Beziehungen

$$2 r dr = 2(x - a)dx, \quad 2 r' dr' = 2(x + a)dx$$

$$-\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{r} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x - a}{r^3}, \quad -\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{r'} = \frac{x + a}{r'^3}$$

verwendet. Aus (3.64) ergibt sich die Flächenladungsdichte

$$\sigma = \frac{E_n}{4\pi} = -\frac{q}{2\pi} \frac{a}{(a^2 + \rho^2)^{3/2}}.$$

**Bildkraft:** Durch die Platte wird eine Kraft auf die Ladung  $q$  ausgeübt, die durch das elektrische Feld am Ort der Ladung bestimmt wird:

$$F = q E = -\frac{q^2}{(2a)^2}$$

Diese Kraft entspricht der Coulomb-Kraft, welche die Bildladung  $q'$ , im Abstand  $2a$  auf die Ladung  $q$  ausübt.

**Potentielle Energie:** Eine Ladung vor einer Metalloberfläche wird von der Bildkraft angezogen. Bewegt sich die Ladung zur Metalloberfläche, so nimmt ihre potentielle Energie ab. Setzt man  $U(\infty) = 0$ , so ist die potentielle Energie im Abstand  $a$  vor der Platte

$$U = - \int_{\infty}^a F(a') da' = -\frac{q^2}{4a}.$$

### 3.3.3 Komplexe Potentiale

**Zweidimensionale Randwertprobleme:**

$$\Phi = \Phi(x, y)$$

**Komplexe Potentiale:**

$$z = x + iy$$

$$W = U(x, y) + iV(x, y) = f(z)$$

**Analytische Funktionen:** Eine analytische Funktion  $f(z)$  genügt der Laplace-Gleichung:

$$\Delta W = 0 \Leftrightarrow \Delta U = \Delta V = 0$$

**Cauchy-Riemannsche Beziehungen:** Zum Beweis betrachten wir die partiellen Ableitungen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} &= \frac{\partial f}{\partial z} = \frac{\partial U}{\partial x} + i \frac{\partial V}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} &= i \frac{\partial f}{\partial z} = \frac{\partial U}{\partial y} + i \frac{\partial V}{\partial y} \end{aligned}$$

Multipliziert man die zweite Gleichung mit  $-i$  und vergleicht dann die Real- und Imaginärteile beider Gleichungen, so erhält man die Cauchy-Riemannschen Beziehungen:

$$\frac{\partial U}{\partial x} = + \frac{\partial V}{\partial y} ; \quad \frac{\partial U}{\partial y} = - \frac{\partial V}{\partial x}$$

Mit Hilfe dieser Beziehungen ergibt sich die Behauptung:

$$\begin{aligned} \partial_x^2 U + \partial_y^2 U &= 0 \\ \partial_x^2 V + \partial_y^2 V &= 0 \end{aligned}$$

Die Linien  $U = const$  und  $V = const$  bilden ein orthogonales Koordinatennetz:

$$\frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial y} \frac{\partial V}{\partial y} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \nabla U \cdot \nabla V = 0$$

Ist  $U(x, y)$  die Lösung eines Potentialproblems, so steht  $\mathbf{E} = -\nabla U$  senkrecht auf den Äquipotentiallinien  $U = const$ . Die Koordinatenlinien  $V = const$  stellen dann die Feldlinien des elektrischen Feldes dar. Umgekehrt kann man auch  $V$  für das Potential und  $U$  für die Feldlinien wählen.

**Beispiel:** Als einfaches Beispiel betrachten wir das komplexe Potential  $W = z^n$ :

$$z = x + iy = r e^{i\varphi}$$

$$W = z^n = r^n e^{in\varphi} = U + iV$$

$$U = r^n \cos n\varphi ; \quad V = r^n \sin n\varphi$$

Die Bedingung  $V = 0$  ergibt die Äquipotentiallinien:

$$\varphi = 0 : \quad \sin n\varphi = 0$$

$$\varphi = \beta : \quad \sin n\beta \stackrel{!}{=} 0 ; \quad n = \frac{\pi}{\beta}$$



Das Potential  $\Phi = a V$  beschreibt daher ein mögliches Feld zwischen zwei Leiterplatten, die den Winkel  $\beta$  bilden:

$$\begin{aligned}\Phi &= a r^{\frac{\pi}{\beta}} \sin \frac{\pi}{\beta} \varphi \\ E_r &= -\frac{\partial \Phi}{\partial r} = -a \frac{\pi}{\beta} r^{\frac{\pi}{\beta}-1} \sin \frac{\pi}{\beta} \varphi \\ E_\varphi &= -\frac{\partial \Phi}{r \partial \varphi} = -a \frac{\pi}{\beta} r^{\frac{\pi}{\beta}-1} \cos \frac{\pi}{\beta} \varphi \\ \sigma_{\varphi=0} &= \frac{E_\varphi|_{\varphi=0}}{4\pi} = -\frac{a}{4\beta} r^{\frac{\pi}{\beta}-1}\end{aligned}$$

### 3.3.4 Plattenkondensator

Ein Plattenkondensator bestehe aus zwei ebenen parallelen metallischen Platten, die im Abstand  $d$  zueinander angeordnet sind und jeweils die Ladung  $Q$  und  $-Q$  tragen. Die Plattenfläche  $A$  sei so groß, daß Randeffekte vernachlässigt werden können. Die Ladungsdichte der Platten ist,

$$\rho = \sigma \{ \delta(x) - \delta(x - d) \}, \quad \sigma = Q/A.$$

Aus der Poisson-Gleichung  $\partial_x E = 4\pi\rho$  erhält man das elektrische Feld

$$E = 4\pi\sigma \{ +\theta(x) - \theta(x - d) \}$$

Daraus ergibt sich das Potential

$$\Phi' = -E; \quad \Phi = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ -Ex & 0 < x < d \\ -Ed & x > d \end{cases}$$

**Spannung:** Die Spannung wird definiert als die Potentialdifferenz zwischen der positiv und der negativ geladenen Platte:

$$V = \Phi(0) - \Phi(d) = E d = 4\pi \frac{d}{A} Q$$

**Kapazität:** Die Ladung des Kondensators ist proportional zur angelegten Spannung. Die Proportionalitätskonstante wird als Kapazität des Kondensators bezeichnet:

$$Q = C V; \quad C = \frac{A}{4\pi d} \quad (3.65)$$

**Kraft auf Platte bei  $x = 0$**

Eigenfeld:

$$E_s = 4\pi\sigma \left( \theta(x) - \frac{1}{2} \right)$$

Restfeld:

$$E_r = E - E_s = +2\pi\sigma - 4\pi\sigma\theta(x-d)$$

Kraft:

$$F = A\sigma E_r = Q 2\pi\sigma = Q \frac{E}{2} = A \frac{E}{4\pi} \frac{E}{2} = A \frac{E^2}{8\pi}$$

Für jedes Flächenelement eines Leiters wird die Kraft durch die Ladung des Flächenelements und die Hälfte der Normalkomponente des elektrischen Feldes an der Leiteroberfläche bestimmt.

**Aufladungsarbeit:**

$$dW = dQ \Phi_1 + (-dQ)\Phi_2 = dQ V$$

Mit (3.65) folgt:

$$dW = \frac{1}{C} Q dQ, \quad W = \frac{1}{2C} Q^2 = \frac{1}{2} C V^2$$

**Feldenergie:** Ersetzt man die Kapazität und das Potential durch

$$C = \frac{A}{4\pi d} \quad V = Ed$$

so ergibt sich

$$W = \frac{1}{2} C V^2 = \frac{E^2}{8\pi} A d$$

Die Aufladungsarbeit kann daher auch als eine im elektrischen Feld gespeicherte Energie mit der Dichte

$$w = \frac{W}{A d} = \frac{1}{8\pi} E^2$$

ausgedrückt werden.

Änderung des Plattenabstandes bei konstanter Aufladung:  $\frac{Q}{A} = const \Rightarrow E = const$ .

$$\frac{dU}{dx} = \frac{1}{8\pi} A E^2 = \frac{1}{2} \frac{A E}{4\pi} E = \frac{1}{2} (A\sigma) E = F$$

### 3.4 Elektrostatik von Dielektrika

Leiter sind Stoffe, die aufgrund freier Ladungsträger den elektrischen Strom leiten. Im elektrostatischen Gleichgewicht sind die Ladungen so an der Oberfläche verteilt, daß das elektrische Feld im Leiter verschwindet.

Nichtleiter sind dagegen alle Stoffe, in denen die Ladungsträger an feste Plätze (Atom, Elementarzelle, Molekül) gebunden sind, so daß kein Strom fließen kann. Sie werden auch Isolatoren oder Dielektrika genannt. In Nichtleitern können elektrostatische Felder auftreten. Diese können durch kleine Verschiebungen der Ladungsträger

Dipolmomente induzieren (elektronische Polarisation), oder vorhandene Dipolmomente ausrichten (Orientierungspolarisation). Die Polarisation des Dielektrikums muß bei der Bestimmung des elektrostatischen Feldes berücksichtigt werden.

Der Effekt der Polarisation wurde von Faraday entdeckt, der beobachtete daß sich die Kapazität eines Plattenkondensators ändert, wenn man in den Raum zwischen den Platten ein Dielektrikum einbringt. Die Kapazität mit Dielektrikum kann empirisch durch ein Gesetz

$$C = \epsilon \frac{A}{4\pi d}, \quad (3.66)$$

angegeben werden, wobei  $\epsilon$  eine Materialkonstante darstellt, die von der Plattenfläche  $A$  und vom Plattenabstand  $d$  unabhängig ist. Sie wird als Dielektrizitätskonstante bezeichnet. Dieser Kapazität entspricht bei einer festen Kondensatorladung  $Q$  ein elektrisches Feld

$$E = \frac{Q}{Cd} = \frac{4\pi\sigma}{\epsilon}, \quad \sigma = \frac{Q}{A}$$

im Kondensator. Einer Erhöhung der Kapazität um einen Faktor  $\epsilon > 1$  entspricht damit eine Erniedrigung des elektrischen Feldes und der Flächenladung um einen Faktor  $1/\epsilon$ . Die Ladung auf den Platten wird durch entgegengesetzte Polarisationsladungen auf den Oberflächen des Dielektrikums teilweise abgeschirmt.

Luft	1,0005
Petroleum	2,1
Glas	5-8
Wasser	81

Tabelle 3.1:  $\epsilon$  bei 20<sup>0</sup> C und Normaldruck

### 3.4.1 Polarisation

**Oberflächenpolarisation:** Bei der Polarisation eines Nichtleiters treten an dessen Oberfläche Polarisationsladungen auf. Die Ladungsmenge, die durch ein festes Oberflächenelement  $d\mathbf{f} = \mathbf{n}df$  in Richtung der Oberflächennormalen  $\mathbf{n}$  hindurchtritt, ist eine skalare Größe. Sie kann daher als Skalarprodukt  $\mathbf{P} \cdot d\mathbf{f}$  mit einem Vektor  $\mathbf{P}$  geschrieben werden. Der so definierte Vektor  $\mathbf{P}$  heißt dielektrische Polarisation oder Polarisationsvektor. Die Komponente  $P_n = \mathbf{n} \cdot \mathbf{P}$  in Richtung der Flächennormalen gibt die Flächenladungsdichte der Polarisationsladungen an,

$$\sigma_p = P_n. \quad (3.67)$$

**Volumenpolarisation:** Betrachtet man eine beliebige geschlossene Oberfläche innerhalb eines Dielektrikums, so tritt durch dessen Oberfläche die Ladungsmenge

$$Q = \int d\mathbf{f} \cdot \mathbf{P} = \int dV \nabla \cdot \mathbf{P} \quad (3.68)$$

hindurch. Die Ladung innerhalb des Volumens hat dabei um  $-Q$  abgenommen. Da das Volumen beliebig gewählt werden kann, ergibt sich in jedem Volumenelement eine Ladungsdichte

$$\varrho_p = -\nabla \cdot \mathbf{P} \quad (3.69)$$

der Polarisationsladungen. Für eine konstante Polarisation ist  $\nabla \cdot \mathbf{P} = 0$ . Alle Polarisationsladungen befinden sich dann an der Oberfläche.

**Dichte des Dipolmoments:** Besitzt ein Dielektrikum in jedem Volumenelement ein mittleres Dipolmoment

$$\tilde{\mathbf{P}} dV \quad (3.70)$$

so wird dadurch eine Polarisation  $\mathbf{P} = \tilde{\mathbf{P}}$  erzeugt. Der Polarisationsvektor kann damit auch als mittlere Dipolmomentdichte physikalisch gedeutet werden. Um dies zu zeigen, betrachtet man das Potential, welches durch das Dipolmoment in  $d^3r'$  erzeugt wird,

$$\begin{aligned} d\Phi(\mathbf{r}) &= \frac{\tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{r}') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^3r' = \tilde{\mathbf{P}} \cdot \nabla' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' \\ &= \nabla' \cdot \left( \tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) d^3r' - \frac{\nabla' \cdot \tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' \\ &= \int d\mathbf{f} \cdot \tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{-\nabla' \cdot \tilde{\mathbf{P}}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r'. \end{aligned} \quad (3.71)$$

Im letzten Schritt wurde die Definition der Divergenz als Fluß durch die Oberfläche des Volumenelementes verwendet. Dieses Potential ist das einer Polarisationsladungsdichte  $\varrho_p = -\nabla \cdot \tilde{\mathbf{P}}$  innerhalb des Volumens und  $\sigma_p = \tilde{\mathbf{P}}_n$  auf der Oberfläche des Volumenelementes.

**Homogene Polarisation einer ebenen Schicht:** Verschiebt man in einer homogenen ebenen Schicht  $0 < x < d$  die Ladungsdichte  $\varrho^+$  der positiven Ladungen um eine kleine Strecke  $\delta$  gegenüber der Ladungsdichte  $\varrho^- = -\varrho^+$  der negativen Ladungen, so tritt durch jede feste Querschnittsfläche  $A$  die Ladung  $\varrho^+ \delta A$ . Die Polarisation ist definitionsgemäß die Flächenladungsdichte

$$P = \varrho^+ \delta .$$

Da die Polarisation homogen ist, treten innerhalb der Schicht keine Polarisationsladungen auf. Die Polarisationsladungen an den Oberflächen werden durch die Flächenladungsdichten  $\sigma^+ = P$  bei  $x = d$  und  $\sigma^- = -P$  bei  $x = \delta \approx 0$  bestimmt.

Das durch die Polarisationsladungen im Innern der Schicht erzeugte elektrische Feld erhält man nach dem Superpositionsprinzip aus den Feldern der positiven und negativen Ladungsdichten,

$$\begin{aligned} E &= E^+ + E^- = -4\pi\varrho^+\delta = -4\pi P , \\ E^+ &= 4\pi\varrho^+(x - \delta - d/2) , \quad \delta < x < d + \delta \\ E^- &= 4\pi\varrho^-(x - d/2) , \quad 0 < x < d \end{aligned} \quad (3.72)$$

**Homogene Polarisation einer Kugel:** Verschiebt man in einer homogenen Kugel  $0 < r < R$  die Ladungsdichte  $\varrho^+$  der positiven Ladungen um einen kleinen Vektor  $\boldsymbol{\delta}$  gegenüber der Ladungsdichte  $\varrho^- = -\varrho^+$  der negativen Ladungen, so tritt durch jedes Flächenelement die Ladung  $\varrho^+ \boldsymbol{\delta} \cdot d\mathbf{f}$ . Der Polarisationsvektor ist daher

$$\mathbf{P} = \varrho^+ \boldsymbol{\delta} .$$

Es treten auch hier keine Volumenladungen auf. Die Oberflächenladung eines Flächenelementes mit Normalenrichtung  $\mathbf{n}$  am Rand der Kugel ist

$$\sigma = P_n = \varrho^+ \boldsymbol{\delta} \cdot \mathbf{n} = P \cos \Theta ,$$

Sie hängt vom Winkel  $\Theta$  ab, den der Polarisationsvektor mit der Flächennormalen bildet. Der Betrag der Flächenladung ist in der Polarisationsrichtung maximal und verschwindet in den dazu senkrechten Richtungen.

Addiert man die von den positiven und negativen Ladungsdichten erzeugten Felder, so erhält man im Innern der Kugel das elektrische Feld

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \mathbf{E}^+ + \mathbf{E}^- = -\frac{4\pi}{3} \varrho^+ \boldsymbol{\delta} = -\frac{4\pi}{3} \mathbf{P} , & (3.73) \\ \mathbf{E}^+ &= \frac{4\pi}{3} \varrho^+ (\mathbf{r} - \boldsymbol{\delta}) , & 0 < |\mathbf{r} - \boldsymbol{\delta}| < R \\ \mathbf{E}^- &= \frac{4\pi}{3} \varrho^- \mathbf{r} , & 0 < r < R \end{aligned}$$

Das Feld ist homogen. Wegen der richtungsabhängigen Oberflächenladung ist das Feld jedoch gegenüber (3.72) um den Faktor  $1/3$  reduziert.

### 3.4.2 Feldgleichungen

Addiert man die Polarisationsladungsdichte  $\varrho_p$  zur Ladungsdichte  $\varrho$  so folgt,

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi(\varrho_p + \varrho) . \quad (3.74)$$

Ersetzt man die Polarisationsladungsdichte mit (3.69) durch den Polarisationsvektor, so erhält man die Feldgleichungen für Dielektrika in der Form

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{D} &= 4\pi\varrho , & \mathbf{D} &= \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} , \\ \nabla \times \mathbf{E} &= 0 . & & \end{aligned} \quad (3.75)$$

Der hierdurch definierte Vektor  $\mathbf{D}$  wird als dielektrische Verschiebung bezeichnet.

**Dielektrizitätskonstante:** Für hinreichend kleine elektrische Felder kann die Polarisation als lineare Funktion des elektrischen Feldes angenommen werden. Nimmt man außerdem ein isotropes Medium an, so ist der Polarisationsvektor in Richtung

des elektrischen Feldes gerichtet. Mit diesen Näherungen ergeben sich die linearen Beziehungen,

$$\mathbf{P} = \chi \mathbf{E}, \quad \mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}, \quad \epsilon = 1 + 4\pi\chi. \quad (3.76)$$

Man nennt  $\chi$  die elektrische Suszeptibilität und  $\epsilon$  die Dielektrizitätskonstante.

**Homogenes Dielektrikum:** Für ein homogenes Dielektrikum ( $\epsilon = \text{konst}$ ) lauten die Feldgleichungen

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi \frac{\rho}{\epsilon}. \quad (3.77)$$

Die Ladungsdichten im homogenen Dielektrikum sind um den Faktor  $1/\epsilon$  reduziert. Dies erklärt die oben beschriebene Felderniedrigung bzw. Kapazitätserhöhung im Plattenkondensator mit eingeschobenem Dielektrikum.

**Randbedingungen:** An Grenzflächen zwischen zwei Dielektrika gelten die Randbedingungen

$$(\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) \cdot \mathbf{t} = 0, \quad (\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) \cdot \mathbf{n} = 4\pi\sigma. \quad (3.78)$$

Hierbei bezeichnet  $\mathbf{n}$  den Normalenvektor,  $\mathbf{t}$  einen Tangentenvektor und  $\sigma$  die Flächenladungsdichte der Grenzfläche. Der Normalenvektor ist senkrecht zur Grenzfläche vom Medium 1 zum Medium 2 gerichtet.

### 3.4.3 Polarisierbarkeit von Atomen und Molekülen

**Elektronische Polarisation:** Ein elektrisches Feld kann durch Ladungsverschiebungen Dipolmomente induzieren und damit eine Polarisation des Mediums bewirken. Das mittlere induzierte Dipolmoment eines Teilchens kann in vielen Fällen proportional zum elektrischen Feld,

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}, \quad (3.79)$$

angenommen werden. Die Proportionalitätskonstante  $\alpha$  wird als atomare Polarisierbarkeit bezeichnet. Sie hat die Dimension eines Volumens und die Größenordnung des Atomvolumens. Wählt man den Bohrschen Radius  $a_B$  als atomare Längeneinheit, so erhält man

$$\alpha = ca_B^3, \quad a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.5 \times 10^{-8} \text{cm} \quad (3.80)$$

wobei  $c$  eine dimensionslose Konstante von der Größenordnung 1 darstellt. Die Polarisation, die Suszeptibilität und die Dielektrizitätskonstante können durch die Teilchendichte und die Polarisierbarkeit in folgender Weise ausgedrückt werden:

$$\mathbf{P} = n\mathbf{p} = n\alpha \mathbf{E}, \quad \chi = n\alpha, \quad \epsilon = 1 + 4\pi\chi = 1 + 4\pi n\alpha. \quad (3.81)$$

Ein ideales Gas besitzt unter Normalbedingungen (0°C, 1 Atmosphäre) eine Teilchendichte von  $n = 2.7 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Die Abweichungen der Dielektrizitätskonstanten vom Vakuumwert 1 sind dann relativ klein,

$$\epsilon - 1 = c \times 0.4 \times 10^{-4} . \quad (3.82)$$

Dies stimmt mit dem gemessenen Wert für Luft ( $\epsilon = 1.0005$ ) größenordnungsmäßig überein. Die Konstante  $c$  muß quantenmechanisch berechnet werden.

**Orientierungspolarisation:** Die permanenten Dipolmomente polarer Moleküle (z.B.  $H_2O$ ) können durch ein elektrisches Feld ausgerichtet werden und dadurch eine Polarisation des Mediums bewirken. Für die mittlere Dichte der Dipole, die bei der Temperatur  $T$  mit dem Feld den Winkel  $\Theta$  bilden, nehmen wir eine Boltzmann-Verteilung

$$n(\theta) = \frac{n_0}{4\pi} e^{-U(\Theta)/k_B T} , \quad U(\Theta) = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E} = -pE \cos \Theta \quad (3.83)$$

mit der Boltzmann-Konstante  $k_B$  an. In der statistischen Physik wird gezeigt, daß diese Verteilung vorliegt, wenn sich ein System mit der potentiellen Energie  $U(\Theta)$  mit einem Wärmebad der Temperatur  $T$  im Gleichgewicht befindet. Mittelt man die Komponente des Dipolmomentes  $p \cos \Theta$  in der Feldrichtung über die Boltzmannverteilung, so ergibt sich für kleine Wechselwirkungsenergien,  $U \ll k_B T$ , die Polarisation

$$\begin{aligned} P &= \int d\Omega n(\Theta) p \cos \Theta \approx \\ & \int d\Omega \frac{n_0}{4\pi} \left(1 + \frac{pE \cos \Theta}{k_B T}\right) p \cos \Theta = \\ & \frac{2\pi n_0}{4\pi} \int_{-1}^{+1} d \cos \Theta \frac{pE \cos \Theta}{k_B T} p \cos \Theta = \\ & \frac{n_0 p^2 E}{2k_B T} \int_{-1}^{+1} d \cos \Theta \cos^2 \Theta = \frac{n_0 p^2}{3k_B T} E . \end{aligned} \quad (3.84)$$

Die Suszeptibilität

$$\chi = \frac{n_0 p^2}{3k_B T} \quad (3.85)$$

ist umgekehrt proportional zur Temperatur (Curie-Gesetz). Bei hohen Temperaturen überwiegt die elektronische Polarisation, bei niedrigen Temperaturen dominiert bei polaren Molekülen die Orientierungspolarisation. Die Dielektrizitätskonstante lautet entsprechend

$$\epsilon = 1 + \frac{4\pi}{3} \frac{n_0 p^2}{k_B T} . \quad (3.86)$$

**Polarisation in nichtpolaren Flüssigkeiten:** In dichten Medien müssen bei der Berechnung der Polarisierbarkeit Lokalfeldeffekte berücksichtigt werden. Das lokale

elektrische Feld  $\mathbf{E}_L$  welches in der Umgebung eines Atoms für dessen Polarisation wirksam ist, unterscheidet sich von dem mittleren elektrischen Feld  $\mathbf{E}$  im Medium. Für isotrope Flüssigkeiten kann das Lokalfeld näherungsweise durch das Feld innerhalb eines sphärischen Hohlraums im Dielektrikum mit der Polarisation  $\mathbf{P}$  ersetzt werden. Das lokale Feld des Hohlraums  $\mathbf{E}_L$  muß, nach dem Superpositionsprinzip, zusammen mit dem Feld einer homogen polarisierten Kugel  $\mathbf{E}_K$  das mittlere Feld im Dielektrikum ergeben,

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_L + \mathbf{E}_K, \quad \mathbf{E}_K = -\frac{4\pi}{3}\mathbf{P}. \quad (3.87)$$

Damit folgt für das lokale Feld

$$\mathbf{E}_L = \mathbf{E} + \frac{4\pi}{3}\mathbf{P}. \quad (3.88)$$

Aus der Gleichung

$$\mathbf{P} = n\mathbf{p} = n\alpha\mathbf{E}_L = n\alpha\left(\mathbf{E} + \frac{4\pi}{3}\mathbf{P}\right) \quad (3.89)$$

ergibt sich die Polarisation zu

$$\mathbf{P} = \frac{n\alpha}{1 - \frac{4\pi}{3}n\alpha} \mathbf{E}. \quad (3.90)$$

Für die Dielektrizitätskonstante ergibt sich damit die Clausius-Mossotti-Gleichung:

$$\epsilon = 1 + \frac{4\pi n\alpha}{1 - \frac{4\pi}{3}n\alpha}, \quad \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{4\pi}{3}n\alpha. \quad (3.91)$$



# Kapitel 4

## Magnetostatik

Die Magnetostatik behandelt die Eigenschaften *zeitunabhängiger Magnetfelder*. Ebenso wie statische elektrische Felder werden statische magnetische Felder durch die Angabe ihrer Quellen und Wirbel bestimmt. Die entsprechenden *Grundgleichungen der Magnetostatik* lauten

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (4.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}. \quad (4.2)$$

Hierbei bezeichnet  $\mathbf{j}$  die Stromdichte und  $c$  die Lichtgeschwindigkeit. Das Verhältnis  $\mathbf{j}/c$  besitzt die Dimension einer Ladungsdichte. Damit besitzt  $\mathbf{B}$  in dem hier verwendeten Gaußschen Maßsystem dieselbe Dimension wie  $\mathbf{E}$ .

### 4.1 Interpretation der Grundgleichungen

Die Aussage der ersten Gleichung (4.1) ist, daß Magnetfelder grundsätzlich *quellenfrei* sind. Dies entspricht der Erfahrungstatsache, daß magnetische Monopole nicht beobachtet werden. Diese Gleichung gilt nicht nur im Rahmen der Magnetostatik sondern auch allgemein für zeitabhängige Magnetfelder.

Als quellenfreie Felder, besitzen magnetische Feldlinien *keine Anfangs- oder Endpunkte*: Aufgrund der Definition der Divergenz verschwindet der magnetische Fluß durch die Oberfläche eines beliebigen infinitesimalen Volumenelementes. Ein Magnetfeld besitzt daher keine Punkte, in deren Nachbarschaft alle Feldlinien radial nach außen oder radial nach innen gerichtet sind.

Zur Veranschaulichng quellenfreier Felder ist es hilfreich, den Fluß zu betrachten, der durch eine gegebene Querschnittsfläche hindurchtritt. Die Feldlinien, die vom Rand dieser Fläche ausgehen, bilden eine sogenannte *Flußröhre*, deren Mantel wird als *magnetische Oberfläche* bezeichnet. Durch eine beliebige Querschnittsfläche der

Flußröhre tritt immer derselbe magnetische Fluß hindurch: Dies folgt aus Gl.(4.1), wenn man diese über das Volumen einer Flußröhre integriert, die von zwei Querschnittsflächen  $S_1$  und  $S_2$  begrenzt wird. Die Flächennormale der Querschnittsflächen sei in jedem Punkt parallel zum Magnetfeld gerichtet. Die Flächennormale der magnetischen Oberfläche ist definitionsgemäß überall senkrecht zum Magnetfeld. Nach dem Gaußschen Satz gilt dann,

$$\int_V dV \nabla \cdot \mathbf{B} = \int_{\partial V} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \int_{S_2} dS_2 B - \int_{S_1} dS_1 B = 0. \quad (4.3)$$

Eine wichtige Klasse von Magnetfeldern besitzt Flußröhren, die in sich selbst geschlossen sind. Die magnetische Oberfläche einer in sich geschlossenen Flußröhre bildet einen *Torus*. Magnetische Feldlinien, die auf dem Torus umlaufen können entweder *geschlossen* oder *offen* sein. Im ersten Fall kehrt eine Feldlinie nach einer endlichen Anzahl von Umläufen um den Torus zu ihrem Ausgangspunkt zurück. Im allgemeinen Fall sind die Feldlinien offen und überdecken die gesamte Torusfläche.

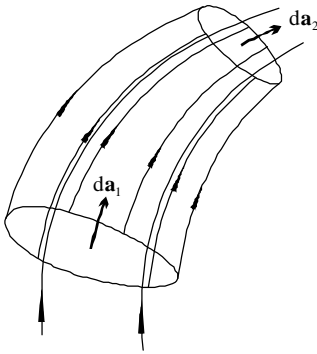


Abbildung 4.1: Feldlinien einer Flußröhre

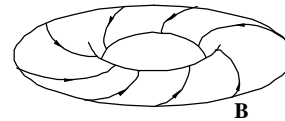


Abbildung 4.2: Feldlinien auf einem Torus

Die zweite Grundgleichung (4.2) der Magnetostatik beinhaltet das *Ampèresche Gesetz* für das Magnetfeld eines stromdurchflossenen Leiters. Die Stromdichte eines entlang der  $z$ -Achse gerichteten unendlich dünnen Leiters besitzt die Form

$$\mathbf{j} = I\delta(x)\delta(y)\mathbf{e}_z \quad (4.4)$$

wobei

$$I = \int d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j} = \int dx dy j_z \quad (4.5)$$

den Strom durch die Querschnittsfläche des Leiters darstellt. Dieser Strom erzeugt ein zylindersymmetrisches Feld, das nur vom Abstand  $r$  vom Leiter abhängt und in azimuthaler Richtung gerichtet ist. Integriert man (4.2) über eine Kreisfläche

senkrecht zur Zylinderachse, so folgt durch Anwendung des Stokeschen Satzes,

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{S} \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) &= \frac{4\pi}{c} \int d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j}, \\ 2\pi r B &= \frac{4\pi}{c} I \\ B &= \frac{2I}{cr}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

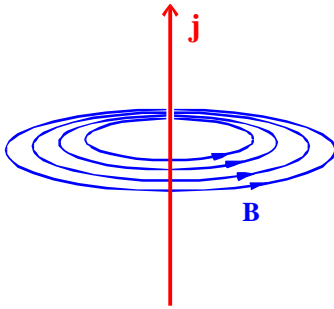


Abbildung 4.3: Magnetfeldlinien eines stromdurchflossenen Leiters

Der *Gültigkeitsbereich der Magnetostatik* beschränkt sich auf quellenfreie Stromdichten,

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (4.7)$$

Diese Nebenbedingung ergibt sich wegen  $\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) = 0$  aus der Divergenz von Gl. (4.2). Quellen in der Stromdichte führen zu Änderungen der Ladungsdichte, die eine zeitabhängige Behandlung erfordern.

Die Grundgesetze der Magnetostatik sind nicht unabhängig von denen der Elektrostatik, da Strom- und Ladungsdichten bezugssystemabhängig sind. Die *Transformationsgesetze für Ladungs- und Stromdichten* können aus der speziellen Relativitätstheorie abgeleitet werden. Dazu betrachten wir ein Volumenelement, das in seinem Ruhesystem die Ladungsdichte  $\tau_0$  besitzt. Die Ruheladungsdichte ist ein koordinatenunabhängiger Skalar, ähnlich wie z.B. die Ruhemasse oder die Eigenzeit. In einem Inertialsystem  $S$ , in dem sich das Volumenelement mit einer Geschwindigkeit  $\mathbf{u}$  bewegt, ist seine Vierergeschwindigkeit

$$u^\mu = \gamma_u(c, \mathbf{u}), \quad \text{mit} \quad \gamma_u = \frac{1}{\sqrt{1 - u^2/c^2}}. \quad (4.8)$$

Aus der Vierergeschwindigkeit  $u^\mu$  und dem Skalar  $\tau_0$  kann man einen neuen Vierervektor bilden, der als *Viererstromdichte* bezeichnet wird,

$$j^\mu = \tau_0 u^\mu = (c\tau, \mathbf{j}). \quad (4.9)$$

Hierbei bezeichnen  $\tau = \gamma\tau_0$  die Ladungsdichte und  $\mathbf{j} = \tau\mathbf{u}$  die gewöhnliche Stromdichte des Volumenelementes in  $S$ . Ladungs- und Stromdichten transformieren sich

dementsprechend wie die Komponenten eines Vierervektors. Betrachtet man ein Inertialsystem  $S'$ , welches sich in  $S$  mit der Geschwindigkeit  $v$  entlang der  $z$ -Achse bewegt, so erhält man die transformierten Dichten durch die *Lorentztransformation*

$$\tau' = \gamma(\tau - v j_z / c^2), \quad (4.10)$$

$$j'_z = \gamma(j_z - v \tau), \quad (4.11)$$

mit  $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ .

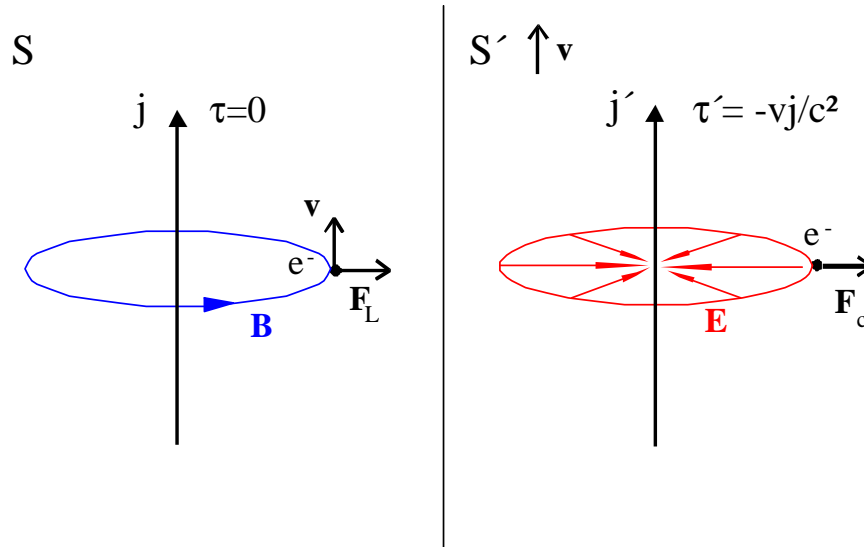


Abbildung 4.4: Transformation vom Laborsystem ins Ruhesystem der Ladung

Wir betrachten nun eine Probeladung  $q$  im Feld eines stromdurchflossenen Leiters der entlang der  $z$ -Achse gerichtet ist (Abb.4.4). Im Laborsystem  $S$  sei der Leiter ungeladen ( $\tau = 0$ ) und es fließe der Strom  $I = \int dS j$ . Die Probeladung befinde sich im Abstand  $r$  vom Leiter und bewege sich mit einer Geschwindigkeit  $v$  in  $z$ -Richtung. Aufgrund des Magnetfeldes (4.6) wirkt auf die bewegte Probeladung eine Kraft

$$F = -\frac{q}{c} v B = -\frac{2qvI}{rc^2} \quad (4.12)$$

in radialer Richtung. Wir betrachten nun denselben Vorgang im Ruhesystem  $S'$  der Probeladung. Da die Geschwindigkeit der Probeladung hier verschwindet, übt das Magnetfeld keine Kraftwirkung aus. Stattdessen wirkt auf die ruhende Ladung das elektrostatische Feld eines geladenen Drahtes. Im Rahmen der nichtrelativistischen Mechanik ist  $\gamma \approx 1$ . Damit ergibt sich die Ladung des Drahtes pro Längeneinheit aus (4.10) mit  $\tau = 0$  zu

$$\lambda = \int dS \tau' = -\frac{vI}{c^2}. \quad (4.13)$$

Die elektrostatische Kraft im Ruhesystem der Ladung ist daher ebenfalls,

$$F = qE = \frac{2q\lambda}{r} = -\frac{2qvI}{rc^2}. \quad (4.14)$$

Das durch das Ampèresche Gesetz bestimmte Magnetfeld eines stromdurchflossenen Drahtes ist somit konsistent mit dem durch die Poisson-Gleichung bestimmten elektrostatischen Feld eines geladenen Drahtes.

Wie in der Elektrostatik ist es hilfreich von den magnetischen Eigenschaften vorgegebener Stromdichten auszugehen und kompliziertere Erscheinungen, wie etwa den Magnetismus in Materie, durch die Superposition sehr vieler elementarer Felder zu deuten. Im folgenden werden die Magnetfelder einiger elementarer Stromverteilungen betrachtet.

## 4.2 Magnetfelder stationärer Ströme

Mit den Grundgleichungen der Magnetostatik können Magnetfelder vorgegebener stationärer Stromdichten berechnet werden. Ein Beispiel ist das Magnetfeld einer *ebenen unendlich dünnen Schicht* mit einer Stromdichte

$$\mathbf{j} = \iota \delta(x) \mathbf{e}_z. \quad (4.15)$$

Hierbei bezeichnet  $\iota$  den Strom, der in  $y$ -Richtung pro Längeneinheit durch die Querschnittsfläche der Schicht fließt. Aus Symmetriegründen hängt das Magnetfeld nur von der  $x$ -Richtung ab und die  $z$ -Komponente der Gl.(4.2) lautet,

$$\partial_x B_y = \frac{4\pi}{c} \iota \delta(x). \quad (4.16)$$

Daraus ergibt sich beim Durchgang durch die Schicht ein Sprung der  $y$ -Komponente des Magnetfeldes:

$$[B_y] = 4\pi \frac{\iota}{c}. \quad (4.17)$$

Auf beiden Seiten der Schicht ist das Magnetfeld homogen. Wählt man *zwei parallele Schichten* mit entgegengesetzten Stromrichtungen  $\iota$  und  $-\iota$ , so kann man die Randbedingung erfüllen, daß das Magnetfeld im Außenraum verschwindet. Die Lösung im Innenraum, d.h. im Gebiet zwischen den Schichten, ist dann gerade das Magnetfeld (4.17). Eine solche Doppelschicht stellt ein einfaches Modell für das Magnetfeld im Innern einer Spule dar. Für eine Spule mit  $n$  Windungen pro Längeneinheit, die von einem Strom  $I$  durchflossen wird ist  $\iota = nI$ . Das *Magnetfeld im Innern einer Spule* ist demnach

$$B = 4\pi \frac{nI}{c}. \quad (4.18)$$

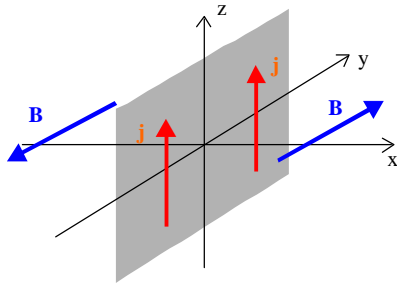


Abbildung 4.5: Magnetfeld einer stromführenden Schicht

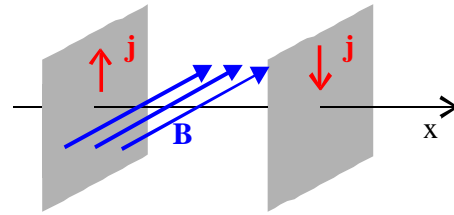


Abbildung 4.6: Magnetfeld zwischen zwei stromführenden Schichten

Für das Magnetfeld einer allgemeinen Stromverteilung läßt sich eine Integraldarstellung angeben, die auf der Integraldarstellung des Vektorpotentials eines quellenfreien Vektorfeldes beruht. Definiert man  $\mathbf{B}$  über das Vektorpotential  $\mathbf{A}$  als

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (4.19)$$

mit der Coulomb-Eichung  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ , so gilt

$$\Delta \mathbf{A} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad (4.20)$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{c} \int d^3r' \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (4.21)$$

Einsetzen von (4.20) in (4.19) ergibt für das Magnetfeld die *Integraldarstellung*

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \int d^3r' \left( \nabla \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \times \mathbf{j}(\mathbf{r}') \\ &= \frac{1}{c} \int d^3r' \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}') \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Für einen Leiter mit vernachlässigbarem Querschnitt kann die Integration über die Querschnittsfläche näherungsweise bei konstantem  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  durchgeführt werden. Setzt man

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}') d^3r' = I d\mathbf{s}, \quad (4.23)$$

wobei  $d\mathbf{s}$  die Änderung des Ortsvektors entlang des Leiters darstellt, so ergibt sich für das Magnetfeld eines beliebig geformten Leiters das *Gesetz von Biot-Savart*,

$$\mathbf{B} = \frac{I}{c} \int \frac{d\mathbf{s} \times (\mathbf{r} - \mathbf{s})}{|\mathbf{r} - \mathbf{s}|^3}. \quad (4.24)$$

Im Mittelpunkt ( $r = 0$ ) eines kreisförmigen Leiters mit Radius  $s$  ergibt das Biot-Savart-Gesetz das Magnetfeld  $B = 2\pi I/(cs)$ .

### 4.3 Magnetisches Dipolmoment

Das Magnetfeld in großem Abstand von der Stromdichteverteilung kann analog zur Elektrostatik durch eine Multipolentwicklung angegeben werden. Da keine magnetischen Monopole existieren, beginnt die Entwicklung mit dem Dipolfeld.

Für die Multipolentwicklung wird der folgende Hilfssatz für die Stromdichte benötigt: Sei  $\mathbf{j}$  quellenfrei und nur innerhalb eines Volumens  $V$  ungleich Null. Dann gilt für jede kartesische Komponente  $i, k$ :

$$\int dV j_i = 0 \quad \text{und} \quad \int dV x_i j_k = - \int dV x_k j_i . \quad (4.25)$$

Der Beweis ergibt sich aus den folgenden beiden Oberflächenintegralen, die jeweils verschwinden, da die Stromdichte nach Voraussetzung auf der Oberfläche  $\partial V$  des Volumens verschwindet:

$$\int_{\partial V} d\mathbf{f} \cdot \mathbf{j} x_i = \int_V \nabla \cdot (x_i \mathbf{j}) = \int_V j_i = 0, \quad (4.26)$$

$$\int_{\partial V} d\mathbf{f} \cdot \mathbf{j} x_i x_k = \int_V \nabla \cdot (x_i x_k \mathbf{j}) = \int_V (x_k j_i + x_i j_k) = 0. \quad (4.27)$$

Unter Verwendung der Reihenentwicklung

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{r} + (-\mathbf{r}') \cdot \nabla \frac{1}{r} + \dots = \frac{1}{r} + \frac{\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}}{r^3} + \dots \quad (4.28)$$

erhält man für das Vektorpotential (4.20) bis zur Ordnung  $O(r'/r)$ ,

$$\mathbf{A} = \frac{1}{cr} \int d^3 r' \mathbf{j}(\mathbf{r}') + \frac{1}{cr^3} \int d^3 r' \mathbf{j}(\mathbf{r}') \mathbf{r}' \cdot \mathbf{r} \quad (4.29)$$

Der erste Term verschwindet wegen (4.26). Der zweite Term kann wegen (4.27) zu einem doppelten Kreuzprodukt ergänzt werden,

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \frac{1}{cr^3} \int d^3 r' \frac{1}{2} [\mathbf{j}(\mathbf{r}')(\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}) - \mathbf{r}'(\mathbf{j}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{r})] \\ &= \frac{1}{2cr^3} \int d^3 r' \mathbf{r} \times (\mathbf{j}(\mathbf{r}') \times \mathbf{r}') \end{aligned}$$

Definiert man das *magnetische Dipolmoment*

$$\boxed{\mathbf{m} = \frac{1}{2c} \int d^3 r \mathbf{r} \times \mathbf{j}(\mathbf{r})} \quad (4.30)$$

so erhält man das Dipolfeld

$$\boxed{\mathbf{A} = \frac{\mathbf{m} \times \mathbf{r}}{r^3}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = \frac{3\mathbf{r}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{m}) - r^2\mathbf{m}}{r^5}.} \quad (4.31)$$

Bei der Berechnung der Rotation in Gl.(4.31) wurden folgende Umformungen verwendet:

$$\begin{aligned} \mathbf{X} &= \mathbf{r}/r^3 \\ \nabla \cdot \mathbf{X} &= 0, \quad \mathbf{m} \times (\nabla \times \mathbf{X}) = \nabla(\mathbf{m} \cdot \mathbf{X}) - \mathbf{m} \cdot \nabla \mathbf{X} = 0 \\ \nabla \times (\mathbf{m} \times \mathbf{X}) &= \mathbf{m} \nabla \cdot \mathbf{X} - \mathbf{m} \cdot \nabla \mathbf{X} = -\nabla(\mathbf{m} \cdot \mathbf{X}). \end{aligned} \quad (4.32)$$

Für einen *Ringstrom* mit der Stromstärke  $I$ , der eine Fläche  $A$  umschließt, erhält man mit (4.23) das magnetische Moment

$$\mathbf{m} = \frac{I}{2c} \oint \mathbf{s} \times d\mathbf{s} = \frac{IA}{c} \mathbf{n} \quad (4.33)$$

wobei  $\mathbf{n}$  den Einheitsvektor in Richtung der Flächennormale darstellt.

Für eine *starr rotierende Ladungsverteilung* ist das magnetische Moment proportional zum Drehimpuls

$$\mathbf{m} = \gamma \mathbf{L} \quad (4.34)$$

wobei  $\gamma$  als gyromagnetisches Verhältnis bezeichnet wird. Macht man den Ansatz  $q\mathbf{n}\mathbf{v}$  für die Stromdichte und  $m\mathbf{n}\mathbf{v}$  für die Impulsdichte so folgt,

$$\mathbf{m} = \frac{q}{2c} \int dV n\mathbf{r} \times \mathbf{v}, \quad \mathbf{L} = m \int dV n\mathbf{r} \times \mathbf{v}, \quad \gamma = \frac{q}{2mc}. \quad (4.35)$$

Für das magnetische Moment von Elementarteilchen schreibt man das gyromagnetische Verhältnis in der Form,

$$\gamma = \frac{q}{2mc} g \quad (4.36)$$

wobei der  $g$ -Faktor für unterschiedliche Elementarteilchen verschiedene Werte annehmen kann, z.B.  $g = 2$  für Elektronen,  $g = 2.79$  für Protonen und  $g = -1.91$  für Neutronen.

Auf ein magnetisches Dipolmoment wirkt in einem *konstanten* Magnetfeld ein *Drehmoment*

$$\boxed{\mathbf{T} = \mathbf{m} \times \mathbf{B}} \quad (4.37)$$

und in einem *inhomogenen* Magnetfeld eine *Kraft*

$$\boxed{\mathbf{F} = -\nabla U, \quad \text{mit} \quad U = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}} \quad (4.38)$$



Diese Formeln sind analog zu denen eines elektrischen Dipols.

Zur Herleitung von (4.37) berechnen wir das Gesamtdrehmoment auf eine Stromdichteverteilung,

$$\begin{aligned}
\mathbf{T} &= \frac{1}{c} \int dV \mathbf{r} \times (\mathbf{j} \times \mathbf{B}) \\
&= \frac{1}{2c} \int dV \mathbf{r} \times (\mathbf{j} \times \mathbf{B}) - \mathbf{j} \times (\mathbf{r} \times \mathbf{B}) \\
&= \frac{1}{2c} \int dV [(\mathbf{r} \cdot \mathbf{B})\mathbf{j} - (\mathbf{r} \cdot \mathbf{j})\mathbf{B} - (\mathbf{j} \cdot \mathbf{B})\mathbf{r} + (\mathbf{j} \cdot \mathbf{r})\mathbf{B}] \\
&= \frac{1}{2c} \int dV \mathbf{B} \times (\mathbf{j} \times \mathbf{r}) \\
&= \mathbf{m} \times \mathbf{B}
\end{aligned} \tag{4.39}$$

In der zweiten Zeile wurde (4.25) ausgenutzt, in der letzten Zeile wurde das Magnetfeld als konstant angenommen.

Als Beispiel berechnen wir das Drehmoment auf einen rechteckigen stromdurchflossenen Leiter mit den Seitenlängen  $a$  und  $b$ . Das Rechteck sei um eine Achse drehbar, die parallel zur Seite  $b$  durch die Mitte der Seite  $a$  geht und senkrecht zum Magnetfeld  $B$  gerichtet ist. Die Flächennormale bilde mit dem Magnetfeld den Winkel  $\vartheta$ . Auf die beiden achsenparallelen Seiten des Rechtecks wirken die Kräfte  $F_{1,2} = \pm \frac{1}{c} I b B$  und damit die Drehmomente  $T_{1,2} = \pm (a/2) F_{1,2} \sin \vartheta$ . Das gesamte Drehmoment ist demnach  $T = T_1 + T_2 = \frac{1}{c} a b I B \sin \vartheta = m B \sin \vartheta$ .

Zur Herleitung von (4.38) berechnen wir die Gesamtkraft auf eine Stromdichteverteilung in einer Umgebung des Ortes  $\mathbf{r}$  und entwickeln das Magnetfeld  $\mathbf{B}(\mathbf{r}')$  am Ort  $\mathbf{r}'$  bis zur linearen Ordnung in  $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ ,

$$\begin{aligned}
\mathbf{F} &= \frac{1}{c} \int dV' \mathbf{j}(\mathbf{r}') \times \mathbf{B}(\mathbf{r}') \\
&= \frac{1}{c} \int dV' \mathbf{j}(\mathbf{r}') \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) + \mathbf{j}(\mathbf{r}') \times (\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \cdot \nabla \mathbf{B}(\mathbf{r}).
\end{aligned}$$

Unter Verwendung von (4.25) erhält man daraus

$$\begin{aligned}
\mathbf{F} &= \frac{1}{2c} \int dV' [\mathbf{j}(\mathbf{r}')(\mathbf{r}' \cdot \nabla) - \mathbf{r}'(\mathbf{j}(\mathbf{r}') \cdot \nabla)] \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) \\
&= \frac{1}{2c} \int dV' [\nabla \times (\mathbf{j}(\mathbf{r}') \times \mathbf{r}')] \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) \\
&= (\mathbf{m} \times \nabla) \times \mathbf{B} = \nabla(\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{m}(\nabla \cdot \mathbf{B}) = \nabla(\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}).
\end{aligned}$$

# Kapitel 5

## Maxwell-Gleichungen

Die allgemeinen Grundgleichungen des elektromagnetischen Feldes sind die Maxwell-Gleichungen. Sie beschreiben neben der Elektrostatik und Magnetostatik auch zeitabhängige Felder, die z.B. bei der Induktion von Strömen durch Magnetfelder und bei der Ausbreitung elektromagnetischer Wellen auftreten. Da sich elektromagnetische Wellen mit Lichtgeschwindigkeit ausbreiten, gelten die Maxwellgleichungen auch in der relativistischen Physik. Auf die Grenzen der klassischen Elektrodynamik stieß man zuerst bei der Behandlung des Strahlungsgleichgewichts. Die spektrale Energieverteilung konnte von Planck nur unter Einführung des Planckschen Wirkungsquantums erklärt werden. Damit wurde in der Physik der Übergang zur Quantenmechanik vollzogen.

### 5.1 Zeitentwicklung elektromagnetischer Felder

Zur Vervollständigung der Gleichungen für das elektromagnetische Feld benötigt man Terme, die die Zeitentwicklung der Felder angeben. Nimmt man an, daß die Zeitentwicklung der Felder bereits durch ihren Anfangswert festgelegt ist, so genügt es ein Differentialgleichungssystem erster Ordnung,

$$\partial_t \mathbf{E} = \alpha (\nabla \times \mathbf{B} - \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}) \quad (5.1)$$

$$\partial_t \mathbf{B} = \beta \nabla \times \mathbf{E} \quad (5.2)$$

anzugeben. Die Form der rechten Seite ergibt sich aus den naheliegenden Annahmen, daß (i) das Superpositionsprinzip gültig bleibt (Linearität), (ii) im Grenzfall zeitunabhängiger Felder daraus die statischen Vektorgleichungen resultieren und (iii) die Zeitentwicklung von  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{B}$  miteinander gekoppelt ist. Durch Vergleich mit bekannten Gesetzen, z.B. für die Ladungserhaltung und die Ausbreitungsgeschwindigkeit von Lichtwellen im Vakuum, erhält man  $\alpha = -\beta = c$ .

Die Gleichungen, die die Quellen der Felder angeben bleiben ungeändert,

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{E} - 4\pi\rho = 0. \quad (5.3)$$

Die erste Gleichung wird als allgemeingültig vorausgesetzt, da keine magnetischen Monopole existieren. Die zweite Gleichung könnte unter den gemachten Annahmen nur an  $\nabla \cdot \partial_t \mathbf{B}$  ankoppeln, was ebenfalls verschwindet.

Zusammenfassend schreiben wir die vollständigen Maxwell-Gleichungen in der Form

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \partial_t \mathbf{E} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad (5.4)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \partial_t \mathbf{B} \quad (5.5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (5.6)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho. \quad (5.7)$$

Die Gleichungen (5.4), (5.5) werden als Entwicklungsgleichungen, die Gleichungen (5.6), (5.7) als Zwangsbedingungen bezeichnet. Jede Lösung der Entwicklungsgleichungen erfüllt die Zwangsbedingungen für alle Zeiten, wenn diese von den Anfangsbedingungen erfüllt wurden. Dies zeigt man, indem man die Divergenz der Entwicklungsgleichungen bildet und die Kontinuitätsgleichung für die Ladungserhaltung,

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (5.8)$$

verwendet,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left( \frac{1}{c} \partial_t \mathbf{E} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \right) &= \frac{1}{c} \partial_t (\nabla \cdot \mathbf{E} - 4\pi\rho) = 0, \\ \nabla \cdot \left( -\frac{1}{c} \partial_t \mathbf{B} \right) &= -\frac{1}{c} \partial_t (\nabla \cdot \mathbf{B}) = 0. \end{aligned} \quad (5.9)$$

## 5.2 Induktionsgesetz

Nach dem Ampèreschen Gesetz können Ströme Magnetfelder erzeugen. Umgekehrt können auch Magnetfelder Ströme induzieren. Dabei muß man zwei Fälle unterscheiden, die Induktion eines Stromes in einem bewegten Leiter im statischen Magnetfeld und die Induktion eines Stromes in einem ruhenden Leiter im zeitlich veränderlichen

Magnetfeld. Beide Fälle können durch dasselbe *Faradaysche Induktionsgesetz*,

$$V = -\frac{1}{c} \frac{d\phi}{dt}, \quad V = \oint_{\partial S} d\mathbf{s}' \cdot \mathbf{E}', \quad \phi = \int_S d\mathbf{a} \cdot \mathbf{B}, \quad (5.10)$$

beschrieben werden. Hierbei bezeichnet  $V$  die in einem Draht ring induzierte Spannung,  $\mathbf{E}'$  das elektrische Feld im momentanen Ruhesystem des Drahtelements  $d\mathbf{s}'$  und  $\phi$  den magnetischen Fluß durch die Querschnittsfläche des Ringes. Die induzierte Spannung hängt nur von der zeitlichen Änderung des magnetischen Flußes ab, unabhängig davon, ob der Draht oder der Magnet bewegt wird.

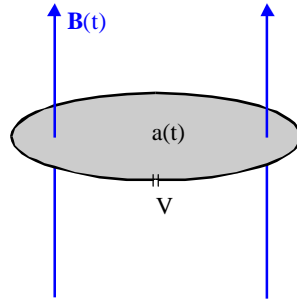


Abbildung 5.1: Induzierte Spannung an einer Leiterschleife im Magnetfeld

Zur Herleitung des Induktionsgesetzes berechnen wir die zeitliche Änderung des magnetischen Flußes,

$$\frac{d\phi}{dt} = \left. \frac{d\phi}{dt} \right|_{S=\text{const}} + \left. \frac{d\phi}{dt} \right|_{\mathbf{B}=\text{const}}, \quad (5.11)$$

wobei im ersten Term die Fläche im zweiten das Magnetfeld konstant gehalten werden. Der erste Term ergibt mit der Maxwellgleichung (5.5) das Induktionsgesetz eines ruhenden Leiters,

$$\left. \frac{d\phi}{dt} \right|_{S=\text{const}} = \int_S d\mathbf{a} \cdot \partial_t \mathbf{B} = -c \int_S d\mathbf{a} \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) = -c \oint_{\partial S} d\mathbf{s} \cdot \mathbf{E}. \quad (5.12)$$

Bewegt sich das Drahtelement am Ort  $\mathbf{s}$  mit der Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$ , so ergibt sich im Zeitintervall  $dt$  an dieser Stelle eine Flächenänderung

$$d\mathbf{a} = dt \mathbf{v} \times d\mathbf{s}. \quad (5.13)$$

Aufgrund dieser Bewegung ergibt sich eine Flußänderung

$$\left. \frac{d\phi}{dt} \right|_{\mathbf{B}=\text{const}} = \oint_{\partial S} (\mathbf{v} \times d\mathbf{s}) \cdot \mathbf{B} = - \oint_{\partial S} d\mathbf{s} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (5.14)$$

Die gesamte Flußänderung (5.11) ist demnach,

$$\frac{d\phi}{dt} = -c \oint_{\partial S} d\mathbf{s} \cdot \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right) \quad (5.15)$$

Für den Übergang vom Laborsystem ins bewegte Ruhesystem des Drahtelementes beschränken wir uns auf den nichtrelativistischen Grenzfall. Hier gelten die Transformationsgesetze  $d\mathbf{s}' = d\mathbf{s}$  und  $\mathbf{E}' = \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}$ . Damit folgt aus (5.15) das Induktionsgesetz (5.10).

Als Beispiel für die Induktion eines Stromes in einem bewegten Leiter betrachten wir ein Rechteck in einem homogenen Magnetfeld  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ , dessen untere linke Ecke im Koordinatenursprung liegt und dessen obere rechte Ecke  $(x, y)$  sich mit der Geschwindigkeit  $(v_x, v_y)$  bewegt (Abb.5.2). Aufgrund der Bewegung des Leiters wirkt auf eine Ladung  $q$  die Lorentzkraft  $\frac{q}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}$ . Bei einem Umlauf um die Drahtschleife verrichtet die Lorentzkraft an der Ladung die Arbeit

$$\begin{aligned} qV &= \frac{q}{c} \oint d\mathbf{s} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \\ &= \frac{q}{c} \left( \int_0^y dy (-v_x B) + \int_x^0 (v_y B) \right) \\ &= -\frac{q}{c} (v_x y + v_y x) B = -\frac{q}{c} \frac{d\phi}{dt}, \end{aligned}$$

mit dem magnetischen Fluß  $\phi = xyB$ .

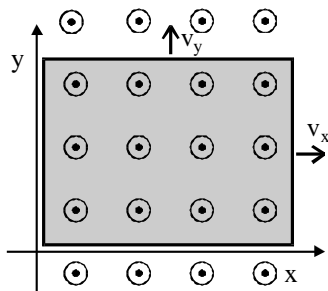


Abbildung 5.2: Rechteckige Drahtschleife mit bewegten Seiten im konstanten Magnetfeld

### 5.3 Erhaltungssätze

Die Maxwell-Gleichungen beinhalten Erhaltungssätze für die Ladung, die Energie und den Impuls.

### 5.3.1 Ladungserhaltung

Die Ladungserhaltung einer Ladungsdichte kann durch eine *integrale Bilanzgleichung* für ein beliebiges Volumen  $V$ ,

$$\frac{d}{dt} \int_V dV \varrho(\mathbf{r}, t) = - \int_{\partial V} d\mathbf{a} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t), \quad (5.16)$$

ausgedrückt werden. Die zeitliche Änderung der Ladung des Volumens ist gleich dem Strom durch dessen Oberfläche, wobei ein positiver Strom einer Abnahme der Ladung entspricht. Mit dem Gaußschen Satz erhält man daraus

$$\int_V dV [\partial_t \varrho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)] = 0. \quad (5.17)$$

Da  $V$  beliebig ist, muß der Integrand verschwinden. Die Ladungserhaltung kann daher auch lokal durch die *Kontinuitätsgleichung*

$$\partial_t \varrho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (5.18)$$

formuliert werden.

Die vollständigen Maxwellgleichungen beinhalten die Ladungserhaltung. Bildet man die Divergenz von (5.4) und die Zeitableitung von (5.7), so folgt die Kontinuitätsgleichung,

$$0 = \frac{c}{4\pi} \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) = \frac{1}{4\pi} \nabla \cdot \partial_t \mathbf{E} + \nabla \cdot \mathbf{j} = \partial_t \varrho + \nabla \cdot \mathbf{j} \quad (5.19)$$

Von Maxwell wurde der sogenannte Verschiebungsstrom  $\partial_t \mathbf{E}$  in Gleichung (5.4) eingeführt, der zur Ladungserhaltung führt. Die Prä-Maxwell-Gleichungen, ohne Verschiebungsstrom, gelten nur für quellenfreie Ströme.

### 5.3.2 Energieerhaltung

Die Arbeitsleistung des elektromagnetischen Feldes an den Ladungen ist

$$P = \sum_i \mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_i = \sum_i q_i (\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v}_i \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{v}_i = \sum_i q_i \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{E} = \int dV \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}. \quad (5.20)$$

Das Magnetfeld verrichtet keine Arbeit, die Dichte der Arbeitsleistung des elektrischen Feldes ist  $\mathbf{j} \cdot \mathbf{E}$ . Einer Zunahme der Energie der Ladungen muß eine gleich

große Abnahme der Energie des elektromagnetischen Feldes entsprechen. Aufgrund von (5.4) erhält man

$$-\mathbf{j} \cdot \mathbf{E} = -\frac{c}{4\pi} \mathbf{E} \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) + \partial_t \left( \frac{1}{8\pi} E^2 \right). \quad (5.21)$$

Diese Gleichung enthält im letzten Term die Energiedichte des elektrischen Feldes. Eine entsprechende Gleichung mit der Energiedichte des magnetischen Feldes folgt aus (5.5),

$$\frac{c}{4\pi} \mathbf{B} \cdot (\nabla \times \mathbf{E}) + \partial_t \left( \frac{1}{8\pi} B^2 \right) = 0. \quad (5.22)$$

Durch Addition beider Gleichungen folgt der Energiesatz

$$\partial_t W + \nabla \cdot \mathbf{S} = -\mathbf{j} \cdot \mathbf{E} \quad (5.23)$$

Hierbei bezeichnet  $W$  die Energiedichte und  $\mathbf{S}$  die Energiestromdichte des elektromagnetischen Feldes. Man nennt  $\mathbf{S}$  auch den Poynting-Vektor und bezeichnet (5.23) als Poynting-Theorem.

$\begin{aligned} W &= \frac{1}{8\pi} (E^2 + B^2) \\ \mathbf{S} &= \frac{c}{4\pi} (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) \end{aligned}$
--

Die Bilanzgleichung der Feldenergie eines Volumens  $V$  ist

$$\frac{d}{dt} \int_V dV W = - \int_{\partial V} d\mathbf{a} \cdot \mathbf{S} - \int_V dV \mathbf{j} \cdot \mathbf{E} \quad (5.24)$$

Der erste Term stellt den Energiestrom durch die Oberfläche dar, der zweite die Arbeitsleistung an den Ladungen des Volumens.

### 5.3.3 Impulserhaltung

Die Ladungen im elektromagnetischen Feld erfahren eine Impulsänderung durch die Lorentzkraft,

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \sum_i q_i \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right) = \int dV \left( \rho \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{j} \times \mathbf{B} \right). \quad (5.25)$$

Mit (5.4)-(5.7) erhält man für die Kraftdichte die Ausdrücke,

$$\begin{aligned}
 4\pi\rho\mathbf{E} &= (\nabla \cdot \mathbf{E})\mathbf{E} = \nabla \cdot (\mathbf{E}\mathbf{E}) - (\mathbf{E} \cdot \nabla)\mathbf{E} \\
 &= \nabla \cdot (\mathbf{E}\mathbf{E} - \frac{1}{2}E^2\mathbf{I}) + \mathbf{E} \times (\nabla \times \mathbf{E}) \\
 &= \nabla \cdot (\mathbf{E}\mathbf{E} - \frac{1}{2}E^2\mathbf{I}) - \frac{1}{c}\mathbf{E} \times \partial_t\mathbf{B}, \\
 \frac{4\pi}{c}\mathbf{j} \times \mathbf{B} &= \left( \nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c}\partial_t\mathbf{E} \right) \times \mathbf{B} \\
 &= -\mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{B}) - \frac{1}{c}\partial_t\mathbf{E} \times \mathbf{B} \\
 &= \nabla \cdot (\mathbf{B}\mathbf{B} - \frac{1}{2}B^2\mathbf{I}) - \frac{1}{c}\partial_t\mathbf{E} \times \mathbf{B}, \tag{5.26}
 \end{aligned}$$

wobei  $\mathbf{I}$  den Einheitstensor und  $\mathbf{E}\mathbf{E}$  das Tensorprodukt mit den Komponenten  $E_iE_j$  bezeichnet.

Die Summe dieser Beiträge ergibt den Impulserhaltungssatz

$$\partial_t\Pi + \mathbf{f} = \nabla \cdot \mathbf{T}. \tag{5.27}$$

Hierbei bezeichnet  $\Pi$  die Impulsdichte des elektromagnetischen Feldes,  $\mathbf{f}$  die Kraftdichte auf die Ladungen und  $\mathbf{T}$  wird als Maxwell'scher Spannungstensor bezeichnet.

Die integrale Impulsbilanz für ein Volumen  $V$  lautet

$$\frac{d}{dt} \left( \mathbf{P} + \int_V dV \Pi \right) = \int_{\partial V} d\mathbf{a} \cdot \mathbf{T} \tag{5.28}$$

$$\begin{aligned}
 \Pi &= \mathbf{S}/c^2 = \frac{1}{4\pi c}(\mathbf{E} \times \mathbf{B}) \\
 \mathbf{f} &= \rho\mathbf{E} + \frac{1}{c}\mathbf{j} \times \mathbf{B} \\
 \mathbf{T} &= \frac{1}{4\pi} \left[ \mathbf{E}\mathbf{E} + \mathbf{B}\mathbf{B} - \frac{1}{2}(E^2 + B^2)\mathbf{I} \right]
 \end{aligned}$$



## 5.4 Elektromagnetische Wellen

### 5.4.1 Wellen im Vakuum

In der Abwesenheit von Ladungs- und Stromdichten vereinfachen sich die Maxwell-Gleichungen zu

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \partial_t \mathbf{E} \quad (5.29)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \partial_t \mathbf{B} \quad (5.30)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (5.31)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0. \quad (5.32)$$

Die Felder sind quellenfrei, sie besitzen jedoch Wirbel, die durch zeitliche Änderungen der Felder hervorgerufen werden. Dadurch sind Lösungen möglich, die die Ausbreitung elektromagnetischer Wellen im Vakuum beschreiben.

Als Lösungsansatz betrachten wir ebene Wellen in komplexer Darstellung,

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t).$$

Für jede komplexe Lösung bilden auch die konjugiert komplexen Felder eine Lösung der Gleichungen (5.29)-(5.32). Daher können auch Real- und Imaginärteil der komplexen Lösung als reelle Lösungen gewählt werden.

Mit diesem Ansatz erhält man aus den partiellen Differentialgleichungen ein System von algebraischen Gleichungen

$$\mathbf{k} \times \mathbf{B} = -k_0 \mathbf{E}, \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{B} = 0,$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E} = k_0 \mathbf{B}, \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{E} = 0,$$

mit  $k_0 = \omega/c$ . Der Wellenvektor  $\mathbf{k}$  steht senkrecht auf  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{B}$ . Man spricht von einer Transversalwelle, da die Schwingungen der Felder in einer Ebene senkrecht zur Ausbreitungsrichtung erfolgen.

Wählt man ein Koordinatensystem mit

$$\mathbf{k} = (0, 0, k), \quad \mathbf{E} = (E, 0, 0), \quad \mathbf{B} = (0, B, 0), \quad (5.33)$$

so folgt aus (5.33) das einfache Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} k & -k_0 \\ -k_0 & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.34)$$

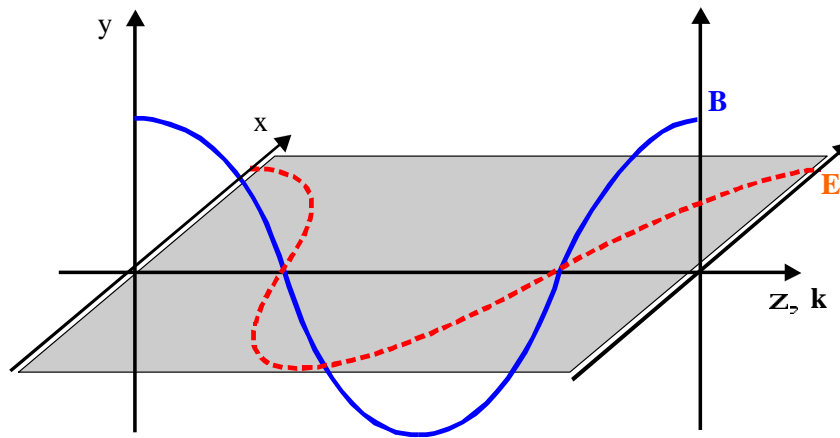


Abbildung 5.3: Linear polarisierte Welle im Vakuum

Für eine nichtverschwindende Lösung muß die Determinante der Koeffizientenmatrix verschwinden,

$$k^2 = k_0^2 \quad \Longleftrightarrow \quad k = \pm k_0, \quad \Longleftrightarrow \quad \omega = c|k| \quad . \quad (5.35)$$

Diese Beziehung wird als Dispersionsrelation bezeichnet. Für eine vorgegebene Frequenz  $\omega > 0$  kann  $k$  entweder positiv oder negativ sein, entsprechend der Ausbreitung der Welle in  $+z$  oder  $-z$  Richtung. Die Feldkomponenten  $E$  und  $B$  sind betragsmäßig gleich groß und bilden zusammen mit  $k$  ein rechthändiges System,

$$B = \pm E, \quad \text{für} \quad k = \pm k_0 \quad . \quad (5.36)$$

Ein Punkt konstanter Phase,  $kz - \omega t = \text{const}$  bewegt sich mit der Phasengeschwindigkeit

$$k \frac{dz}{dt} - \omega = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{dz}{dt} = \frac{\omega}{k} = \pm c. \quad (5.37)$$

Elektromagnetische Wellen werden nach ihrer Wellenlänge  $\lambda = 2\pi/k$  in unterschiedliche Spektralbereiche eingeteilt:

Wellenlänge	Spektralbereich
< 0.1 nm	Röntgenstrahlung (X)
0.1-30 nm	Ultraweiche Röntgenstrahlung (XUV)
30-185 nm	Vakuultraviolett (VUV)
185-400nm	Nahes Ultraviolett (NUV)
400-800nm	Sichtbares Licht
800nm-1mm	Infrarot (IR)
1nm-1cm	Mikrowellen
1cm-100km	Radiowellen

Die Energiedichte einer elektromagnetischen Welle kann mit dem allgemeinen Ausdruck (5.23) für die Energiedichte des elektromagnetischen Feldes berechnet werden. Da es sich hierbei um eine quadratische Funktion handelt muß man die reellen Felder

$$\mathcal{B} = \Re(\mathbf{E}), \quad \mathcal{B} = \Re(\mathbf{B}) \quad (5.38)$$

einsetzen,

$$W = \frac{1}{8\pi} (\mathcal{E}^2 + \mathcal{B}^2) \quad (5.39)$$

Mittelt man die Energiedichte über eine Schwingungsperiode, so erhält man eine zeitunabhängige Energiedichte, die als Wellenenergiedichte bezeichnet wird. Das Zeitmittel eines Produktes ebener Wellen kann wieder in einfacher Weise durch die komplexen Amplituden ausgedrückt werden,

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A}\mathcal{B} \rangle &= \frac{1}{4} \langle (A + A^*)(B + B^*) \rangle = \frac{1}{4} \langle (AB + A^*B^* + AB^* + A^*B) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \Re(AB^*). \end{aligned} \quad (5.40)$$

Hierbei wurde verwendet, daß die Produkte  $AB$  und  $A^*B^*$  mit der doppelten Frequenz schwingen und sich daher zu Null mitteln, während  $AB^*$  und  $A^*B$  zeitunabhängig sind. Wegen  $|E| = |B|$  ergibt die Mittelung von (5.39),

$$\langle W \rangle = \frac{1}{8\pi} \left( \frac{1}{2}|E|^2 + \frac{1}{2}|B|^2 \right) = \frac{1}{8\pi}|E|^2. \quad (5.41)$$

Für den Poynting Vektor einer elektromagnetischen Welle ergibt sich der Ausdruck

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} (\mathcal{E} \times \mathcal{B}) = \frac{c}{4\pi k_0} \mathcal{E} \times (\mathbf{k} \times \mathcal{E}) = \frac{c}{4\pi} \mathcal{E}^2 \hat{\mathbf{k}}, \quad (5.42)$$

wobei  $\mathbf{k} = k_0 \hat{\mathbf{k}}$  gesetzt wurde und  $\hat{\mathbf{k}}$  den Einheitsvektor in Ausbreitungsrichtung der Welle bezeichnet. Der Betrag des zeitgemittelten Poynting-Vektors wird als Intensität der elektromagnetischen Welle bezeichnet. Sie gibt die mittlere Energie an, die pro Zeit und Flächeneinheit durch eine Fläche senkrecht zur Ausbreitungsrichtung hindurchtritt und wird üblicherweise in  $\text{W}/\text{cm}^2$  gemessen. Die Mittelung von (5.42) ergibt für die Intensität

$$I = \frac{c}{4\pi} \langle \mathcal{E}^2 \rangle = \frac{c}{8\pi} |E|^2 = c \langle W \rangle. \quad (5.43)$$

## 5.4.2 Wellen in Materie

Bei der Ausbreitung elektromagnetischer Wellen in Materie werden die Elektronen zu erzwungenen Schwingungen angeregt, die eine zeitabhängige makroskopische Polarisation  $\mathbf{P}$  erzeugen. Die resultierende Stromdichte muß bei der Lösung der Maxwell'schen Gleichungen berücksichtigt werden. Für eine monochromatische Welle besitzt das anregende elektrische Feld die Form,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}, \omega) \exp(-i\omega t). \quad (5.44)$$

Für hinreichend kleine Auslenkungen der Elektronen sind die Polarisation  $\mathbf{P}$ , die dielektrische Verschiebung  $\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}$  und die Stromdichte  $\mathbf{j} = \dot{\mathbf{P}}$  jeweils proportional zum elektrischen Feld,

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \chi(\mathbf{r}, \omega)\mathbf{E}, \\ \mathbf{D} &= \epsilon(\mathbf{r}, \omega)\mathbf{E}, \\ \mathbf{j} &= \sigma(\mathbf{r}, \omega)\mathbf{E}. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Die Proportionalitätskonstanten sind i.a. orts- und frequenzabhängig und genügen den Relationen

$$\sigma = -i\omega\chi, \quad \epsilon = 1 + 4\pi\chi = 1 + \frac{4\pi\sigma}{-i\omega}. \quad (5.46)$$

Hierbei wurde vorausgesetzt, daß die anregende Welle monochromatisch ist und die Proportionalität lokal gültig ist. Außerdem wurde ein isotropes Medium angenommen, bei dem die im Medium erzeugten Felder parallel zum elektrischen Feld sind. Für anisotrope Medien müssen die Skalare durch Tensoren ersetzt werden. Die dielektrische Funktion  $\epsilon(\mathbf{r}, \omega)$  ist im allgemeinen komplexwertig. Sie beschreibt die optischen Materialeigenschaften.

Mit den Ansätzen (5.44) und (5.45) vereinfachen sich die Maxwell-Gleichungen zu,

$$\nabla \times \mathbf{B} = -ik_0(\epsilon\mathbf{E}), \quad (5.47)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = ik_0\mathbf{B}, \quad (5.48)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (5.49)$$

$$\nabla \cdot (\epsilon\mathbf{E}) = 0. \quad (5.50)$$

Eliminiert man das Magnetfeld aus den ersten beiden Gleichungen, so folgt für das elektrische Feld die Wellengleichung

$$\Delta\mathbf{E} - \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) + k_0^2 \epsilon\mathbf{E} = 0. \quad (5.51)$$

In einem homogenen Medium mit einer räumlich konstanten Dielektrizitätskonstante können die Lösungen immer noch in der Form ebener transversaler Wellen,

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t), \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{E} = 0, \quad \mathbf{B} = k_0^{-1}\mathbf{k} \times \mathbf{E} \quad (5.52)$$

gesucht werden. Aus der Wellengleichung (5.51) erhält man nun für die Wellenzahl im Medium die Dispersionsrelation

$$k^2 = k_0^2 \epsilon \quad \Longleftrightarrow \quad k = k_0 n, \quad \text{mit} \quad n = n_r + i n_i = \sqrt{\epsilon} \quad (5.53)$$

Das Verhältnis  $n = k/k_0$  wird als Brechungsindex bezeichnet. Der Realteil  $n_r$  bestimmt die Phasengeschwindigkeit  $v_{ph} = c/n_r$  der Welle im Medium. Der Imaginärteil  $n_i$  bestimmt die Amplitudenänderung  $\exp(-n_i k_0 s)$  bei der Ausbreitung der Welle entlang eines Weges der Länge  $s$ .

Wesentliche Eigenschaften der Dielektrizitätsfunktion und des zugehörigen Brechungsindex können im Rahmen des sogenannten Lorentzmodells verstanden werden. Nimmt man an, daß alle Dipolmomente unabhängig voneinander schwingen, so genügen sie in linearer Näherung einer harmonischen Schwingungsgleichung,

$$\ddot{\mathbf{d}} + \omega_0^2 \mathbf{d} = \frac{q^2}{m} \mathbf{E}. \quad (5.54)$$

Die spezielle Lösung dieser Gleichung, die proportional ist zum anregenden Feld, lautet,

$$\mathbf{d}(t) = \alpha(\omega) \mathbf{E}(t). \quad (5.55)$$

mit der Polarisierbarkeit

$$\alpha(\omega) = \frac{q^2/m}{\omega_0^2 - \omega^2}. \quad (5.56)$$

Falls die Dipole mit einer Dichte  $n(\mathbf{r})$  räumlich verteilt sind, ergibt sich die Polarisation  $\mathbf{P} = n(\mathbf{r})\mathbf{d}(t)$ . Daraus folgt die Dielektrizitätsfunktion

$$\epsilon(\omega) = 1 + 4\pi n \alpha = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2}, \quad \omega_p^2 = \frac{4\pi q^2 n}{m}. \quad (5.57)$$

Hierbei ist  $\omega_0$  die Eigenfrequenz der gebundenen Elektronen,  $\omega$  die Lichtfrequenz und  $\omega_p$  wird als Plasmafrequenz bezeichnet. Für niedrige Frequenzen,  $\omega \ll \omega_0$ , ist die Dielektrizitätskonstante größer als 1 und nimmt, ausgehend vom statischen Grenzwert  $\epsilon(0) = 1 + \omega_p^2/\omega_0^2$ , quadratisch mit der Frequenz zu,

$$\epsilon \rightarrow \epsilon(0) + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^4} \omega^2. \quad (5.58)$$

Bei hohen Frequenzen,  $\omega \gg \omega_0$ , erhält man die Dielektrizitätskonstante freier Elektronen,

$$\epsilon \rightarrow 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad (5.59)$$

die sich asymptotisch dem Vakuumwert 1 von unten her annähert. Von besonderem Interesse sind die Resonanzstellen und die Nullstellen der Dielektrizitätsfunktion. Im vorliegenden Modell tritt eine Resonanz bei der Eigenfrequenz  $\omega_0$  und eine Nullstelle bei der Plasmafrequenz  $\omega_p$  auf. Das Verhalten nahe der Resonanzfrequenz wird

hier nur unvollständig wiedergegeben, da die Breite und Höhe der Resonanz durch die vernachlässigte Dämpfung der Schwingungen bestimmt werden. In der Regel tritt an Resonanzstellen auch eine verstärkte Absorption auf. Die Nullstellen der Dielektrizitätsfunktion entsprechen Punkten an denen Reflexion auftritt, da sich die Wellen gemäß (5.53) in Gebiete mit  $\epsilon < 0$  nicht ausbreiten können.

### 5.4.3 Reflexion an einer ebenen Grenzfläche

An der Grenzfläche zwischen zwei Medien mit unterschiedlichen Dielektrizitätskonstanten  $\epsilon_1$  und  $\epsilon_2$  wird eine einfallende Welle teilweise reflektiert und teilweise transmittiert. Wir betrachten eine ebene Grenzfläche, die durch einen Sprung in der Dielektrizitätsfunktion an der Stelle  $z = 0$ ,

$$\epsilon(z) = \begin{cases} \epsilon_1 & z < 0 \\ \epsilon_2 & z > 0 \end{cases} \quad (5.60)$$

dargestellt wird. Dieses Stufenmodell ist anwendbar, falls die Dicke der Grenzschicht sehr viel kleiner ist als die Wellenlänge.

Bei senkrechtem Einfall kann das elektrische Feld der Welle in x-Richtung gewählt werden. Setzt man

$$\mathbf{E} = (E_x(z), 0, 0) \exp(-i\omega t), \quad (5.61)$$

so vereinfacht sich die allgemeine Wellengleichung (5.51) zu

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} + k_0^2 \epsilon(z) E_x = 0. \quad (5.62)$$

Diese Gleichung kann zunächst abschnittsweise in den beiden Halbräumen gelöst werden. Nimmt man an, daß die eingestrahelte Welle im Halbraum  $z < 0$  einläuft, so erhält man

$$E_x = \begin{cases} A [ \exp(ik_1 z) + r \exp(-ik_1 z) ] & ; z < 0 \\ A t \exp(ik_2 z) & ; z > 0 \end{cases} \quad (5.63)$$

mit  $k_{1,2} = k_0 \sqrt{\epsilon_{1,2}}$ . Hierbei bezeichnet  $A$  die Amplitude der einlaufenden,  $rA$  die Amplitude der reflektierten und  $tA$  die Amplitude der transmittierten Welle.

Um eine Lösung der Differentialgleichung (5.62) vom linken Halbraum in den rechten Halbraum fortsetzen zu können, benötigt man Anschlußbedingungen für die Funktion  $E_x$  und ihre Ableitung  $\partial_z E_x$  an der Stelle  $z = 0$ . Dazu integrieren wir (5.62) über eine beliebig dünne Schicht von  $0^-$  nach  $0^+$  und erhalten,

$$[\partial_z E_x] = \partial_z E_x(0^+) - \partial_z E_x(0^-) = -k_0^2 \int_{0^-}^{0^+} dz \epsilon(z) E_x(z) \rightarrow 0. \quad (5.64)$$

Im Grenzübergang strebt das Integral gegen Null, da der Integrand beschränkt bleibt. Mit der Stetigkeit der Ableitung ist auch die Funktion selbst stetig,

$$[E_x] = 0, \quad [\partial_z E_x] = 0. \quad (5.65)$$

Durch Einsetzen von (5.63) in (5.65) erhält man Bestimmungsgleichungen für die Koeffizienten  $r$  und  $t$ ,

$$\begin{aligned} 1 + r &= t, \\ k_1(1 - r) &= k_2 t. \end{aligned} \quad (5.66)$$

Deren Auflösung ergibt

$$\begin{pmatrix} r \\ t \end{pmatrix} = \frac{1}{k_1 + k_2} \begin{pmatrix} k_1 - k_2 \\ 2k_1 \end{pmatrix}. \quad (5.67)$$

Das Reflexionsvermögen  $R$  der Grenzfläche wird durch das Verhältnis der Intensität der reflektierten zur Intensität der einfallenden Welle definiert. Da sich beide Wellen im selben Medium ausbreiten, können die Intensitäten durch die Betragsquadrate der Amplituden ersetzt werden,

$$R = |r|^2 = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2 = \left| \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \right|^2. \quad (5.68)$$

Vollständige Reflexion erhält man z.B. für eine Grenzfläche bei der  $n_1$  reell und  $n_2$  rein imaginär ist. Im Zähler und Nenner von (5.71) stehen dann konjugiert komplexe Zahlen, deren Betrag gleich groß ist.

Ähnlich kann man auch das Reflexionsvermögen bei schrägem Einfall behandeln. In diesem Fall wird durch den Wellenvektor der einfallenden Welle und den Normalenvektor der Grenzfläche eine Ebene definiert, die man als Einfallsebene bezeichnet. Wir wählen die  $yz$ -Ebene als Einfallsebene. Man muß nun zwischen zwei unterschiedlichen Polarisationsrichtungen unterscheiden, je nachdem ob das elektrische Feld senkrecht oder parallel zur Einfallsebene steht. Mit s-Polarisation bezeichnet man die Ausrichtung des elektrischen Feldes senkrecht, mit p-Polarisation die Ausrichtung parallel zur Einfallsebene. Die entsprechenden Feldkomponenten sind,

$$\begin{aligned} \text{s-Polarisation:} \quad \mathbf{E} &= (E_x(z), 0, 0) \exp(ik_y y - i\omega t), \\ \mathbf{B} &= (0, B_y(z), B_z(z)) \exp(ik_y y - i\omega t) \end{aligned} \quad (5.69)$$

$$\begin{aligned} \text{p-Polarisation:} \quad \mathbf{E} &= (0, E_y(z), E_z(z)) \exp(ik_y y - i\omega t), \\ \mathbf{B} &= (B_x, 0, 0) \exp(ik_y y - i\omega t) \end{aligned}$$

Für s-Polarisation erfüllt die Komponente  $E_x$  des elektrischen Feldes die Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} + k_z^2 E_x = 0, \quad k_z^2 = k_0^2 \epsilon(z) - k_y^2. \quad (5.70)$$

Dies entspricht Gleichung (5.62), wenn man dort die Wellenzahl  $k$  durch die Komponente  $k_z$  ersetzt. Mit der entsprechenden Substitution erhält man aus (5.68) das Reflexionsvermögen für den schrägen Einfall von s-polarisiertem Licht,

$$R_{\parallel} = \left| \frac{k_{z,1} - k_{z,2}}{k_{z,1} + k_{z,2}} \right|^2 \quad (5.71)$$

Für p-Polarisation kann man die Komponente  $B_x$  betrachten, die in den beiden Halbräumen ebenfalls die Gleichung (5.70) erfüllt, jedoch bei  $z = 0$  anderen Stetigkeitsbedingungen genügt. Wegen der Stetigkeit der Tangentialkomponenten

$$B_x, \quad E_y = -\frac{1}{ik_0\epsilon} \partial_z B_x \quad (5.72)$$

sind in diesem Fall  $B_x$  und  $\partial_z B_x/\epsilon$  stetig. Die Lösung für  $B_x$  besitzt dieselbe Form wie (5.63) während die Stetigkeitsbedingung für die Ableitung einen zusätzlichen Faktor  $\epsilon$  enthält. Man kann daher die entsprechenden Formeln durch die Substitution  $k_z \rightarrow k_z/\epsilon$  erhalten. Damit ergibt sich für p-Polarisation das Reflexionsvermögen

$$R_{\perp} = \left| \frac{\frac{k_{z,1}}{\epsilon_1} - \frac{k_{z,2}}{\epsilon_2}}{\frac{k_{z,1}}{\epsilon_1} + \frac{k_{z,2}}{\epsilon_2}} \right|^2 = \left| \frac{\epsilon_2 k_{z,1} - \epsilon_1 k_{z,2}}{\epsilon_2 k_{z,1} + \epsilon_1 k_{z,2}} \right|^2. \quad (5.73)$$

Die Formeln für das Reflexionsvermögen werden auch Fresnelsche Formeln genannt.

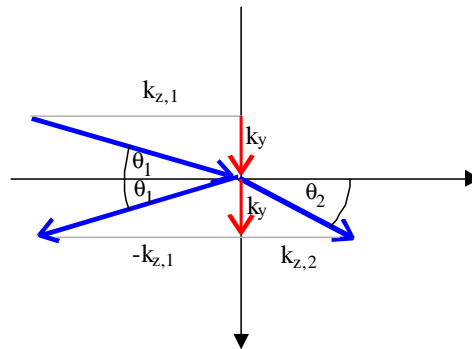


Abbildung 5.4: Reflexion und Brechung an einer Oberfläche



### 5.4.4 Strahlung im thermischen Gleichgewicht

In einem Hohlraum, dessen Wände sich auf einer konstanten Temperatur  $T$  befinden, stellt sich durch viele Absorptions- und Emissionsprozesse ein charakteristisches Strahlungsgleichgewicht ein. Die Herleitung des Strahlungsgleichgewichtes basiert auf zwei grundlegenden Annahmen:

**Plancksches Quantenpostulat:** Die Energie einer monochromatischen Welle kann nur die diskreten Werte,

$$E_n = n\hbar\omega, \quad \text{mit} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.74)$$

annehmen. Die Energieeinheit  $\hbar\omega = h\nu$  bezeichnet die Energie eines Photons der Frequenz  $\omega = 2\pi\nu$ . Nach Max Planck, der dieses Postulat für die Emission und Absorption von Licht eingeführt hat, nennt man  $h = 2\pi\hbar$  das Plancksche Wirkungsquantum.

**Kanonische Energieverteilung:** Die Wahrscheinlichkeit  $n$  Photonen der Frequenz  $\omega$  mit der Energie  $E_n$  zu messen, wird durch die kanonische Verteilung

$$P_n = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E_n), \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad Z = \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-\beta E_n) \quad (5.75)$$

beschrieben. Die Zustandssumme  $Z$  normiert die Verteilung,

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1.$$

Der Parameter  $\beta$  bestimmt den Zusammenhang der mittleren Energie des Systems mit der Temperatur. Die kanonische Verteilung kann aus allgemeinen Postulaten der statistischen Physik abgeleitet werden.

Das Strahlungsgleichgewicht wird durch seine spektrale Energiedichte  $u(\nu)$  charakterisiert. Diese bezeichnet die mittlere Energie des Strahlungsfeldes pro Volumeneinheit und pro Frequenzintervall  $d\nu$ . Bezeichnet man mit  $\bar{n}(\nu)$  die mittlere Anzahl der Photonen mit der Energie  $h\nu$  und mit  $\mathcal{N}(\nu)$  die Anzahl der Moden pro Volumeneinheit und Frequenzintervall, so gilt

$$u(\nu) = \mathcal{N}(\nu) h\nu \bar{n}(\nu). \quad (5.76)$$

Die spektrale Modendichte des Hohlraums kann berechnet werden, indem man ein endliches Volumen  $V$ , z.B. einen Würfel mit der Kantenlänge  $L$  betrachtet. Wählt

man periodische Randbedingungen,  $E_i(x_j + L) = E_i(x_j)$ , so sind die Schwingungsmoden des Hohlraums die ebenen Wellen

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\mathbf{k},\alpha} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t) \quad (5.77)$$

wobei die möglichen Frequenzen und Wellenvektoren durch die Dispersionsrelation und die Randbedingungen zu

$$\omega = ck, \quad \mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$$

bestimmt werden. Hierbei bezeichnen  $n_x$ ,  $n_y$  und  $n_z$  ganze Zahlen und  $\alpha = 1, 2$  die beiden unabhängigen Polarisationsvektoren in der Ebene senkrecht zu  $\mathbf{k}$ . Im  $\mathbf{k}$ -Raum ist demnach das spezifische Volumen pro Mode  $(2\pi)^3/V$ . Die Anzahl der Moden innerhalb einer Kugelschale der Breite  $dk$  ist

$$dN = 2 \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3/V}, \quad (5.78)$$

wobei der Faktor 2 die beiden Polarisationsrichtungen pro Wellenvektor berücksichtigt. Substituiert man  $k = 2\pi\nu/c$  und dividiert durch  $V$ , so folgt für die spektrale Modendichte,

$$\mathcal{N}(\nu) = \frac{dN}{V d\nu} = 8\pi \frac{\nu^2}{c^3}. \quad (5.79)$$

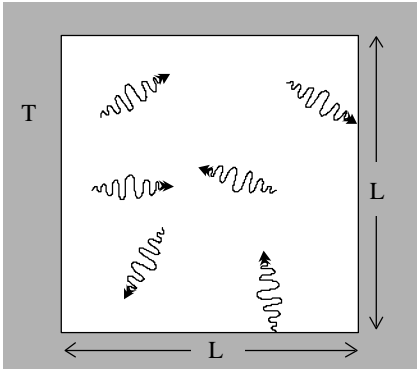


Abbildung 5.5: Hohlraumstrahler

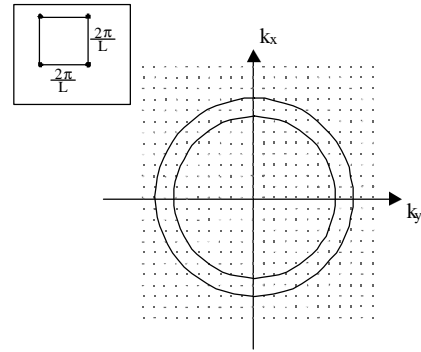


Abbildung 5.6: Abzählen der Moden

Für ein System von Photonen mit Energien  $E_n = nh\nu$  lautet die kanonische Verteilung,

$$P_n = (1 - q)q^n, \quad (5.80)$$

mit

$$q = e^{-\beta h\nu}, \quad Z = \sum_{n=0}^{\infty} q^n = \frac{1}{1 - q}$$

Die mittlere Anzahl der Photonen mit der Energie  $h\nu$  im thermischen Gleichgewicht bei der Temperatur  $T$  wird durch die Bose-Einstein Verteilung

$$\bar{n} = \sum_{n=0}^{\infty} nP_n = \frac{1}{\exp(\beta h\nu) - 1} \quad (5.81)$$

bestimmt. Die Bose-Einstein Verteilung wird in der statistischen Physik allgemeiner für ein ideales Gas von Bosonen hergeleitet. Das darin auftretende chemische Potential ist im Falle von Photonen Null, da die Photonenzahl nicht von außen vorgegeben wird.

Zur Ableitung von (5.81) machen wir die Substitution  $nq^{n-1} = dq^n/dq$  und erhalten damit

$$\frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} nq^n = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} q \frac{dq^n}{dq} = \frac{q}{Z} \frac{dZ}{dq} = \frac{qZ^2}{Z} = \frac{q}{1-q}. \quad (5.82)$$

Mit der Modendichte (5.79) und der mittleren Photonenzahl(5.81) folgt für die spektrale Energiedichte das Plancksche Strahlungsgesetz,

$$u(\nu) = 8\pi \frac{h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp(\beta h\nu) - 1}. \quad (5.83)$$

Im Grenzfall kleiner Frequenzen folgt aus dem Planckschen Gesetz das Strahlungsgesetz von Rayleigh-Jeans

$$u(\nu) = \mathcal{N}(\nu)k_B T, \quad \text{für} \quad h\nu \ll k_B T. \quad (5.84)$$

Es ist unabhängig von der Planckschen Konstante und stellt daher ein klassisches Gesetz dar. Nach diesem Gesetz werden pro Schwingungsmode zwei Freiheitsgrade mit einer mittleren Energie von  $k_B T/2$  angeregt. Im Grenzfall großer Frequenzen führt das Rayleigh-Jeans Gesetz zu einer unbeschränkten Zunahme der Energie mit  $\nu^2$ . Diese Divergenz wurde durch die Quantenhypothese von Planck vermieden. Die Plancksche Formel geht für große Frequenzen in die Wiensche Strahlungsformel über,

$$u(\nu) = 8\pi \frac{h\nu^3}{c^3} \exp(-\beta h\nu), \quad \text{für} \quad h\nu \gg k_B T. \quad (5.85)$$

Das Maximum der Planckschen Verteilung liegt bei  $h\nu = 2.82k_B T$ . Die entsprechende mittlere Photonenzahl ist  $\bar{n} = 0.06$ .

**Teil II**

**Quantenmechanik**

# Kapitel 6

## Grundkonzepte der Quantenmechanik

Die Grundbegriffe der Quantenmechanik, wie “Zustandsvektoren”, “Operatoren”, “Projektionsamplituden” und “Projektionswahrscheinlichkeiten”, werden im folgenden am Beispiel von Elektronenspins in einem Magnetfeld eingeführt. Der Spin eines Elektrons in einem Magnetfeld stellt ein besonders einfaches Quantensystem mit zwei diskreten Energiezuständen (2-Niveau-System) dar. Für den Elektronenspin gibt es keine klassische Interpretation, so daß die Notwendigkeit der quantenmechanischen Betrachtungsweise hier besonders deutlich wird.

### 6.1 Messung physikalischer Größen in der Quantenmechanik

In der Quantenmechanik werden bei der Messung physikalischer Größen die folgenden grundlegenden Sachverhalte beobachtet:

- Meßwerte sind oft *quantisiert*, d.h. bei jeder Einzelmessung können nur bestimmte diskrete Werte auftreten. Kontinuierliche Meßwerte können als Grenzfall diskreter Meßwerte aufgefaßt werden, die unendlich dicht liegen.
- Bei vielen Messungen an gleichartigen Systemen kann das Auftreten eines bestimmten Meßwertes nur *statistisch* mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit vorhergesagt werden. Der Fall, daß ein Meßwert mit Sicherheit eintritt, entspricht hierbei der Wahrscheinlichkeit 1.

Als Beispiel betrachten wir ein Experiment zur Bestimmung des Elektronenspins (Stern, Gerlach, 1926).

### 6.1.1 Stern-Gerlach-Versuch

Ein monoenergetischer Strahl aus Silberatomen passiert ein inhomogenes Magnetfeld  $\mathbf{B} \approx B(z)\mathbf{e}_z$ . Man beobachtet dabei eine Aufspaltung des Atomstrahls in zwei Teilstrahlen, deren Intensitäten hinter dem Magneten mit einem Detektor nachgewiesen werden können.

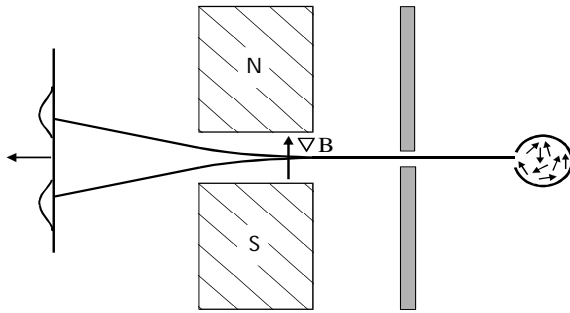


Abbildung 6.1: Prinzipieller Aufbau des Stern-Gerlach Experiments zur Bestimmung des Elektronenspins. Ein Strahl aus unpolarisierten Silberatomen wird in einem inhomogenen Magnetfeld in zwei Teilstrahlen aufgespalten.

Der Stern-Gerlach-Versuch kann durch die Einführung des Elektronenspins wie folgt gedeutet werden (Uhlenbeck, Goudsmit, 1929):

- Die Silberatome besitzen ein magnetisches Moment  $\boldsymbol{\mu}$ , auf das im inhomogenen Magnetfeld eine Kraft

$$\mathbf{F} = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) \approx \mu_z \partial_z B_z \mathbf{e}_z$$

wirkt. Klassisch erwartet man, daß die Richtungen der magnetischen Momente beliebig verteilt sind und die Komponente  $\mu_z = \mu \cos \Theta$  daher einen kontinuierlichen Wertebereich durchläuft. Dies würde zu einer Verbreiterung des Strahls aber nicht zur beobachteten Aufspaltung führen.

- Die Silberatome besitzen eine abgeschlossene Elektronenschale ohne Drehimpuls und darüber ein Valenzelektron im 5s-Zustand. Das magnetische Moment wird proportional zum Eigendrehimpuls (Spin)  $\mathbf{S}$  des Valenzelektrons angenommen,

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{S}, \quad \gamma = g \frac{q}{2mc}, \quad g = 2.$$

Das gyromagnetische Verhältnis  $\gamma$  der Eigenrotation ist doppelt so groß wie das der Umlaufbewegung. Diese Besonderheit des Elektronenspins wird durch den Landé-Faktor  $g$  berücksichtigt.

- Die Spinkomponente  $S_z$  in z-Richtung ist eine quantisierte Größe, die nur zwei diskrete Werte,

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2},$$

annehmen kann. Entsprechend gibt es nur 2 Werte für die Komponente  $\mu_z$  des magnetischen Moments und für die Energie  $W$ :

$$\mu_z = \pm \gamma \frac{\hbar}{2} = \mp \mu_B, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}, \quad W = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \pm \mu_B B_z.$$

### 6.1.2 Messung einer Größe

Bei der Messung des Elektronenspins im Stern-Gerlach Versuch wird jedes einzelne Atom immer nur in einem der beiden Teilstrahlen nachgewiesen. Durch viele aufeinanderfolgende Einzelmessungen ergibt sich die beobachtete Intensitätsverteilung der Teilstrahlen. Diese Beobachtung läßt sich verallgemeinern. Mißt man an einem physikalischen System eine beliebige quantisierte Größe  $A$ , so treten bestimmte Meßwerte  $a_n$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$  mit bestimmten Wahrscheinlichkeiten  $p(a_n)$  auf. Das physikalische System wird hierbei nach den möglichen Werten der Größe  $A$  analysiert. Eine entsprechende Meßapparatur wird als Analysator bezeichnet (Abb. 6.2).

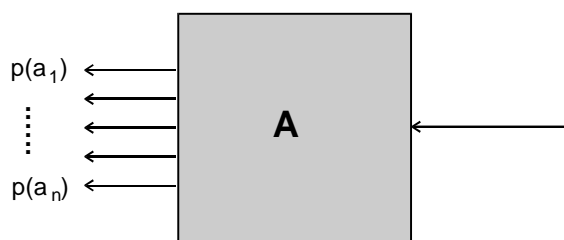


Abbildung 6.2: Schematische Darstellung eines Analysators. Die möglichen Meßwerte  $a_n$  der Größe  $A$  treten mit Wahrscheinlichkeiten  $p(a_n)$  im physikalischen System auf.

Blockiert man bei einem Analysator alle Ausgangskanäle bis auf einen, so befindet sich das System nach der Messung in einem Zustand, in dem die Größe  $A$  einen bestimmten Wert annimmt. Die entsprechende Meßapparatur wird als Projektor bezeichnet (Abb. 6.3).

Für den Elektronenspin besteht ein Projektor aus einer Stern-Gerlach-Anordnung, bei der ein Teilstrahl ausgeblendet wird. Blockiert man den Teilstrahl der Atome

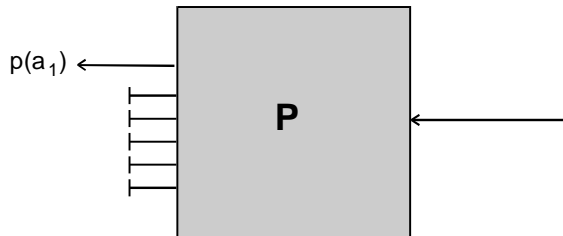


Abbildung 6.3: Schematische Darstellung eines Projektors. Die Messung selektiert einen Zustand, der einen bestimmten Meßwert der Größe A liefert. Andere Zustände werden blockiert.

mit  $S_z = -\frac{1}{2}\hbar$  so erhält man einen Strahl von Atomen, die mit Sicherheit den Spin  $S_z = +\frac{1}{2}\hbar$  besitzen. Dies läßt sich überprüfen, indem man den Strahl mit einem zweiten Stern-Gerlach-Versuch analysiert. Dabei stellt man fest, daß der Meßwert  $S_z = -\frac{1}{2}\hbar$  die Wahrscheinlichkeit Null besitzt (Abb. 6.4).

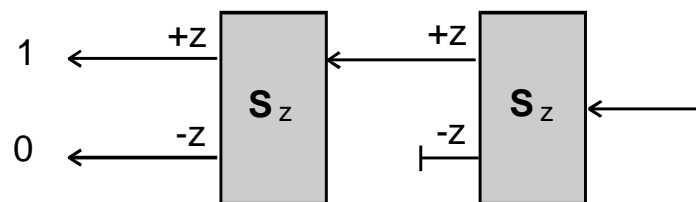


Abbildung 6.4: Zweimalige Messung von  $S_z$ . Die bei der ersten Messung selektierten Atome mit  $S_z = +\frac{1}{2}\hbar$  besitzen bei der zweiten Messung mit Sicherheit denselben Meßwert. Durch die erste Messung wird ein Zustand präpariert, in dem das System einen bestimmten Meßwert besitzt.

### 6.1.3 Messung mehrerer Größen

Neben der Spinkomponente  $S_z$  kann man auch die Spinkomponenten  $S_x$  oder  $S_y$  messen, indem man das Magnetfeld entsprechend in x- oder y-Richtung orientiert. Es stellt sich nun die Frage, ob zwei Spinkomponenten gleichzeitig bestimmte Werte



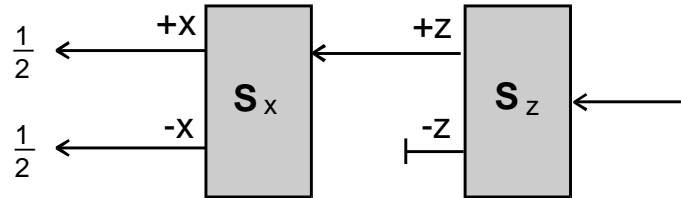


Abbildung 6.5: Messung von  $S_x$  an Spins mit  $S_z = +\frac{1}{2}\hbar$ . Beide Spinzustände  $S_x = +\frac{1}{2}\hbar$  und  $S_x = -\frac{1}{2}\hbar$  treten mit gleicher Wahrscheinlichkeit auf.

annehmen können. Dazu betrachten wir zuerst eine Messung von  $S_z$ . An den Atomen mit Spin  $S_z = +\frac{1}{2}\hbar$  wird danach eine Messung von  $S_x$  vorgenommen. Wegen der axialen Symmetrie des Ausgangszustandes, treten die Spinkomponenten  $S_x = \pm\frac{1}{2}\hbar$  mit gleicher Wahrscheinlichkeit auf (Abb. 6.5). Wird an den Atomen mit Spin  $S_x = +\frac{1}{2}\hbar$  nochmals  $S_z$  gemessen, so beobachtet man, daß gleich viele Atome den Spin  $+\frac{1}{2}\hbar$  und  $-\frac{1}{2}\hbar$  in z-Richtung besitzen. Die Messung von  $S_x$  hat den Spinzustand so geändert, daß die Messung von  $S_z$  ein unbestimmtes Meßergebnis liefert (Abb. 6.6). Mißt man nacheinander für eine Größe A den Wert  $a$  und für eine Größe B den Wert  $b$  so können i.a. folgende Fälle auftreten:

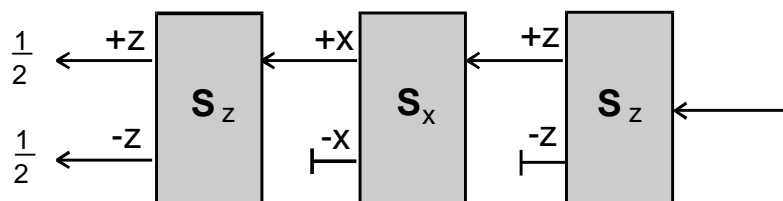


Abbildung 6.6: Messung zweier inkompatibler Größen.  $S_x$  und  $S_z$  können nicht gleichzeitig bestimmte Werte annehmen.

**Kompatible Größen:** Eine nachfolgende Messung von A ergibt wieder  $a$ , d.h. die Messung von B hatte keinen Einfluß auf die Messung von A. In diesem Fall werden die Größen kompatibel genannt. Kompatible Größen können gleichzeitig bestimmte Werte annehmen.

**Inkompatible Größen:** Eine nachfolgende Messung von A ergibt ein unbestimmtes Ergebnis, d.h. die Messung von B hat den Zustand des Systems geändert. In diesem Fall werden die Größen inkompatibel genannt. Inkompatible Größen können nicht gleichzeitig bestimmte Werte annehmen.

### 6.1.4 Messung von polarisiertem Licht

Die bei der Messung des Elektronenspins gemachten Beobachtungen gelten genauso für andere Meßgrößen. In der klassischen Physik stellt z.B. die Polarisationsrichtung einer Lichtwelle,

$$\mathbf{E} = E\boldsymbol{\epsilon}e^{i(kx - \omega t)}, \quad \boldsymbol{\epsilon}^* \cdot \boldsymbol{\epsilon} = 1 \quad (6.1)$$

eine analoge zweiwertige Meßgröße dar. Mit doppelbrechenden Kristallen läßt sich ein unpolarisierter Lichtstrahl in zwei senkrecht zueinander linear polarisierte Anteile aufspalten. Linear polarisiertes Licht einer bestimmten Polarisationsrichtung kann man mit Polarisatoren herstellen. Somit stehen für die Messung Analysatoren und Projektoren zur Verfügung.

Der Polarisationszustand wird in der Optik durch den i.a. komplexen Polarisationsvektor  $\boldsymbol{\epsilon}$  beschrieben. Durch einen Polarisator in x-Richtung, tritt nur die Komponente  $\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{E}$  des Feldvektors hindurch. Der Bruchteil der durchgelassenen Intensität ist

$$p = |\mathbf{e}_x \cdot \boldsymbol{\epsilon}|^2. \quad (6.2)$$

Ein allgemeiner Polarisationsvektor kann als Linearkombination von zwei orthogonalen Basisvektoren dargestellt werden. Einem Analysator in xy-Richtung entspricht eine Darstellung des Polarisationszustandes,

$$\boldsymbol{\epsilon} = c_x \mathbf{e}_x + c_y \mathbf{e}_y, \quad (6.3)$$

durch die Basisvektoren  $\mathbf{e}_x$  und  $\mathbf{e}_y$ . Dreht man den Analysator um  $45^\circ$ , so wird der Polarisationszustand entsprechend durch die Basisvektoren

$$\mathbf{e}'_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y), \quad \mathbf{e}'_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y). \quad (6.4)$$

dargestellt. Der um  $45^\circ$  gedrehte  $x'y'$ -Analysator spaltet einen x- bzw. y-polarisierten Strahl in zwei Teilstrahlen mit gleicher Intensität auf, da z.B.

$$|\mathbf{e}'_x \cdot \mathbf{e}_x|^2 = |\mathbf{e}'_x \cdot \mathbf{e}_y|^2 = \frac{1}{2} \quad (6.5)$$

gilt. Es gibt noch eine weitere Möglichkeit, linear polarisiertes Licht in zwei Teilstrahlen gleicher Intensität aufzuspalten. Rechts- und linkszirkular polarisiertes Licht wird durch die komplexen Polarisationsvektoren

$$\mathbf{e}_R = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y), \quad \mathbf{e}_L = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y) \quad (6.6)$$

dargestellt. Die Betragsquadrate der Skalarprodukte von  $\mathbf{e}_{R,L}$  mit  $\mathbf{e}_{x,y}$  bzw.  $\mathbf{e}_{x',y'}$  sind wiederum gleich  $1/2$ .

Die Analysatoren für die Polarisationszustände  $xy$ ,  $x'y'$  und  $RL$  sind somit völlig analog zu den Analysatoren für die Spinkomponenten  $S_z$ ,  $S_x$  und  $S_y$ . Es liegt daher nahe auch die Spinzustände durch Vektoren in einem zweidimensionalen linearen Raum mit komplexen Koeffizienten darzustellen. Tatsächlich basiert die Quantenmechanik auf dem Postulat, daß jeder quantenmechanische Zustand eines physikalischen Systems durch einen Zustandsvektor in einem abstrakten komplexen Vektorraum dargestellt wird. Die "Projektionswahrscheinlichkeit" für ein Meßergebnis wird analog zu (6.2) durch das Betragsquadrat einer komplexen "Projektionsamplitude" berechnet. Die Dimension des Vektorraums hängt vom betrachteten System ab. Die Postulate der Quantenmechanik und deren physikalische Interpretation werden im nächsten Kapitel vorgestellt. Zuvor werden in den folgenden Abschnitten einige mathematische Grundlagen über Vektorräume zusammengefaßt.

## 6.2 Zustandsvektoren

### 6.2.1 Vektorraum

Der quantenmechanische Zustandsraum ist ein Vektorraum dessen Elemente mit  $|\alpha\rangle$ ,  $|\beta\rangle$ ,  $|\gamma\rangle$ ,  $\dots$  bezeichnet werden. Die Vektoren können addiert und mit komplexen Zahlen multipliziert werden. Eine Linearkombination von Vektoren ist wieder ein Vektor,

$$|\gamma\rangle = c|\alpha\rangle + d|\beta\rangle; \quad c, d \text{ komplex.} \quad (6.7)$$

Eine Menge von Vektoren  $\{|\alpha_i\rangle\}$ ,  $i = 1, \dots, N$  heißt linear unabhängig, falls der Nullvektor nur die triviale Darstellung als Linearkombination zuläßt, d.h. aus

$$\sum_{i=1}^N c_i |\alpha_i\rangle = 0 \quad (6.8)$$

folgt,  $c_1 = \dots = c_N = 0$ . Ein Vektorraum heißt  $N$ -dimensional, wenn maximal  $N$  linear unabhängige Vektoren existieren. Existieren unendlich viele linear unabhängige Vektoren (z.B. orthogonale Funktionen), so ist der Vektorraum unendlichdimensional.

## 6.2.2 Skalarprodukt

Ein komplexer Vektorraum, in dem ein Skalarprodukt definiert ist, wird ein unitärer Raum genannt.

Ein Skalarprodukt ist eine Zuordnung, die je zwei Vektoren  $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$  eine komplexe Zahl  $s(|\alpha\rangle, |\beta\rangle) = \langle \alpha | \beta \rangle$  zuordnet und folgende Eigenschaften erfüllt:

$$\begin{aligned}
 (i) \quad & \langle \beta | \alpha \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle^* \\
 (ii) \quad & \langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0, \\
 & \langle \alpha | \alpha \rangle = 0 \Rightarrow |\alpha\rangle = 0 \\
 (iii) \quad & s(|\alpha\rangle, c|\beta\rangle) = c\langle \alpha | \beta \rangle, \\
 & s(|\alpha\rangle, |\beta\rangle + |\gamma\rangle) = \langle \alpha | \beta \rangle + \langle \alpha | \gamma \rangle
 \end{aligned} \tag{6.9}$$

Gilt  $\langle \alpha | \beta \rangle = 0$ , so werden die Vektoren  $|\alpha\rangle$  und  $|\beta\rangle$  orthogonal genannt.

**Dualraum:** Durch das Skalarprodukt wird jedem Vektor  $|\alpha\rangle$  ein lineares Funktional zugeordnet:

$$|\alpha\rangle \rightarrow \langle \alpha | \equiv s(|\alpha\rangle, \cdot) . \tag{6.10}$$

Dieses bildet einen beliebigen Vektor  $|\beta\rangle$  auf die komplexe Zahl  $\langle \alpha | \beta \rangle$  ab. Die Funktionale  $\langle \alpha |, \langle \beta |, \langle \gamma |, \dots$  bilden einen Vektorraum, den Dualraum. Nach Dirac bezeichnet man die Funktionale als “Bra” und die Vektoren als “Ket”. Die Anwendung eines “Bra” auf ein “Ket” ergibt ein “Bracket” (englischer Ausdruck für Klammer):

$$\begin{array}{cccc}
 \langle \alpha | & \cdot & |\beta\rangle & = & \langle \alpha | \beta \rangle \\
 \text{bra} & c & \text{ket} & & \text{bracket}
 \end{array}$$

**Norm:** Das Skalarprodukt definiert eine Norm durch

$$\|\alpha\| = \sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle} . \tag{6.11}$$

Die Norm ist gemäß der Definition des Skalarproduktes reell und positiv definit.

**Ungleichung von Schwarz-Bunyakowski:** Für je zwei Vektoren  $|\alpha\rangle$  und  $|\beta\rangle$  gilt die Ungleichung

$$|\langle \alpha | \beta \rangle| \leq \|\alpha\| \|\beta\| . \tag{6.12}$$

Beweis: Ist  $|\alpha\rangle$  linear abhängig von  $|\beta\rangle$ , so gilt

$$|\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle = 0, \quad \langle \beta | \alpha \rangle + \lambda\langle \beta | \beta \rangle = 0, \quad \lambda = -\frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} .$$

Ist  $|\alpha\rangle$  linear unabhängig von  $|\beta\rangle$ , so gibt es einen Vektor  $|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle$ , der orthogonal zu  $|\beta\rangle$  ist und das Lot von  $|\alpha\rangle$  auf  $|\beta\rangle$  darstellt. Wegen

$$\begin{aligned}
 \langle \beta | \beta \rangle \langle \gamma | \gamma \rangle &= \langle \beta | \beta \rangle \left\{ \langle \alpha | \alpha \rangle + \lambda^* \langle \beta | \alpha \rangle + \lambda \langle \alpha | \beta \rangle + |\lambda|^2 \langle \beta | \beta \rangle \right\} \\
 &= \langle \beta | \beta \rangle \langle \alpha | \alpha \rangle - |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \geq 0
 \end{aligned} \tag{6.13}$$

folgt hieraus (6.12). Das Gleichheitszeichen gilt, wenn  $\langle \gamma | \gamma \rangle = 0$ . Dies ist genau dann erfüllt, wenn die Vektoren linear abhängig sind.

### 6.2.3 Orthonormalsysteme

Ein Orthonormalsystem besteht aus einer Menge von Basisvektoren  $\{|n\rangle\}$ , die auf 1 normiert und paarweise orthogonal zueinander sind,

$$\langle n | n' \rangle = \delta_{nn'} . \quad (6.14)$$

**Entwicklung nach einem Orthonormalsystem:** Bras und Kets, die von den Basisvektoren linear abhängig sind, können als Linearkombinationen

$$|\alpha\rangle = \sum_{n'} \alpha_{n'} |n'\rangle , \quad \langle \beta | = \sum_{n'} \langle n' | \beta_n^*$$

dargestellt werden. Multipliziert man von links mit  $\langle n |$  bzw. von rechts mit  $|n\rangle$ , so ergeben sich wegen (6.14) für die Entwicklungskoeffizienten die Skalarprodukte

$$\alpha_n = \langle n | \alpha \rangle , \quad \beta_n^* = \langle \beta | n \rangle = \langle n | \beta \rangle^* .$$

Die Entwicklung läßt sich damit auch auf folgende Weise schreiben

$$|\alpha\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \alpha \rangle = \left( \sum_n |n\rangle \langle n | \right) \cdot |\alpha\rangle , \quad (6.15)$$

$$\langle \beta | = \sum_n \langle \beta | n \rangle \langle n | = \langle \beta | \cdot \left( \sum_n |n\rangle \langle n | \right) .$$

**Vollständigkeitsrelation:** Ein Orthonormalsystem nennt man vollständig, wenn sich jeder Bra bzw. Ket nach der Basis entwickeln läßt, d.h. die Beziehung (6.15) gilt für beliebige  $|\alpha\rangle, \langle \beta |$ . Der in Klammern stehende Ausdruck muß dann gleich dem Einheitsoperator sein,

$$\sum_n |n\rangle \langle n | = \mathbf{I} . \quad (6.16)$$

Wegen dieser Identität, kann ein vollständiges Basissystem an beliebigen Stellen zwischen einem Bra und einem Ket eingeschoben werden:

$$(i) \quad \langle \alpha | \alpha \rangle = \sum_n \langle \alpha | n \rangle \langle n | \alpha \rangle = \sum_n |\alpha_n|^2 , \quad (6.17)$$

$$(ii) \quad \langle \beta | \alpha \rangle = \sum_n \langle \beta | n \rangle \langle n | \alpha \rangle = \sum_n \beta_n^* \alpha_n . \quad (6.18)$$

**Darstellungen:** Die Entwicklungskoeffizienten eines Vektors bezüglich eines vollständigen Basissystems nennt man eine Darstellung des Vektors. Faßt man die Entwicklungskoeffizienten für Kets als Spaltenvektor und für Bras als Zeilenvektor zusammen,

$$|\alpha\rangle \equiv \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \alpha_N \end{pmatrix}, \quad \langle\beta| \equiv (\beta_1^*, \dots, \beta_N^*), \quad (6.19)$$

so gelten für die Berechnung des Skalarproduktes (6.17) die üblichen Regeln der Matrizenmultiplikation.

## 6.3 Operatoren

Physikalische Größen, wie z.B. die Spinkomponente  $S_z$ , werden in der Quantenmechanik durch Operatoren dargestellt, die auf Zustandsvektoren wirken. Im folgenden werden nur lineare Operatoren betrachtet.

### 6.3.1 Lineare Operatoren

Eine Funktion  $A$  wird als linearer Operator bezeichnet, wenn sie jeden Vektor  $|\alpha\rangle$  eines Vektorraumes in einen Vektor  $|\gamma\rangle = A(|\alpha\rangle) \equiv A|\alpha\rangle$  desselben Raumes abbildet und wenn dabei

$$A(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = A|\alpha\rangle + A|\beta\rangle, \quad A(c|\alpha\rangle) = cA|\alpha\rangle \quad (6.20)$$

gilt.

### 6.3.2 Matrizendarstellung

Die Abbildung  $|\beta\rangle = A|\alpha\rangle$  kann bezüglich einer Orthonormalbasis  $\{|n\rangle\}$  in der Form

$$|\beta\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\beta\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|A|\alpha\rangle = \sum_{n,n'} |n\rangle \langle n|A|n'\rangle \langle n'|\alpha\rangle \quad (6.21)$$

geschrieben werden. Der Operator  $A$  besitzt hier die Entwicklung

$$A = \sum_{n,n'} |n\rangle \langle n|A|n'\rangle \langle n'|. \quad (6.22)$$

Die Entwicklungskoeffizienten

$$A_{nn'} = \langle n | A | n' \rangle \quad (6.23)$$

werden als Matrix von  $A$  bezüglich der Basis  $\{|n\rangle\}$  bezeichnet. Die Entwicklungskoeffizienten  $\beta_n$  von  $|\beta\rangle$  erhält man aus den Entwicklungskoeffizienten  $\alpha_n$  von  $|\alpha\rangle$  durch die Matrizenmultiplikation

$$\beta_n = \sum_{n'} A_{nn'} \alpha_{n'} . \quad (6.24)$$

### 6.3.3 Operatorprodukte

Sei  $|\beta\rangle = A|\alpha\rangle$  und  $|\gamma\rangle = B|\beta\rangle$  so gilt

$$|\gamma\rangle = B|\beta\rangle = BA|\alpha\rangle . \quad (6.25)$$

Der Operator  $BA$  wird als Operatorprodukt von  $B$  mit  $A$  bezeichnet. Operatorprodukte sind i.a. nicht kommutativ,

$$AB|\alpha\rangle \neq |\gamma\rangle . \quad (6.26)$$

Der Operator

$$[A, B] \equiv AB - BA \quad (6.27)$$

wird als Kommutator von  $A$  und  $B$  bezeichnet.

### 6.3.4 Adjungierter Operator

Einem Operator  $A$  des Vektorraumes ist im Dualraum ein Operator  $A^+$  zugeordnet, den man adjungierten Operator nennt. Gilt im Vektorraum  $|\beta\rangle = A|\alpha\rangle$ , so gilt im Dualraum

$$\langle \beta | = \langle \alpha | A^+ . \quad (6.28)$$

Ein Operator wirkt auf einen Bra immer von rechts, auf einen Ket von links. Der adjungierte Operator besitzt die Eigenschaften

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad & (aA + bB)^+ = a^* A^+ + b^* B^+ , \\ \text{(ii)} \quad & (AB)^+ = B^+ A^+ , \\ \text{(iii)} \quad & (A^+)^+ = A . \end{aligned} \quad (6.29)$$

Wegen  $\langle n | A^+ | m \rangle = \langle m | A | n \rangle^*$  gilt in Matrixschreibweise,

$$A_{nm}^+ = A_{mn}^* . \quad (6.30)$$

Die Matrix des adjungierten Operators  $A^+$  ist die konjugiert komplexe transponierte Matrix von  $A$ .

### 6.3.5 Hermitescher Operator

Der Ket  $A|\alpha\rangle$  und der Bra  $\langle\alpha|A$  sind i.a. nicht dual zueinander, da  $A^+ \neq A$ . Einen Operator nennt man hermitesch, falls

$$A^+ = A. \quad (6.31)$$

Die Diagonalelemente hermitescher Operatoren sind reell, da

$$A_{nm}^+ = A_{nm} = A_{mn}^*.$$

### 6.3.6 Äußeres Produkt

Die Bedeutung von Produkten von Bras und Kets ist von deren Reihenfolge abhängig. Das innere Produkt  $\langle\alpha|\cdot|\beta\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle$  ist das Skalarprodukt und stellt eine komplexe Zahl dar. Das äußere Produkt  $|\beta\rangle\cdot\langle\alpha| = |\beta\rangle\langle\alpha|$  stellt dagegen einen Operator dar:

$$\left(|\beta\rangle\langle\alpha|\right)\cdot|\gamma\rangle = |\beta\rangle\langle\alpha|\gamma\rangle.$$

Der dazu adjungierte Operator wird durch die dualen Bras und Kets gebildet,

$$\left(|\beta\rangle\langle\alpha|\right)^+ = |\alpha\rangle\langle\beta|.$$

Beweis:

$$\langle\alpha|\gamma\rangle^*\langle\beta| = \langle\gamma|\alpha\rangle\langle\beta| = \langle\gamma|\cdot\left(|\alpha\rangle\langle\beta|\right).$$

### 6.3.7 Projektoren

Der Operator

$$P_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha|, \quad \|\alpha\| = 1 \quad (6.32)$$

wird als Projektor bezeichnet. Angewandt auf einen Vektor  $|\beta\rangle$  liefert er die orthogonale Projektion auf  $|\alpha\rangle$ :

$$P_\alpha|\beta\rangle = |\alpha\rangle\langle\alpha|\beta\rangle.$$

Projektoren haben die Eigenschaft, daß

$$P_\alpha^2 = |\alpha\rangle\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha| = |\alpha\rangle\langle\alpha| = P_\alpha$$

gilt. Die Vollständigkeitsrelation (6.16) stellt eine Summe von Projektoren auf die Basiszustände dar.



### 6.3.8 Unitäre Operatoren

Einen Operator  $U$  nennt man unitär, falls

$$U^+U = I. \quad (6.33)$$

Unitäre Operatoren haben die wichtige Eigenschaft, daß Skalarprodukte bei unitären Transformationen invariant bleiben. Sei  $|\alpha'\rangle = U|\alpha\rangle$  und  $|\beta'\rangle = U|\beta\rangle$ , so gilt

$$\langle \alpha' | \beta' \rangle = \langle \alpha | U^+U | \beta \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle. \quad (6.34)$$

Die Transformation einer Orthonormalbasis  $\{|a_n\rangle\}$  in eine andere Orthonormalbasis  $\{|b_n\rangle\}$  ist unitär. Der Operator für diese Transformation ist

$$U = \sum_n |b_n\rangle\langle a_n|. \quad (6.35)$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad U|a_n\rangle &= \sum_{n'} |b_{n'}\rangle\langle a_{n'}|a_n\rangle = |b_n\rangle \\ \text{(ii)} \quad U^+U &= \sum_{n,n'} |a_n\rangle\langle b_n|b_{n'}\rangle\langle a_{n'}| = I. \end{aligned}$$

Die Darstellungen eines Vektors  $|\alpha\rangle$  und eines Operators  $A$  transformieren sich wie folgt:

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad \langle b_n | \alpha \rangle &= \sum_{n'} \langle b_n | a_{n'} \rangle \langle a_{n'} | \alpha \rangle = \sum_{n'} U_{nn'}^+ \langle a_{n'} | \alpha \rangle \\ \text{(ii)} \quad \langle b_n | A | b_m \rangle &= \sum_{n'm'} \langle b_n | a_{n'} \rangle \langle a_{n'} | A | a_{m'} \rangle \langle a_{m'} | b_m \rangle = \\ &= \sum_{n'm'} U_{nn'}^+ \langle a_{n'} | A | a_{m'} \rangle U_{m'm}. \end{aligned}$$

### 6.3.9 Eigenvektoren und Eigenwerte

Die Eigenvektoren  $\{|a\rangle\}$  und die Eigenwerte  $a$  eines Operators  $A$  werden durch die Lösungen von

$$A|a\rangle = a|a\rangle \quad (6.36)$$

definiert. Das zugeordnete duale Eigenwertproblem lautet

$$\langle a | A^+ = a^* \langle a|. \quad (6.37)$$

Eigenwertprobleme für hermitesche Operatoren sind in der Quantenmechanik von besonderer Bedeutung. Hier gilt: (i) Alle Eigenwerte sind reell und (ii) die Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten  $a \neq a'$  sind orthogonal.

Beweis:

$$0 = \langle a' | (A^+ - A) | a \rangle = (a'^* - a) \langle a' | a \rangle . \quad (6.38)$$

Für  $a' = a$  folgt hieraus  $a^* = a$ , d.h.  $a$  ist reell. Für  $a' \neq a$  folgt  $\langle a' | a \rangle = 0$ , d.h. die Eigenvektoren sind orthogonal.

Eigenwerte, zu denen mehrere Eigenvektoren existieren nennt man entartet. Die Eigenvektoren eines hermiteschen Operators können orthonormal gewählt werden und man erhält dann ein Orthonormalsystem  $\{|a, s\rangle\}$ . Der Index  $s$  nummeriert die Basisvektoren im Unterraum eines entarteten Eigenwerts. Bezüglich dieser Orthonormalbasis ist die Darstellung des Operators eine Diagonalmatrix,

$$\langle a, s | A | a', s \rangle = a' \langle a, s | a', s \rangle = a \delta_{aa'} \delta_{ss'} . \quad (6.39)$$

Der Operator besitzt die Entwicklung,

$$A = \sum_{asa's'} |a, s\rangle \langle a, s | A | a', s' \rangle \langle a', s' | = \sum_{as} a |a, s\rangle \langle a, s | . \quad (6.40)$$

# Kapitel 7

## Postulate der Quantenmechanik

### 7.1 Quantenzustand und Observablen

Die grundlegenden Annahmen der Quantenmechanik bestehen in den folgenden Postulaten:

- Der Quantenzustand eines physikalischen Systems wird durch einen Zustandsvektor  $|\alpha\rangle$  in einem komplexen Vektorraum definiert. Der Quantenzustand beschreibt das physikalische System vollständig.

$$\text{Zustand} \longleftrightarrow \text{Vektor } |\alpha\rangle. \quad (7.1)$$

- Eine physikalische Observable wird durch eine Meßvorschrift definiert und durch einen hermiteschen Operator im Zustandsraum dargestellt. Die Eigenvektoren von Observablen bilden vollständige Orthonormalsysteme des Zustandsraums.

$$\text{Meßgröße} \longleftrightarrow \text{Hermitescher Operator } A. \quad (7.2)$$

- Die möglichen Meßwerte einer Observablen sind die Eigenwerte des Operators. Die Eigenwerte sind reell, da Observablen durch hermitesche Operatoren dargestellt werden. Die Eigenwerte können diskret oder kontinuierlich sein. Falls nicht anders angegeben, werden im folgenden diskrete Eigenwerte angenommen.

$$\boxed{\text{Meßwerte} \longleftrightarrow \text{Eigenwerte } a \text{ von } A .} \quad (7.3)$$

- Sei  $a$  ein  $g$ -fach entarteter Eigenwert der Observablen  $A$  und  $\{|a, s\rangle\}$  eine Orthonormalbasis im Unterraum der entarteten Zustände. Die Wahrscheinlichkeit für den Meßwert  $a$  in einem Zustand  $|\alpha\rangle$  mit  $\|\alpha\| = 1$  ist

$$\boxed{p(a) = \sum_{s=1}^g |\langle a, s | \alpha \rangle|^2 .} \quad (7.4)$$

Man nennt  $p(a)$  Projektionswahrscheinlichkeit und  $\langle a, s | \alpha \rangle$  Projektionsamplitude. Es gilt

$$p(a) \geq 0 , \quad \sum_a p(a) = \langle \alpha | \alpha \rangle = 1$$

- Nach der Messung des Meßwerts  $a$  befindet sich das System in einem Zustand, den man durch die Projektion des Ausgangszustandes auf den Unterraum der Eigenzustände zum Eigenwert  $a$  und erneute Normierung auf 1 erhält:

$$\boxed{|\alpha\rangle = \sum_{a,s} |a, s\rangle \langle a, s | \alpha \rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{p(a)}} \sum_s |a, s\rangle \langle a, s | \alpha \rangle .} \quad (7.5)$$

**Erwartungswert:** Tritt bei  $N$  Messungen an Systemen im gleichen Quantenzustand  $|\alpha\rangle$  der Meßwert  $a$   $N_a$  mal auf, so erhält man für den Mittelwert der Messungen

$$\bar{A} = \sum_a \frac{N_a}{N} a = \sum_a p(a) a . \quad (7.6)$$

Der Erwartungswert einer Observable  $A$  wird definiert als

$$\langle A \rangle \equiv \langle \alpha | A | \alpha \rangle . \quad (7.7)$$

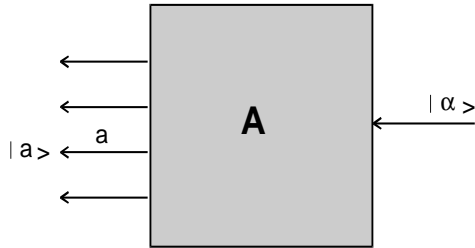


Abbildung 7.1: Messung einer Observablen  $A$  im Quantenzustand  $|\alpha\rangle$ . Nach der Messung des Eigenwerts  $a$  befindet sich das System in einem Eigenzustand zum Eigenwert  $a$ .

Der Erwartungswert  $\langle A \rangle$  ist gleich dem Mittelwert der Meßwerte  $\bar{A}$ :

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &\equiv \langle \alpha | A | \alpha \rangle = \sum_{a,s} \langle \alpha | A | a, s \rangle \langle a, s | \alpha \rangle = \\ &\sum_{a,s} a \langle \alpha | a, s \rangle \langle a, s | \alpha \rangle = \sum_{a,s} a |\langle a, s | \alpha \rangle|^2 = \sum_a a p(a) = \bar{A}. \end{aligned} \quad (7.8)$$

**Standardabweichung:** Abweichungen der Einzelmessungen vom Mittelwert nennt man Schwankungen oder Unschärfen. Ein Maß für die Schwankungen ist die Standardabweichung  $\Delta A$ , die als Wurzel des mittleren Schwankungsquadrats

$$\begin{aligned} \Delta A^2 &= \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2\langle A \rangle A + \langle A \rangle^2 \rangle = \\ &\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \end{aligned} \quad (7.9)$$

definiert ist.

## 7.2 Elektronenspin

Die Postulate werden nun auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen angewandt.

### 7.2.1 Spinobservablen

Die Observablen des Elektronenspins sind die Spinkomponenten  $S_x$ ,  $S_y$ ,  $S_z$ . Da jeweils nur zwei Meßwerte  $\pm\hbar/2$  gemessen werden, entsprechen den Spinkomponenten Operatoren in einem zweidimensionalen Vektorraum. Die zugehörigen Eigenwertgleichungen

$$S_i | \pm i \rangle = \pm \frac{\hbar}{2} | \pm i \rangle, \quad i = x, y, z \quad (7.10)$$

definieren jeweils eine Orthonormalbasis von Eigenvektoren  $\{|+i\rangle, |-i\rangle\}$ . Die Darstellung (6.40) der Operatoren bezüglich dieser Basis lautet,

$$S_i = \frac{\hbar}{2} (|+i\rangle\langle+i| - |-i\rangle\langle-i|) . \quad (7.11)$$

## 7.2.2 Basistransformationen

Verwendet man als Basissystem die Eigenvektoren  $\{|+z\rangle, |-z\rangle\}$ , so kann man jeden Eigenvektor  $|e\rangle$  aus  $\{|\pm x\rangle, |\pm y\rangle\}$  nach dieser z-Basis entwickeln,

$$|e\rangle = c_1|+z\rangle + c_2|-z\rangle . \quad (7.12)$$

Die Projektionswahrscheinlichkeit eines Eigenvektors einer Spinkomponente  $i$  auf einen Eigenvektor einer anderen dazu orthogonalen Spinkomponente  $j$  ist aus Symmetriegründen

$$|\langle \pm i | \pm j \rangle|^2 = |\langle \pm i | \mp j \rangle|^2 = \frac{1}{2} . \quad i \neq j \quad (7.13)$$

Fordert man daher  $|\langle \pm z | e \rangle|^2 = 1/2$ , so reduziert sich der Ansatz (7.12) auf

$$|e\rangle = \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2}} (|+z\rangle + e^{i\beta}|-z\rangle) , \quad (7.14)$$

wobei  $\alpha$  und  $\beta$  beliebige Phasen darstellen. Die absolute Phase eines Zustandsvektors ist keine beobachtbare Größe. Man kann die Zustandsvektoren  $|e\rangle$  daher so wählen, daß  $\alpha = 0$ . Die Phase von  $|-z\rangle$  kann so gewählt werden, daß für den Vektor  $|e\rangle = |+x\rangle$  auch  $\beta = 0$  gilt. Für den dazu orthogonalen Vektor  $|-x\rangle$  ist dann  $e^{i\beta} = -1$ . Die Transformation der Basisvektoren  $|\pm x\rangle$  lautet damit

$$|\pm x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+z\rangle \pm |-z\rangle) . \quad (7.15)$$

Die Basisvektoren  $|\pm y\rangle$  besitzen ebenfalls die Form (7.14). Die Phase  $\beta$  muß dabei aber so gewählt werden, daß auch die Bedingung  $|\langle \pm x | \pm y \rangle|^2 = 1/2$  erfüllt wird. Dies Forderung ergibt das Transformationsgesetz

$$|\pm y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+z\rangle \pm i|-z\rangle) . \quad (7.16)$$

Die Eigenvektoren von  $S_x$ ,  $S_y$  und  $S_z$  entsprechen somit vollständig den Polarisationsvektoren aus Abschnitt 6.1.4:

$$\mathbf{e}_{x,y} \longleftrightarrow |\pm z\rangle, \quad \mathbf{e}_{x',y'} \longleftrightarrow |\pm x\rangle, \quad \mathbf{e}_{R,L} \longleftrightarrow |\pm y\rangle . \quad (7.17)$$

### 7.2.3 Matrizendarstellung

#### Matrizen für die Basistransformationen:

Die unitäre Transformation von der  $z$ - in die  $x$ -Basis besitzt die Matrixdarstellung

$$U(z \rightarrow x) = \begin{pmatrix} \langle +z | +x \rangle & \langle +z | -x \rangle \\ \langle -z | +x \rangle & \langle -z | -x \rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7.18)$$

Die unitäre Transformation von der  $z$ - in die  $y$ -Basis besitzt die Matrixdarstellung

$$U(z \rightarrow y) = \begin{pmatrix} \langle +z | +y \rangle & \langle +z | -y \rangle \\ \langle -z | +y \rangle & \langle -z | -y \rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix}. \quad (7.19)$$

#### Spinmatrizen für die $x, y, z$ -Richtungen:

In der  $z$ -Darstellung ergeben sich für die Spinoperatoren die Matrizen,

$$\begin{aligned} S_z &= \begin{pmatrix} \langle +z | S_z | +z \rangle & \langle +z | S_z | -z \rangle \\ \langle -z | S_z | +z \rangle & \langle -z | S_z | -z \rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \\ S_x &= \begin{pmatrix} \langle +z | S_x | +z \rangle & \langle +z | S_x | -z \rangle \\ \langle -z | S_x | +z \rangle & \langle -z | S_x | -z \rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} . \\ S_y &= \begin{pmatrix} \langle +z | S_y | +z \rangle & \langle +z | S_y | -z \rangle \\ \langle -z | S_y | +z \rangle & \langle -z | S_y | -z \rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (7.20)$$

#### Spinmatrix für beliebige Richtungen:

Die Observable für eine Spinmessung in einer beliebigen Raumrichtung ist der Operator

$$S_n = \mathbf{S} \cdot \mathbf{n} = S_x \sin \Theta \cos \varphi + S_y \sin \Theta \sin \varphi + S_z \cos \Theta . \quad (7.21)$$

wobei der Einheitsvektor  $\mathbf{n}$  in Kugelkoordinaten (Abb. 7.2) durch

$$\mathbf{n} = (\sin \Theta \cos \varphi, \sin \Theta \sin \varphi, \cos \Theta)$$

gegeben ist.

In der  $z$ -Darstellung erhält man für  $S_n$  die Matrix,

$$S_n = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \Theta & \sin \Theta e^{-i\varphi} \\ \sin \Theta e^{i\varphi} & -\cos \Theta \end{pmatrix} \quad (7.22)$$

Die Eigenwertgleichung

$$S_n |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle \quad (7.23)$$

ergibt die Eigenzustände

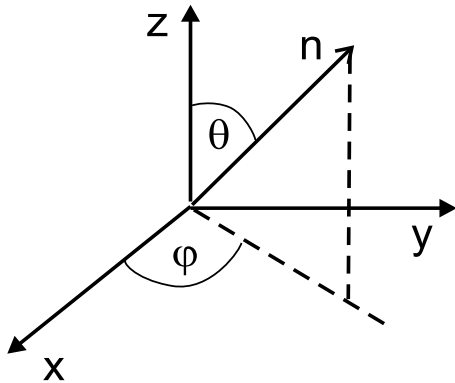


Abbildung 7.2: Einheitsvektor für beliebige Spinrichtungen.

$$|+n\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+z\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\frac{\varphi}{2}} |-z\rangle \quad (7.24)$$

$$|-n\rangle = -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+z\rangle + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\frac{\varphi}{2}} |-z\rangle$$

zu den Eigenwerten  $\lambda = \pm\hbar/2$ .

**Kommutator:**

$$[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k \quad (7.25)$$

Beispiel:

$$\begin{aligned} S_x S_y &= \frac{\hbar}{2} (|+z\rangle\langle -z| + |-z\rangle\langle +z|) \cdot i\frac{\hbar}{2} (|-z\rangle\langle +z| - |+z\rangle\langle -z|) \\ &= i\frac{\hbar^2}{4} (|+z\rangle\langle +z| - |-z\rangle\langle -z|) = i\frac{\hbar}{2} S_z \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S_y S_x &= i\frac{\hbar}{2} (|-z\rangle\langle +z| - |+z\rangle\langle -z|) \cdot \frac{\hbar}{2} (|+z\rangle\langle -z| + |-z\rangle\langle +z|) \\ &= i\frac{\hbar^2}{4} (|-z\rangle\langle -z| - |+z\rangle\langle +z|) = -i\frac{\hbar}{2} S_z \end{aligned}$$

$$\Rightarrow [S_x, S_y] = i\hbar S_z .$$



## 7.3 Interferenz

### 7.3.1 Projektionswahrscheinlichkeit bei zwei Alternativen

Bei der Berechnung von Projektionswahrscheinlichkeiten können Projektionsamplituden miteinander interferieren. Dies kann an den in Abb. 7.3 gezeigten drei Beispielen deutlich gemacht werden.

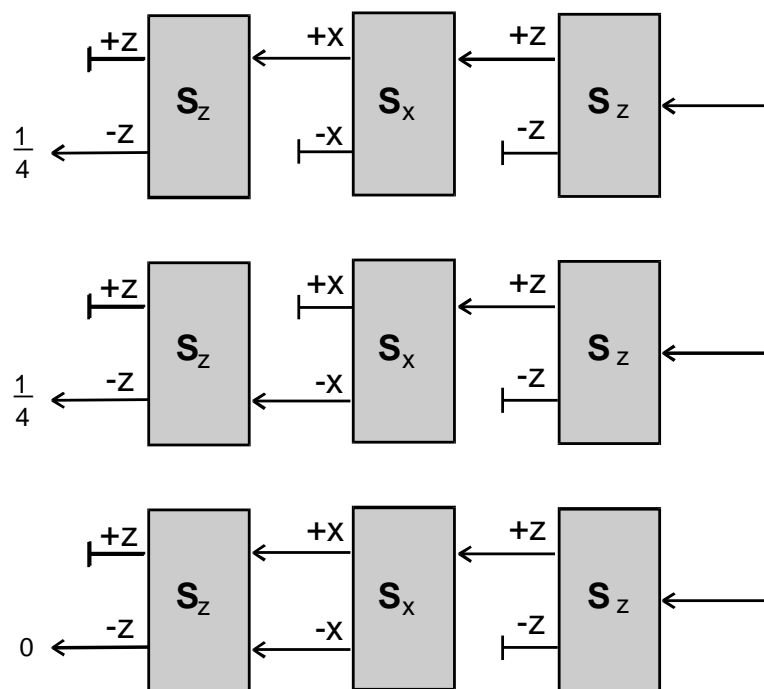


Abbildung 7.3: Elektronenspins im Zustand  $| +z \rangle$  werden im Zustand  $| -z \rangle$  nachgewiesen, nachdem sie einen  $(+x)$ -Projektor (oben), einen  $(-x)$ -Projektor (Mitte), bzw. einen  $x$ -Analysator ohne Auswirkung auf den Strahl (unten) passiert haben. Die Projektionswahrscheinlichkeit hängt davon ab, ob eine Messung von  $S_x$  tatsächlich stattgefunden hat.

**Beispiel 1:** Ein Strahl von Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen im Zustand  $| +z \rangle$  passiert zunächst einen Projektor auf den Zustand  $| +x \rangle$  und danach einen Projektor auf den Zu-

stand  $| -z \rangle$ . Die Projektionsamplitude  $M_1$  und die zugehörige Projektionswahrscheinlichkeit  $p_1$  für diesen Weg sind jeweils,

$$M_1 = \langle -z | +x \rangle \langle +x | +z \rangle = \frac{1}{2}, \quad p_1 = |M_1|^2 = \frac{1}{4}. \quad (7.26)$$

**Beispiel 2:** Ein Strahl von Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen im Zustand  $| +z \rangle$  passiert zunächst einen Projektor auf den Zustand  $| -x \rangle$  und danach einen Projektor auf den Zustand  $| -z \rangle$ . Die Projektionsamplitude  $M_2$  und die zugehörige Projektionswahrscheinlichkeit  $p_2$  für diesen Weg sind jeweils,

$$M_2 = \langle -z | -x \rangle \langle -x | +z \rangle = -\frac{1}{2}, \quad p_2 = |M_2|^2 = \frac{1}{4}. \quad (7.27)$$

**Beispiel 3:** Läßt man beide Wege aus 1 und 2 offen, d.h. es findet keine Auswahl der Atome in x-Richtung statt, dann erhält man

$$\begin{aligned} M_3 &= M_1 + M_2 \\ &= \langle -z | +x \rangle \langle +x | +z \rangle + \langle -z | -x \rangle \langle -x | +z \rangle \\ &= \langle -z | +z \rangle = 0 \\ p_3 &= |M_1 + M_2|^2 = |M_1|^2 + |M_2|^2 + M_1 M_2^* + M_1^* M_2 \\ &= \frac{1}{4} + \frac{1}{4} - \frac{1}{4} - \frac{1}{4} = 0. \end{aligned} \quad (7.28)$$

Das Ergebnis in Beispiel 3 erscheint paradox, wenn man annimmt, daß die Atome auch ohne Messung von  $S_x$  entweder eine Spinkomponente  $S_x = +\hbar/2$  oder  $S_x = -\hbar/2$  besitzen müssen. Man würde dann erwarten, daß sich die Wahrscheinlichkeiten aus Beispiel 1 und 2 im Beispiel 3 addieren. Stattdessen ist die Projektionswahrscheinlichkeit in Beispiel 3 Null. Quantenmechanisch betrachtet ist dieses Ergebnis einfach verständlich, da die Darstellung des  $| +z \rangle$  Zustandes in der  $| \pm x \rangle$  Basis den Zustand nicht ändert und die Projektion auf den orthogonalen Zustand  $| -z \rangle$  daher Null ergibt. Bei der Berechnung der Projektionswahrscheinlichkeit ist offensichtlich die feste Phasenbeziehung der beiden Amplituden  $M_1$  und  $M_2$  wesentlich. In Analogie zur Optik spricht man von Interferenz. Die "klassische" Denkweise der Addition von Wahrscheinlichkeiten, die nicht tatsächlich durch eine Messung bestimmt wurden, ist in der Quantenmechanik nicht zulässig.

### 7.3.2 Regeln für Projektionswahrscheinlichkeiten

Gibt es vom Anfangszustand  $| a \rangle$  zum Endzustand  $| e \rangle$  mehrere Wege über verschiedene Zwischenzustände  $| n \rangle$ , so gelten für die Berechnung der Projektionswahrscheinlichkeit die Regeln:

- (i) Die Projektionsamplitude entlang eines Weges ist gleich dem Produkt der Amplituden für die einzelnen Schritte des Weges:

$$M_n = \langle e | n \rangle \langle n | a \rangle .$$

- (ii) Die gesamte Projektionsamplitude für mehrere alternative Wege ist gleich der Summe der Amplituden der einzelnen Wege:

$$M = \sum_n M_n .$$

- (iii) Die Projektionswahrscheinlichkeit ist gleich dem Betragsquadrat der gesamten Projektionsamplitude:

$$p(a \rightarrow e) = |M|^2 .$$

## 7.4 Kompatible Observablen

Zwei Observablen  $A$  und  $B$  nennt man kompatibel, falls

$$[A, B] = AB - BA = 0 . \quad (7.29)$$

### 7.4.1 Eigenzustände

Für kompatible Observablen existiert ein gemeinsames Orthonormalsystem von Eigenzuständen  $\{|a, b\rangle\}$ :

$$A|a, b\rangle = a|a, b\rangle , \quad B|a, b\rangle = b|a, b\rangle .$$

Beweis: Sei  $\{|a\rangle\}$  eine Orthonormalbasis von Eigenzuständen der Observablen  $A$ :

$$A|a\rangle = a|a\rangle .$$

Wegen  $[A, B] = 0$  gilt

$$A(B|a\rangle) = AB|a\rangle = BA|a\rangle = a(B|a\rangle) .$$

Der Vektor  $B|a\rangle$  ist daher ein Eigenzustand der Observablen  $A$  zum Eigenwert  $a$ . Falls  $a$  nicht entartet ist, gibt es nur einen Eigenzustand, der dann gleichzeitig Eigenzustand zu  $B$  ist

$$B|a, b\rangle = b|a, b\rangle .$$

Falls  $a$   $g$ -fach entartet ist, gibt es eine Orthonormalbasis  $\{|a, b\rangle\}$  von Eigenzuständen zum Operator  $B$  im Unterraum der entarteten Zustände, so daß

$$B|a, b\rangle = b|a, b\rangle ; \quad b = b_1, \dots, b_g .$$

## 7.4.2 Gleichzeitige Meßbarkeit

Da für kompatible Observablen ein gemeinsames Basissystem existiert, können die zugehörigen physikalischen Größen gleichzeitig bestimmte Werte annehmen. Im Eigenzustand  $|a, b\rangle$  wird mit Sicherheit für  $A$  der Wert  $a$  und für  $B$  der Wert  $b$  gemessen.

## 7.4.3 Vollständiger Satz kompatibler Observablen

Der Zustand eines physikalischen Systems kann durch die Messung eines vollständigen Satz kompatibler Observablen  $A, B, C, \dots$  eindeutig festgelegt werden. Werden bei diesen Messungen die Werte  $a, b, c, \dots$  gemessen, so befindet sich das System im Zustand  $|a, b, c, \dots\rangle$ . Ist der Satz der Observablen vollständig, so ist dieser Zustand eindeutig bestimmt. Andernfalls gäbe es eine weitere Observable, durch deren Messung der Zustand weiter unterschieden werden kann.

## 7.5 Inkompatible Observablen

Zwei Observablen  $A$  und  $B$  nennt man inkompatibel, falls

$$[A, B] \neq 0. \quad (7.30)$$

### 7.5.1 Unschärferelation

In einem Quantenzustand  $|\gamma\rangle$  gilt für die Standardabweichungen zweier hermitescher Operatoren  $A, B$  die Unschärferelation

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| \quad (7.31)$$

**Folgerung:** In einem Zustand, in dem der Erwartungswert des Kommutators nicht verschwindet, können  $A$  und  $B$  nicht gleichzeitig bestimmte Werte annehmen.

**Beweis der Unschärferelation:**

- (i) Der Erwartungswert eines hermiteschen Operators,  $A^+ = A$ , ist reell:

$$\langle A^+ \rangle = \langle \alpha | A^+ | \alpha \rangle = \langle \alpha | A | \alpha \rangle^* = \langle \alpha | A | \alpha \rangle.$$

- (ii) Der Erwartungswert eines antihermiteschen Operators,  $C^+ = -C$ , ist imaginär:

$$\langle C^+ \rangle = \langle \alpha | C^+ | \alpha \rangle = \langle \alpha | C | \alpha \rangle^* = -\langle \alpha | C | \alpha \rangle.$$

- (iii) Jeder Operator  $O$  kann in einen hermiteschen Anteil  $O_h$  und antihermiteschen Anteil  $O_a$  zerlegt werden:

$$O = O_h + O_a, \quad O_h = \frac{1}{2}(O + O^+), \quad O_a = \frac{1}{2}(O - O^+)$$

- (iv) Sei  $\hat{A} = A - \langle A \rangle$ ,  $\hat{B} = B - \langle B \rangle$ ,  $|\alpha\rangle = \hat{A}|\gamma\rangle$ ,  $|\beta\rangle = \hat{B}|\gamma\rangle$ . Die Ungleichung (6.12) von Schwarz-Bunyakowski lautet für die Vektoren  $|\alpha\rangle$  und  $|\beta\rangle$ :

$$\|\alpha\|^2\|\beta\|^2 \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \iff \Delta A^2 \Delta B^2 \geq |\langle \hat{A} \hat{B} \rangle|^2.$$

Der adjungierte Operator zu  $\hat{A}\hat{B}$  ist  $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+ = \hat{B}\hat{A}$ . Zerlegt man  $\hat{A}\hat{B}$  in den hermiteschen und antihermiteschen Anteil so folgt,

$$\Delta A^2 \Delta B^2 \geq \left| \frac{1}{2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle + \frac{1}{2} \langle \{\hat{A}, \hat{B}\} \rangle \right|^2$$

wobei  $\{A, B\} = AB + BA$  den Antikommutator bezeichnet. Da der Erwartungswert des Kommutators imaginär, der des Antikommutators reell ist, gilt

$$\Delta A^2 \Delta B^2 \geq \left| \frac{1}{2} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|^2 + \left| \frac{1}{2} \langle \{\hat{A}, \hat{B}\} \rangle \right|^2 \geq \left| \frac{1}{2} \langle [A, B] \rangle \right|^2.$$

**Beispiel:** Die Vertauschungsrelationen für den Orts- und den Impulsoperator lauten  $[X, P] = i\hbar I$  (Abschnitt 7.6.4). Damit erhält man für die Orts- und Impulsunschärfen die Heisenbergsche Unschärferelation

$$\Delta X \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (7.32)$$

Der Ort und der Impuls eines Teilchens können nicht gleichzeitig bestimmte Werte annehmen. Diese Aussage gilt für eine große Zahl von Messungen von  $X$  und  $P$  an einem Ensemble von Systemen, die sich alle im gleichen Quantenzustand befinden.

## 7.6 Ort und Impuls

### 7.6.1 Ortsoperator

Die quantenmechanische Observable für die Ortskoordinaten eines Teilchens ist der Ortsoperator  $\mathbf{X}$ . Wie der Spin ist dies ein Vektor, dessen Komponenten Operatoren darstellen:

$$\mathbf{X} = X\mathbf{e}_x + Y\mathbf{e}_y + Z\mathbf{e}_z = \sum_{i=1}^3 X_i \mathbf{e}_i. \quad (7.33)$$

Die Eigenwertgleichungen für die Komponenten des Ortsoperators sind

$$X|x\rangle = x|x\rangle, \quad Y|y\rangle = y|y\rangle, \quad Z|z\rangle = z|z\rangle. \quad (7.34)$$

Die Eigenwerte  $x, y, z$  stellen die gemessenen Koordinaten des Teilchens dar. Diese sind gleichzeitig bestimmbar. Daher vertauschen die Komponenten des Ortsoperators miteinander,

$$[X_i, X_j] = 0,$$

und es kann ein gemeinsames System von Eigenvektoren  $\{|x, y, z\rangle = |\mathbf{x}\rangle\}$  gewählt werden. Die Eigenwertgleichung kann daher auch vektoriell

$$\mathbf{X}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle \quad (7.35)$$

angegeben werden.

## 7.6.2 Ortsdarstellung

Im Gegensatz zu den bisher betrachteten diskreten Eigenwerten sind die Eigenwerte des Ortsoperators kontinuierlich. Man muß daher bei der Summation über die Eigenvektoren zu einer Integration übergehen. Die Vollständigkeitsrelation für die Ortseigenzustände lautet,

$$\int d^3x |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = \mathbf{I}, \quad (7.36)$$

wobei die Integration über den gesamten Raum zu erstrecken ist.

Die Entwicklung eines Zustands  $|\alpha\rangle$  nach dieser Basis ergibt,

$$|\alpha\rangle = \int d^3x |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|\alpha\rangle \quad (7.37)$$

Die Ortsdarstellung des Zustands wird als Wellenfunktion

$$\alpha(\mathbf{x}) \equiv \langle \mathbf{x}|\alpha\rangle \quad (7.38)$$

bezeichnet.

Das Betragsquadrat der Wellenfunktion bestimmt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens in einem Volumenelement  $d^3x$  am Ort  $\mathbf{x}$ ,

$$|\langle \mathbf{x}|\alpha\rangle|^2 d^3x = |\alpha(\mathbf{x})|^2 d^3x. \quad (7.39)$$

Die Orthonormalität der kontinuierlichen Basisvektoren wird durch die Dirac-Deltafunktion dargestellt:

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (7.40)$$

Damit erhält man in der Entwicklung (7.37) gerade den Koeffizienten von  $|\mathbf{x}'\rangle$  wenn man von links mit  $\langle \mathbf{x}'|$  multipliziert.

Das Skalarprodukt läßt sich in der Ortsdarstellung als Integral

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \int d^3x \langle \alpha | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \beta \rangle = \int d^3x \alpha^*(\mathbf{x})\beta(\mathbf{x}) \quad (7.41)$$

berechnen.

Der Ortsoperator kann in der Ortsdarstellung durch eine gewöhnliche Multiplikation ersetzt werden:

$$|\beta\rangle = \mathbf{X}|\alpha\rangle \rightarrow \langle \mathbf{x} | \beta \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{X} | \alpha \rangle = \mathbf{x} \langle \mathbf{x} | \alpha \rangle \quad (7.42)$$

### 7.6.3 Impulsoperator

**Infinitesimale Translationen:**

$$|\mathbf{x} + d\mathbf{x}\rangle = T(d\mathbf{x})|\mathbf{x}\rangle \quad (7.43)$$

Der Operator  $T(d\mathbf{x})$  besitzt die Eigenschaften

(i)

$$T^+(d\mathbf{x})T(d\mathbf{x}) = I$$

$T(d\mathbf{x})$  ist unitär, d.h. bei der Translation bleibt die Norm des Zustandsvektors erhalten:  $\langle \mathbf{x} + d\mathbf{x} | \mathbf{x} + d\mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{x} | T^+(d\mathbf{x})T(d\mathbf{x}) | \mathbf{x} \rangle = 1$ .

(ii)

$$T(d\mathbf{x}'' + d\mathbf{x}') = T(d\mathbf{x}'')T(d\mathbf{x}')$$

Die Hintereinanderausführung von zwei Translationen um  $d\mathbf{x}'$  und  $d\mathbf{x}''$  ergibt eine Translation um  $d\mathbf{x}'' + d\mathbf{x}'$ .

(iii)

$$T(-d\mathbf{x}) = T(d\mathbf{x})^{-1}$$

Eine Translation um  $d\mathbf{x}$  ist umkehrbar, indem man eine Translation um  $-d\mathbf{x}$  ausführt.

(iv)

$$T(0) = I$$

Eine Translation um den Nullvektor ergibt die identische Abbildung.

Die Eigenschaften (i)-(iv) werden erfüllt durch

$$T(d\mathbf{x}) = I - i\mathbf{K}\cdot d\mathbf{x}, \quad \mathbf{K}^+ = \mathbf{K}. \quad (7.44)$$

Der hermitesche Operator  $\mathbf{K}$  ist eine Observable mit der Dimension eines Wellenvektors. Nach de Broglie kann ein Teilchen mit dem Impuls  $\mathbf{p}$  quantenmechanisch

durch eine Welle mit dem Wellenvektor  $\mathbf{k}$  beschrieben werden, wobei  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  gilt. In Analogie zu dieser Beziehung kann der Impulsoperator durch

$$\mathbf{P} = \hbar\mathbf{K} \quad (7.45)$$

definiert werden. Der Impulsoperator ist damit der Erzeuger einer infinitesimalen Translation.

#### 7.6.4 Vertauschungsrelationen

Die algebraischen Eigenschaften der Operatoren  $\mathbf{X}$  und  $\mathbf{P}$  werden durch die Vertauschungsrelationen

$$[X_i, X_j] = 0, \quad [P_i, P_j] = 0, \quad [X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (7.46)$$

definiert. Man kann die Gültigkeit dieser Vertauschungsrelationen als Postulat fordern. Alternativ kann man den Impulsoperator durch (7.45) definieren. Dann ergeben sich die Vertauschungsrelationen mit dem Ortsoperator auf folgende Weise:

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad & \mathbf{X}T(d\mathbf{x})|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{X}|\mathbf{x} + d\mathbf{x}\rangle = (\mathbf{x} + d\mathbf{x})|\mathbf{x} + d\mathbf{x}\rangle \\ \text{(ii)} \quad & T(d\mathbf{x})\mathbf{X}|\mathbf{x}\rangle = T(d\mathbf{x})\mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x} + d\mathbf{x}\rangle \\ \Rightarrow \quad & [\mathbf{X}, T(d\mathbf{x})]|\mathbf{x}\rangle = d\mathbf{x}|\mathbf{x} + d\mathbf{x}\rangle \approx d\mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle. \end{aligned}$$

Da  $|\mathbf{x}\rangle$  beliebig ist, erhält man mit (7.44), (7.45)

$$\mathbf{X} \left( -\frac{i}{\hbar} \right) \mathbf{P} \cdot d\mathbf{x} + \left( \frac{i}{\hbar} \right) \mathbf{P} \cdot d\mathbf{x} \mathbf{X} = d\mathbf{x}. \quad (7.47)$$

Wählt man  $d\mathbf{x} = dx_j \mathbf{e}_j$  und  $\mathbf{X} = X_i \mathbf{e}_i$ , so ergibt sich daraus die Vertauschungsrelation in (7.46).

#### 7.6.5 Ortsdarstellung des Impulsoperators

Die Ortsdarstellung von

$$T^+(d\mathbf{x})|\alpha\rangle = \left( \mathbf{I} + \frac{i}{\hbar} d\mathbf{x} \cdot \mathbf{P} \right) |\alpha\rangle \quad (7.48)$$

ergibt sich aus der Definition (7.43) des Translationsoperators und der Definition (6.28) des adjungierten Operators zu

$$\langle \mathbf{x} | T^+(d\mathbf{x}) | \alpha \rangle = \langle \mathbf{x} + d\mathbf{x} | \alpha \rangle \approx \langle \mathbf{x} | \alpha \rangle + d\mathbf{x} \cdot \nabla \langle \mathbf{x} | \alpha \rangle \quad (7.49)$$

Durch Vergleich von (7.48) und (7.49) folgt für den Impulsoperator die Ortsdarstellung

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{P} | \alpha \rangle = -i\hbar \nabla \langle \mathbf{x} | \alpha \rangle. \quad (7.50)$$



## 7.6.6 Impulsdarstellung

**Impulseigenzustände:** Ein Teilchen mit festem Impuls  $\mathbf{p}$  befindet sich in einem Eigenzustand des Impulsoperators

$$\mathbf{P}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle . \quad (7.51)$$

Die Impulseigenzustände bilden, wie die Ortseigenzustände, ein vollständiges Orthonormalsystem:

$$\int d^3p |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| = \mathbf{I} , \quad \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') . \quad (7.52)$$

Die Impulsdarstellung eines Zustandes  $|\alpha\rangle$ ,

$$\hat{\alpha}(\mathbf{p}) \equiv \langle \mathbf{p} | \alpha \rangle \quad (7.53)$$

nennt man entsprechend die Wellenfunktion im Impulsraum. Die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen mit Impuls  $\mathbf{p}$  im Volumenelement  $d^3p$  zu finden ist

$$|\hat{\alpha}(\mathbf{p})|^2 d^3p . \quad (7.54)$$

**Ortsdarstellung der Impulseigenzustände:** Die Ortsdarstellung der Eigenwertgleichung (7.51) ist

$$-i\hbar \nabla \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \mathbf{p} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle . \quad (7.55)$$

Die Lösungen sind ebene Wellen mit dem Wellenvektor  $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ ,

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = A e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} , \quad (7.56)$$

deren Amplitude  $A$  der Normierungsbedingung

$$\delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') = \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle = \int d^3x \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}' \rangle \quad (7.57)$$

genügen muß. Mit der Darstellung

$$\delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3x e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}} \quad (7.58)$$

der Delta-Funktion findet man daraus

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \left( \frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \quad (7.59)$$

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle = \left( \frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} .$$

**Transformation zwischen Orts- und Impulsdarstellung:** Die ebenen Wellen (7.59) beschreiben die unitäre Transformation von der Orts- in die Impulsdarstellung und umgekehrt:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x} | \alpha \rangle &= \int d^3p \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \alpha \rangle \\ \langle \mathbf{p} | \alpha \rangle &= \int d^3x \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \alpha \rangle\end{aligned}\tag{7.60}$$

Diese Transformation entspricht einer Fouriertransformation. Diese erhält man in der üblichen Form, wenn man den Impuls  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$  durch den Wellenvektor  $\mathbf{k}$  substituiert.

# Kapitel 8

## Zeitentwicklung von Quantensystemen

### 8.1 Zeitabhängige Zustandsvektoren

#### 8.1.1 Spinpräzession im Magnetfeld

Auf ein klassisches magnetisches Moment  $\boldsymbol{\mu}$  wirkt in einem konstanten Magnetfeld  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$  ein Drehmoment  $\mathbf{T} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}$ . Nimmt man an, daß das magnetische Moment proportional ist zum Drehimpuls,  $\boldsymbol{\mu} = \gamma\mathbf{L}$ , so gilt die klassische Bewegungsgleichung,

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{T} = \gamma\mathbf{L} \times \mathbf{B} \quad (8.1)$$

Die z-Komponente des Drehimpulses ist zeitunabhängig. Dem entspricht die Erhaltung der Energie

$$E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\gamma BL_z. \quad (8.2)$$

Die Komponente senkrecht zum Magnetfeld dreht sich auf einer Kreisbahn in der  $xy$ -Ebene. Der gesamte Drehimpulsvektor beschreibt eine Bewegung auf einer Kegelfläche um die Magnetfeldrichtung, die als Präzession bezeichnet wird.

In Analogie zum klassischen Fall wollen wir nun die Präzession eines Elektronenspins untersuchen, der quantenmechanisch durch einen Spinzustand

$$|\alpha\rangle = c_1|+z\rangle + c_2|-z\rangle \quad (8.3)$$

beschrieben wird. Dem klassischen Drehimpuls entspricht der Erwartungswert des Spinoperators. Die Berechnung der Erwartungswerte von  $S_x$ ,  $S_y$  und  $S_z$  in der z-

Darstellung ergibt,

$$\begin{aligned}
\frac{2}{\hbar} \langle S_x \rangle &= \langle \alpha | +z \rangle \langle -z | \alpha \rangle + \langle \alpha | -z \rangle \langle +z | \alpha \rangle = c_1^* c_2 + c_2^* c_1 = 2\Re(c_1 c_2^*), \\
\frac{2}{\hbar} \langle S_y \rangle &= -i \langle \alpha | +z \rangle \langle -z | \alpha \rangle + i \langle \alpha | -z \rangle \langle +z | \alpha \rangle = -i c_1^* c_2 + i c_2^* c_1 = -2\Im(c_1 c_2^*), \\
\frac{2}{\hbar} \langle S_z \rangle &= \langle \alpha | +z \rangle \langle +z | \alpha \rangle - \langle \alpha | -z \rangle \langle -z | \alpha \rangle = |c_1|^2 - |c_2|^2.
\end{aligned} \tag{8.4}$$

Wir fordern nun, daß die quantenmechanischen Erwartungswerte die klassische Präzessionsbewegung ausführen und nehmen zur Vereinfachung an, daß diese in der  $xy$ -Ebene liegt,

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos(\omega t), \quad \langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(\omega t), \quad \langle S_z \rangle = 0. \tag{8.5}$$

Gemäß der klassischen Bewegungsgleichung (8.1) wird die Präzessionsfrequenz durch

$$\omega = -\gamma B \tag{8.6}$$

definiert. Setzt man

$$c_{1,2} = r_{1,2} \exp(-i\varphi_{1,2}), \tag{8.7}$$

so ergibt der Vergleich von (8.4) mit (8.5),

$$2r_1 r_2 \exp(-i[\varphi_1 - \varphi_2]) = \exp(-i\omega t), \quad r_1^2 - r_2^2 = 0. \tag{8.8}$$

Daraus folgt,

$$r_1 = r_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \varphi_1 - \varphi_2 = \omega t. \tag{8.9}$$

Bis auf eine unbestimmte absolute Phase können wir die Zeitentwicklung des Spinzustandes nun in der Form,

$$|\alpha(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ | +z \rangle \exp(-i\frac{\omega}{2}t) + | -z \rangle \exp(+i\frac{\omega}{2}t) \right] \tag{8.10}$$

zusammenfassen. Die klassische Präzessionsbewegung des Spinerwartungswertes ist also völlig äquivalent zu einer Superposition von den beiden Spinzuständen  $| \pm z \rangle$  mit zeitabhängigen Phasen.

## 8.1.2 Stationäre Zustände

Wir wollen nun die allgemeine Bedeutung dieses Beispiels für die Zeitentwicklung von konservativen Systemen hervorheben. Ein System ist konservativ, wenn seine Energie eine Erhaltungsgröße ist. Quantenmechanisch wird die Energie durch einen Energieoperator, den Hamiltonoperator  $H$  dargestellt, der im konservativen

Fall zeitunabhängig ist. Für das Spinsystem ist der Hamiltonoperator durch den Spinoperator definiert,

$$H = -\gamma \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}, \quad \gamma = \frac{e}{mc}. \quad (8.11)$$

Die Zeitunabhängigkeit von  $H$  ergibt sich hier aus der Annahme der Zeitunabhängigkeit des äußeren Magnetfeldes. Nimmt man an, daß das Magnetfeld in  $z$ -Richtung orientiert ist, so folgt in der  $z$ -Darstellung die Diagonalmatrix,

$$H = \omega S_z = \begin{pmatrix} \frac{\hbar\omega}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar\omega}{2} \end{pmatrix}. \quad (8.12)$$

Die Quantenzustände  $|n\rangle$  zu den möglichen Energiewerten  $E_n$  des Systems werden allgemein durch die Eigenwertgleichung

$$\boxed{H|n\rangle = E_n|n\rangle} \quad (8.13)$$

definiert. Sie wird als *zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung* bezeichnet. Mit einem geeigneten Hamiltonoperator bestimmt sie z.B. die Energieniveaus eines Wasserstoffatoms. Im vorliegenden Fall besitzt das Eigenwertproblem die einfache Lösung

$$\begin{aligned} |1\rangle &= | +z \rangle, & E_1 &= \frac{\hbar\omega}{2}, \\ |2\rangle &= | -z \rangle, & E_2 &= -\frac{\hbar\omega}{2}. \end{aligned} \quad (8.14)$$

Die Energieeigenzustände sind hier gerade die Spinzustände in Richtung des Magnetfeldes. Befindet sich ein System im Eigenzustand  $|n\rangle$  zum Energieeigenwert  $E_n$ , so muß es sich auch zu einem späteren Zeitpunkt noch in diesem Zustand befinden: Wegen der Erhaltung der Energie ergibt eine spätere Messung mit Sicherheit wieder den Energieeigenwert  $E_n$ . Der Zustand zur Zeit  $t$  kann sich vom Anfangszustand also nur durch einen Phasenfaktor unterscheiden. Der Vergleich mit dem Spinzustand (8.10) zeigt, daß die Phase durch den Energieeigenwert bestimmt wird. Allgemein schreiben wir die Zeitentwicklung der Energieeigenzustände eines konservativen Systems daher in der Form,

$$\boxed{|E_n\rangle = |n\rangle \exp(-i\frac{E_n}{\hbar}t)}. \quad (8.15)$$

Die Eigenzustände von  $H$  werden auch als stationäre Zustände bezeichnet. In einem stationären Zustand sind alle Erwartungswerte von Observablen zeitunabhängig. Daher können sich die physikalischen Eigenschaften des Systems zeitlich nicht ändern.

### 8.1.3 Superpositionsprinzip quantenmechanischer Zustände

Die Zeitentwicklung eines beliebigen Quantenzustandes in einem konservativen System ergibt sich aus dem Superpositionsprinzip: Seien  $|\psi_1(t)\rangle$  und  $|\psi_2(t)\rangle$  zwei Quantenzustände mit den Anfangswerten  $|\psi_{1,0}\rangle$  und  $|\psi_{2,0}\rangle$ , dann ist auch die Linearkombination  $|\psi(t)\rangle = c_1|\psi_1(t)\rangle + c_2|\psi_2(t)\rangle$  ein möglicher Quantenzustand zum Anfangswert  $|\psi_0\rangle = c_1|\psi_{1,0}\rangle + c_2|\psi_{2,0}\rangle$ . Da der Quantenzustand zu einem Anfangszeitpunkt die Entwicklung des Systems eindeutig festlegt, ist dies auch der einzige Quantenzustand zu diesen Anfangsbedingungen. Aufgrund des Superpositionsprinzips kann man die Zeitentwicklung eines beliebigen Quantenzustandes durch eine Entwicklung nach Energieeigenzuständen mit zeitunabhängigen Entwicklungskoeffizienten  $C_n = \langle n | \psi_0 \rangle = \langle E_n | \psi(t) \rangle$  beschreiben,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n |E_n\rangle \langle E_n | \psi(t) \rangle = \sum_n |E_n\rangle \langle n | \psi_0 \rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle C_n \exp(-i \frac{E_n t}{\hbar}). \quad (8.16)$$

Der Spinzustand (8.10) ist ein Beispiel für eine solche Superposition. Das Zeitverhalten eines solchen Systems wird durch die relativen Phasen der beteiligten stationären Zustände bestimmt. Die Präzessionsfrequenz des Spins ergibt sich dementsprechend aus der Energiedifferenz  $E_1 - E_2 = \hbar\omega$ .

## 8.2 Grundgleichungen der Zeitentwicklung

Der zeitabhängige Quantenzustand (8.16) bezieht sich auf das spezielle Basissystem der stationären Zustände. Im folgenden soll die darstellungsunabhängige Form der Zeitentwicklung gefunden werden, die auch für zeitabhängige Systeme gültig ist.

### 8.2.1 Schrödingergleichung

Die Ableitung des Zustandsvektors (8.16) nach der Zeit ergibt,

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \sum_n C_n i\hbar \frac{d}{dt} |E_n\rangle = \sum_n C_n E_n |E_n\rangle = H |\psi\rangle. \quad (8.17)$$

Im ersten Schritt wurde die Zeitabhängigkeit (8.15) der stationären Zustände, im zweiten Schritt deren Eigenwertgleichung (8.13) verwendet. Das Ergebnis ist darstellungsunabhängig und läßt sich nun als ein allgemeines Postulat für die Zeitentwicklung des Zustandsvektors im Hilbertraum fordern: Ist  $H$  der Hamiltonoperator

eines Quantensystems, so wird die Zeitentwicklung des Zustandsvektors durch die *Schrödingergleichung*

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H|\psi\rangle} \quad (8.18)$$

bestimmt. Die Schrödingergleichung gilt auch für zeitabhängige Systeme mit  $H = H(t)$ . Sie stellt die Grundgleichung der nichtrelativistischen Quantenmechanik dar. Sie entspricht den Bewegungsgleichungen der klassischen Mechanik für die Bewegung eines Teilchensystems im Phasenraum. Die Schrödingergleichung ist linear. Daher gilt für Zustandsvektoren das Superpositionsprinzip. Sie ist außerdem eine Differentialgleichung erster Ordnung bezüglich der Zeit. Daher wird der Quantenzustand zur Zeit  $t$  eindeutig durch den Anfangszustand bestimmt. Die Zeitentwicklung des Zustandsvektors ist auch in der Quantenmechanik deterministisch.

Für die Schrödingergleichung gibt es unterschiedliche Darstellungen. Sei  $\{|i\rangle\}$  ein Orthonormalsystem, so gilt für die Darstellung  $\langle i|\psi\rangle$  von  $|\psi\rangle$ ,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle i|\psi\rangle = \sum_j \langle i|H|j\rangle \langle j|\psi\rangle. \quad (8.19)$$

Wählt man speziell das Orthonormalsystem  $\{|n\rangle\}$  der Eigenzustände zu  $H$ , so ist die Matrix  $\langle n|H|m\rangle$  diagonal und die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung bestimmt gerade die Zeitabhängigkeit der stationären Zustände (8.15),

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle n|\psi(t)\rangle &= \langle n|H|\psi(t)\rangle = E_n \langle n|\psi(t)\rangle, \\ \langle n|\psi(t)\rangle &= C_n \exp(-i \frac{E_n}{\hbar} t). \end{aligned}$$

## 8.2.2 Zeitentwicklungsoperator

Die Zeitentwicklung kann durch einen Operator dargestellt werden, der dem Anfangszustand  $|\psi(t_0)\rangle$  zur Zeit  $t_0$  den Endzustand  $|\psi(t)\rangle$  zur Zeit  $t$  zugeordnet,

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (8.20)$$

Der Zeitentwicklungsoperator  $U(t, t_0)$  besitzt die folgenden allgemeinen Eigenschaften:

- (1)  $U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1)U(t_1, t_0)$
- (2)  $U(t_0, t_0) = I$
- (3)  $U(t_0, t_1)U(t_1, t_0) = I$
- (4)  $U^+(t_1, t_0)U(t_1, t_0) = I.$

Wegen (1) wird der Endzustand vollständig durch einen Zustand zu einem früheren Zeitpunkt bestimmt. Wegen (2) erhält man für  $t = t_0$  den Anfangszustand. Wegen (3) ist die Zeitentwicklung reversibel. Wegen (4) ist  $U$  unitär. Damit bleibt die Norm des Zustandsvektors erhalten,

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger U | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle$$

Diese Eigenschaften bestimmen die formale Struktur der Schrödingergleichung. Für ein kleines Zeitintervall  $t \rightarrow t + dt$  gilt mit (2)

$$U(t + dt, t) = I - i\Omega dt + O(dt^2), \quad \text{mit} \quad dU(t, t)/dt = -i\Omega. \quad (8.21)$$

Für ein endliches Zeitintervall  $t_0 \rightarrow t + dt$  folgt daraus mit (1)

$$U(t + dt, t_0) = U(t + dt, t)U(t, t_0) = [I - i\Omega dt] U(t, t_0)$$

Aus der Unitaritätsbedingung (4) folgt, daß der Operator  $\Omega$  hermitesch ist,

$$\begin{aligned} U^\dagger(t + dt, t)U(t + dt, t) &= I + i[\Omega - \Omega^\dagger] dt + O(dt^2) = I, \\ \Omega^\dagger &= \Omega. \end{aligned}$$

Identifiziert man physikalisch  $\hbar\Omega$  mit  $H$ , so erhält man

$$\boxed{i\hbar \frac{dU(t, t_0)}{dt} = H U(t, t_0).} \quad (8.22)$$

Diese Gleichung ist äquivalent zur Schrödingergleichung (8.18). Multipliziert man von rechts mit dem zeitunabhängigen Anfangszustand  $|\psi(t_0)\rangle$ , so erhält man die Schrödingergleichung für den zeitabhängigen Zustandsvektor (8.20).

Für zeitunabhängige Hamiltonoperatoren kann der Zeitentwicklungsoperator explizit angegeben werden. Durch wiederholte Anwendung von (8.22) erhält man die  $n$ -te Ableitung

$$\frac{d^n}{dt^n} U(t, t_0) = \left(-\frac{i}{\hbar} H\right)^n U(t, t_0). \quad (8.23)$$

Entwickelt man  $U(t, t_0)$  um  $t = t_0$  so folgt mit  $U(t_0, t_0) = I$

$$U(t, t_0) = \sum_n \frac{1}{n!} \left[-\frac{i}{\hbar} H(t - t_0)\right]^n. \quad (8.24)$$

Da dies die Potenzreihe der Exponentialfunktion darstellt, schreibt man kurz

$$\boxed{U(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} H(t - t_0)\right].} \quad (8.25)$$

Operatorfunktionen werden allgemein durch ihre Potenzreihe definiert.



### 8.2.3 Schrödingerbild

Die Darstellung der Zeitentwicklung durch einen zeitabhängigen Zustandsvektor wird als Schrödingerbild bezeichnet. In diesem Bild sind die Observablen zeitunabhängig. Die Zeitabhängigkeit des Erwartungswertes einer Observablen  $A$  wird durch die Zustandsänderung beschrieben,

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \quad (8.26)$$

Im Schrödingerbild können Observablen zusätzlich eine explizite Zeitabhängigkeit besitzen, wenn am System von außen Änderungen hervorgerufen werden. Wird z.B. beim Stern-Gerlach-Versuch das Magnetfeld zeitlich verändert, so wird der Hamilton-Operator explizit zeitabhängig.

### 8.2.4 Heisenbergbild

Die Zeitabhängigkeit des Erwartungswertes kann in äquivalenter Weise durch zeitabhängige Observablen und zeitunabhängige Zustände

$$A(t) = U^+(t, t_0) A(t_0) U(t, t_0), \quad | \psi \rangle = | \psi(t_0) \rangle \quad (8.27)$$

beschrieben werden. Diese Darstellung wird als Heisenbergbild bezeichnet. Die Äquivalenz der beiden Darstellungen folgt aus der Invarianz des Skalarproduktes gegenüber einer unitären Transformation,

$$\begin{aligned} \langle A \rangle(t) &= \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \psi(t) | U(t, t_0) U^+(t, t_0) A U(t, t_0) U^+(t, t_0) | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | U^+(t, t_0) A U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi | A(t) | \psi \rangle. \end{aligned}$$

### 8.2.5 Zeitentwicklung von Erwartungswerten

Der Erwartungswert  $\langle A \rangle$  einer Observablen  $A$  genügt der Gleichung,

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \langle \partial_t A \rangle, \quad (8.28)$$

wobei der letzte Term eine explizite Zeitabhängigkeit von  $A$  berücksichtigt. Im Heisenbergbild sind die Zustände zeitunabhängig, so daß der Erwartungswert in (8.28)

auf beiden Seiten auch weggelassen werden kann. Die zeitabhängigen Operatoren genügen dann der *Heisenbergschen Bewegungsgleichung*,

$$\frac{d}{dt}A = \frac{1}{i\hbar} [A, H] + \partial_t A. \quad (8.29)$$

Zum Beweis von (8.28) berechnen wir die zeitliche Änderung des Erwartungswertes im Schrödingerbild auf folgende Weise,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi | A | \psi \rangle &= \left( i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi | \right) A | \psi \rangle + \langle \psi | A(t) \left( i\hbar \frac{d}{dt} | \psi \rangle \right) + \\ &\quad i\hbar \langle \psi | \partial_t A | \psi \rangle \\ &= -\langle \psi | HA(t) | \psi \rangle + \langle \psi | A(t)H | \psi \rangle + \\ &\quad i\hbar \langle \psi | \partial_t A | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | [A, H] | \psi \rangle + i\hbar \langle \psi | \partial_t A | \psi \rangle \end{aligned}$$

Als einfache Folgerung aus dieser Gleichung kann man zeigen, daß die Norm des Zustandsvektors erhalten ist. Setzt man  $A = I$  so gilt wegen  $[I, H] = 0$ ,

$$\frac{d}{dt} \langle \psi | \psi \rangle = \frac{d}{dt} \langle I \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [I, H] \rangle = 0. \quad (8.30)$$

Als weiteres Beispiel betrachten wir die zeitliche Änderung des Spinerwartungswertes in einem konstanten Magnetfeld,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle S_i \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle [S_i, -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}] \rangle \\ &= \frac{-\gamma}{i\hbar} \sum_j \langle [S_i, S_j] \rangle B_j \\ &= -\gamma \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} \langle S_k \rangle B_j \\ \frac{d}{dt} \langle \mathbf{S} \rangle &= -\gamma \mathbf{B} \times \langle \mathbf{S} \rangle = \gamma \langle \mathbf{S} \rangle \times \mathbf{B}. \end{aligned}$$

Hierbei wurde die Vertauschungsrelation (7.25) der Spinkomponenten verwendet. Der Erwartungswert genügt in diesem speziellen Fall exakt der klassischen Bewegungsgleichung (8.1).

### 8.3 Einteilchen-Schrödingergleichung

Die Bewegung eines Teilchens mit der Masse  $m$  in einem Potential  $V(\mathbf{x})$  wird quantenmechanisch durch die Schrödingergleichung (8.18) mit dem Hamiltonoperator

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(\mathbf{X}) \quad (8.31)$$

beschrieben. Der klassische Impulsvektor des Teilchens wird durch den Impulsoperator  $\mathbf{P} = \sum_j P_j \mathbf{e}_j$ , der Ortsvektor durch den Ortsoperator  $\mathbf{X} = \sum_j X_j \mathbf{e}_j$  ersetzt. Diese erfüllen die kanonischen Vertauschungsrelationen

$$[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij} . \quad (8.32)$$

### 8.3.1 Ortsdarstellung der Schrödingergleichung

Die Ortsdarstellung der Schrödingergleichung ist eine partielle Differentialgleichung für die Wellenfunktion  $\langle \mathbf{x} | \psi(t) \rangle = \psi(\mathbf{x}, t)$ . Man erhält diese Darstellung durch die Projektion von (8.18) auf die Basisvektoren  $|\mathbf{x}\rangle$ . Mit den einzelnen Termen,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | i\hbar \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) \\ \langle \mathbf{x} | \frac{P^2}{2m} | \psi(t) \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{x}, t) \\ \langle \mathbf{x} | V(\mathbf{X}) | \psi(t) \rangle &= V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) , \end{aligned}$$

findet man insgesamt,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}, t). \quad (8.33)$$

Die Ortsdarstellung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung ist entsprechend

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right) \psi_n(\mathbf{x}) = E_n \psi_n(\mathbf{x}). \quad (8.34)$$

### 8.3.2 Erhaltung der Wahrscheinlichkeit

Die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit des Quantenzustandes kann in der Ortsdarstellung lokal durch eine Kontinuitätsgleichung für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ausgedrückt werden. Diese lautet

$$\partial_t \varrho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (8.35)$$

mit

$$\varrho = |\psi|^2, \quad \mathbf{j} = \frac{1}{m} \Re \{ \psi^* (-i\hbar \nabla) \psi \} .$$

Zum Beweis substituiert man die Zeitableitung der Wellenfunktion durch die Schrödingergleichung,

$$\begin{aligned}\partial_t \varrho &= \psi^* \partial_t \psi + \psi \partial_t \psi^* = \frac{1}{i\hbar} \frac{-\hbar^2}{2m} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = -\nabla \cdot \mathbf{j}.\end{aligned}$$

Schreibt man die komplexe Wellenfunktion in der Polardarstellung  $\psi(\mathbf{x}) = A(\mathbf{x}) \exp(iS(\mathbf{x}))$ , so sieht man, daß die Wahrscheinlichkeitsdichte durch den Betrag  $A$  und der Wahrscheinlichkeitsstrom durch den Gradient der Phase  $S$  bestimmt werden,

$$\varrho = A^2, \quad \mathbf{j} = \varrho \frac{\hbar \nabla S}{m}. \quad (8.36)$$

### 8.3.3 Ehrenfest-Theorem

Die Erwartungswerte des Orts- und Impulsoperators beschreiben die mittlere Bewegung des Teilchens. Die Bewegungsgleichungen dieser Erwartungswerte haben eine gewisse Ähnlichkeit mit den klassischen Bewegungsgleichungen. Für ein Teilchen mit dem Hamiltonoperator (8.31) gilt hierfür das *Ehrenfesttheorem*,

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle \mathbf{X} \rangle = \frac{1}{m} \langle \mathbf{P} \rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle = \langle \mathbf{F}(\mathbf{X}) \rangle,} \quad (8.37)$$

wobei der Operator der Kraft durch die Operatorfunktion,

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}) = -\nabla V(\mathbf{x})|_{\mathbf{x}=\mathbf{X}} \quad (8.38)$$

definiert wird. Im allgemeinen kann der Erwartungswert der Kraft nicht oder nur näherungsweise durch die Kraft am mittleren Ort des Teilchens,

$$\langle \mathbf{F}(\mathbf{X}) \rangle \neq F(\langle \mathbf{X} \rangle), \quad (8.39)$$

ausgedrückt werden. Darin besteht der Unterschied zur klassischen Bewegungsgleichung. Im Fall einer konstanten Kraft oder eines harmonischen Oszillators genügen die Erwartungswerte des Ehrenfesttheorems den klassischen Bewegungsgleichungen.

Zur Herleitung von (8.37) verwenden wir die allgemeine Bewegungsgleichung (8.28) für ein Teilchen mit dem Hamiltonoperator (8.31),

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle \mathbf{X} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{X}, H] = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{X}, \frac{P^2}{2m}] \\ \frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{P}, H] = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{P}, V(\mathbf{X})].\end{aligned}$$

Für Funktionen  $F$  und  $G$ , die durch Potenzreihenentwicklungen definiert sind, gelten die Formeln,

$$[X_i, F(\mathbf{P})] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial P_i}, \quad [P_i, G(\mathbf{X})] = -i\hbar \frac{\partial G}{\partial X_i}.$$

Diese können in der Ortsdarstellung oder darstellungsfrei durch Potenzreihenentwicklung bewiesen werden. Damit folgt unmittelbar (8.37).

## 8.4 Schrödingergleichung des freien Teilchens

Ein freies Teilchen stellt ein besonders einfaches quantenmechanisches System dar, das durch den Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2, \quad (8.40)$$

dargestellt wird. Wir untersuchen an diesem Beispiel die stationären Zustände, die bestimmten Werten der Energie entsprechen und zeitabhängige Zustände, die durch eine bestimmte Anfangsbedingung für die Wellenfunktion definiert werden.

### 8.4.1 Stationäre Zustände

Die stationären Zustände genügen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung. Da der Hamiltonoperator mit dem Impulsoperator vertauscht, gibt es zu beiden Operatoren ein gemeinsames System von Eigenzuständen,

$$\mathbf{P}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle, \quad H|\mathbf{p}\rangle = E(\mathbf{p})|\mathbf{p}\rangle. \quad (8.41)$$

In einem Eigenzustand  $|\mathbf{p}\rangle$  besitzt das Teilchen den Impuls  $\mathbf{p}$  und die Energie

$$E(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m}. \quad (8.42)$$

Die Energieeigenwerte sind positiv und kontinuierlich verteilt. Sie sind außerdem unendlichfach entartet, da sie nur vom Betrag aber nicht von der Richtung des Impulses abhängen. Da die Eigenzustände zum Hamiltonoperator stationäre Zustände darstellen, besitzen sie die Zeitabhängigkeit

$$|E(\mathbf{p})\rangle = |\mathbf{p}\rangle \exp\left(-i\frac{E(\mathbf{p})t}{\hbar}\right). \quad (8.43)$$

Die Ortsdarstellung der Impulseigenzustände sind ebene Wellen

$$\langle \mathbf{x} | E(\mathbf{p}) \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp \frac{i}{\hbar} [ \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - E(\mathbf{p})t ], \quad (8.44)$$

deren Wellenvektor  $\mathbf{k}$  und Frequenz  $\omega$  jeweils durch

$$\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar, \quad \omega = E(\mathbf{p})/\hbar, \quad (8.45)$$

definiert werden. Befindet sich ein Teilchen in einem stationären Zustand, so ergibt eine Messung des Impulses mit Sicherheit  $\mathbf{p}$ , eine Messung der Energie mit Sicherheit  $E(\mathbf{p})$ . In Übereinstimmung mit der Unschärferelation ist jedoch der Ort des Teilchens völlig unbestimmt. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\langle \mathbf{x} | E(\mathbf{p}) \rangle|^2 d^3x$  ist ortsunabhängig. Klassisch kann man sich den stationären Zustand durch ein Ensemble von Teilchen repräsentiert denken, die alle denselben Impuls aber zufällige Anfangsorte besitzen.

## 8.4.2 Interferenz ebener Wellen

Um ein Teilchen mit einer endlichen Unschärfe  $\Delta x$  lokalisieren zu können, benötigt man eine Superposition von stationären Zuständen mit einer endlichen Impulsunschärfe  $\Delta p$ . Als einfaches Beispiel wählen wir die Superposition von zwei ebenen Wellen, die sich in  $x$ -Richtung ausbreiten,

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\Delta x}} \left[ \exp \frac{i}{\hbar} (p_1 x - E_1 t) + \exp \frac{i}{\hbar} (p_2 x - E_2 t) \right]. \quad (8.46)$$

Definiert man,

$$\Delta k = \frac{p_1 - p_2}{\hbar}, \quad v = \frac{p_1 + p_2}{2m},$$

so ergibt sich daraus die Aufenthaltswahrscheinlichkeit

$$|\psi|^2 = \frac{1}{\Delta x} [1 + \cos\{\Delta k(x - vt)\}]. \quad (8.47)$$

Der Zustand zur Zeit  $t = 0$  kann als Anfangsbedingung frei gewählt werden. In diesem Fall ist die Anfangsbedingung eine periodische Anordnung von Wellenpaketen, die jeweils auf ein Teilchen pro Wellenpaket normiert sind. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit hängt von der relativen Phase der beiden Wellen ab. Die Maxima entstehen an Orten konstruktiver Interferenz, wenn beide Wellen in Phase sind,  $k_1 x - k_2 x = 2\pi n$ . Die Minima entstehen an Orten destruktiver Interferenz, wenn beide Wellen entgegengesetzte Phasen besitzen:  $k_1 x - k_2 x = (2n + 1)\pi$  ( $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ). Die Breite  $\Delta x = 2\pi/\Delta k$  eines Wellenpaketes und die Impulsdifferenz  $\Delta p = \hbar\Delta k$  erfüllen eine Unschärferelation,  $\Delta x\Delta p = 2\pi\hbar$ . Die Konstante ist von der hier gewählten Definition der Orts- und Impulsunschärfe abhängig.

Für Zeiten  $t > 0$  bewegt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte mit der Geschwindigkeit  $v$  entlang der  $x$ -Achse. Diese Geschwindigkeit ist die Geschwindigkeit eines Punktes, in dem die beiden Amplituden eine konstante relative Phase  $\phi_0$  zueinander besitzen,

$$\begin{aligned} d\phi_0 &= \frac{1}{\hbar}(p_1 dx - p_2 dx - E_1 dt + E_2 dt) = 0, \\ v &= \frac{dx}{dt} = \frac{E_1 - E_2}{p_1 - p_2} = \frac{1}{2m} \frac{(p_1^2 - p_2^2)}{(p_1 - p_2)} = \frac{p_1 + p_2}{2m}. \end{aligned}$$

Überlagert man allgemeiner Wellen aus einem kontinuierlichen Intervall  $dk$  um eine Wellenzahl  $k_0$ , so definiert man die entsprechende Geschwindigkeit

$$\boxed{v_g = \left. \frac{dE(p)}{dp} \right|_{p=p_0} = \frac{p_0}{m}}, \quad (8.48)$$

als die Gruppengeschwindigkeit dieser Wellen. Die Gruppengeschwindigkeit bestimmt die Ausbreitungsgeschwindigkeit des Maximums eines Wellenpaketes. Sie entspricht der klassischen Teilchengeschwindigkeit. Eine Besonderheit des Beispiels besteht darin, daß sich alle Punkte des Wellenpaketes mit der gleichen Geschwindigkeit ausbreiten. Dies ist im allgemeinen nicht der Fall.

### 8.4.3 Ausbreitung von Wellenpaketen

Die Zeitentwicklung des Wellenpaketes eines freien Teilchens kann besonders einfach im Impulsraum gelöst werden. Zur Zeit  $t = t_0$  sei die Wellenfunktion im Ortsraum durch  $\psi(x, t_0) = \langle x | \psi(t_0) \rangle$  vorgegeben. Die zugehörige Wellenfunktion im Impulsraum ist,

$$\langle p | \psi(t_0) \rangle = \int dx \langle p | x \rangle \langle x | \psi(t_0) \rangle. \quad (8.49)$$

Die Zeitentwicklung der Wellenfunktion erhält man durch eine Entwicklung nach den stationären Zuständen (8.43),

$$\begin{aligned} \langle x | \psi(t) \rangle &= \int dp \langle x | E(p) \rangle \langle E(p) | \psi(t) \rangle \\ &= \int dp \langle x | E(p) \rangle \langle p | \psi(t_0) \rangle \\ &= \int dp \int dx' \langle x | E(p) \rangle \langle p | x' \rangle \langle x' | \psi(t_0) \rangle. \end{aligned} \quad (8.50)$$

Die Wellenfunktion zur Zeit  $t$  ergibt sich daher aus der Wellenfunktion zur Zeit  $t_0$  durch ein Integral,

$$\psi(x, t) = \int dx' K(x, t; x', t_0) \psi(x', t_0), \quad (8.51)$$

$$K(x, t; x', t') = \int dp \langle x | p \rangle \langle p | x' \rangle \exp(-i \frac{E(p)(t - t')}{\hbar}). \quad (8.52)$$

Der Integralkern  $K(x, t; x', t')$  stellt eine Übergangsamplitude vom Punkt  $(x', t')$  zum Punkt  $(x, t)$  dar. Man bezeichnet ihn daher als Propagator. Eine explizite Berechnung ergibt

$$K(x, t; x', t') = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t - t')}} \exp \left[ \frac{im(x - x')^2}{2\hbar(t - t')} \right] \quad (8.53)$$

#### 8.4.4 Kohärente Zustände

Von besonderem Interesse sind Wellenpakete deren Orts- und Impulsunschärfen den minimalen, durch die Unschärferelation vorgegebenen Wert

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \quad (8.54)$$

besitzen und diesen auch bei ihrer Ausbreitung beibehalten. Im Gegensatz zu den stationären Zuständen werden diese Zustände als kohärente Zustände bezeichnet. Die Bewegung eines kohärenten Wellenpaketes kommt der klassischen Bewegung eines Teilchens sehr nahe.

Die Wellenfunktion eines freien Teilchens sei zur Anfangszeit  $t = 0$

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\sigma}} \exp \left[ i \frac{p_0 x}{\hbar} - \frac{x^2}{2\sigma^2} \right], \quad (8.55)$$

$$\psi_0(p) = \sqrt{\frac{\sigma}{\sqrt{\pi}\hbar}} \exp(-\frac{\sigma^2(p - p_0)^2}{2\hbar^2}). \quad (8.56)$$

Die Schwankungsquadrate  $\Delta x_0^2 = \sigma^2/2$  und  $\Delta p_0^2 = \hbar^2/(2\sigma^2)$  erfüllen hierbei die Bedingung (8.54).

Die Zeitentwicklung dieses Wellenpaketes erhält man aus (8.50) und (8.56). Mit der Substitution  $p' = p - p_0$  folgt

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{\sigma}{\sqrt{\pi}\hbar}} \int dp' \exp \left[ -\frac{\sigma^2 \alpha}{2\hbar^2} p'^2 + \frac{i}{\hbar} x' p' + i S_0 \right]$$

$$\alpha = 1 + i \frac{\hbar t}{m\sigma^2}, \quad x' = x - \frac{p_0 t}{m}, \quad S_0 = \frac{1}{\hbar} (p_0 x - E(p_0) t).$$



Dieses Integral kann durch quadratische Ergänzung auf ein Gauß-Integral zurückgeführt werden. Die Integration ergibt,

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\sigma|\alpha|}} \exp\left[-\frac{x'^2}{2\sigma^2|\alpha|^2}\right] \exp i\left[S_0 + \frac{x'^2\hbar t}{2m\sigma^4|\alpha|^2} - \varphi/2\right], \quad (8.57)$$

wobei  $\tan \varphi = \hbar t/(m\sigma^2)$  gesetzt wurde. Die resultierende Aufenthaltswahrscheinlichkeit besitzt wieder die Form einer Gauß-Funktion,

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma'(t)} \exp\left(-\frac{x'^2(t)}{\sigma'^2(t)}\right)$$

mit den zeitabhängigen Parametern

$$\sigma'(t) = \sqrt{\sigma^2 + \left(\frac{\hbar t}{m\sigma}\right)^2}, \quad x' = x - \frac{p_0 t}{m}.$$

Die Breite  $\sigma'(t)$  der Verteilung wächst, da die einzelnen Wellen unterschiedliche Phasengeschwindigkeiten (Dispersion) besitzen. Das Unschärfeprodukt (8.54) bleibt aber erhalten, da die Wellenfunktion mit wachsender Ortsunschärfe eine entsprechend kleinere Impulsunschärfe besitzt,

$$\Delta x = \sigma'(t)/\sqrt{2}, \quad \Delta p = \hbar/(\sqrt{2}\sigma'(t)). \quad (8.58)$$

Das Maximum der Verteilung verschiebt sich mit der Geschwindigkeit  $p_0/m$ . Dies ist die Gruppengeschwindigkeit im Maximum der Impulsverteilung. Man sieht hier auch, daß das Ehrenfest Theorem (8.37) gilt: Der Ortserwartungswert  $\langle x \rangle = p_0 t/m$  bewegt sich mit der mittleren Geschwindigkeit  $\langle p \rangle/m = p_0/m$ . Die mittlere Geschwindigkeit ist zeitunabhängig, da auf das freie Teilchen keine Kraft einwirkt.

## 8.5 Stufenpotentiale

Wir untersuchen nun einige eindimensionale Potentialmodelle. Im eindimensionalen Fall lautet die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x) \psi = E\psi. \quad (8.59)$$

Die allgemeine Form dieser Gleichung ist die einer homogenen Differentialgleichung zweiter Ordnung mit einem variablen Koeffizienten,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2(x) \psi = 0, \quad k(x) = \frac{\sqrt{2m(E - V(x))}}{\hbar}. \quad (8.60)$$

Dieselbe Gleichung beschreibt in (5.62) die Ausbreitung elektromagnetischer Wellen in einem inhomogenen Medium. Daher gibt es in der Quantenmechanik viele Analogien zur Optik.

Die Lösungen der Differentialgleichung (8.60) sind besonders einfach, wenn  $V(x)$  abschnittsweise konstant ist und seinen Wert nur an einzelnen Sprungstellen unstetig ändert. Solche Potentiale bezeichnen wir als Stufenpotentiale. In einem Intervall  $a < x < b$ , in dem das Potential den konstanten Wert  $V_0$  besitzt, lautet die allgemeine Lösung,

$$\psi = A \exp(ik_0x) + B \exp(-ik_0x), \quad k_0 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}. \quad (8.61)$$

Das qualitative Verhalten dieser Lösung hängt davon ab, ob die Energie  $E$  größer oder kleiner ist als die Potentialhöhe  $V_0$ . Für  $E > V_0$  ist  $k_0$  eine reelle Wellenzahl. Die Wellenfunktion breitet sich als ebene Welle aus. Die Wellenzahl  $k_0$  entspricht hierbei dem Impuls  $p_0 = \hbar k_0$  eines Teilchens mit der kinetischen Energie

$$\frac{p_0^2}{2m} = E - V_0.$$

Für  $E < V_0$  wird die Wellenzahl imaginär,  $k_0 = i\kappa_0$ . Die Wellen klingen nun in Ausbreitungsrichtung exponentiell ab

$$\psi = A \exp(-\kappa_0x) + B \exp(\kappa_0x), \quad \kappa_0 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \quad (8.62)$$

Im Unterschied zur klassischen Mechanik gibt es eine exponentiell kleine Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens in einem Gebiet in dem die Energie kleiner ist als das Potential. Dies ist eine Welleneigenschaft, die z.B. ebenso bei der Reflexion einer elektromagnetischen Welle an einem undurchlässigen Medium auftritt.

An den Sprungstellen des Potentials gelten, ebenso wie in (5.65), die Stetigkeitsbedingungen,

$$[\psi] = 0, \quad \left[ \frac{d\psi}{dx} \right] = 0. \quad (8.63)$$

Hierbei wird vorausgesetzt, daß das Potential an der Sprungstelle beschränkt bleibt. Die Sprungbedingungen erlauben es die Lösungen für konstante Potentiale von einem Intervall zum nächsten fortzusetzen.

### 8.5.1 Reflexion an einer Stufe

Als einfaches Beispiel untersuchen wir die Reflexion einer ebenen Welle an einer Stufe

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & x < 0 \\ V_2 & x > 0 \end{cases}. \quad (8.64)$$

Wir nehmen an, daß im linken Halbraum ein Teilchenstrom mit einer Energie  $E > V_1$  einläuft und normieren die Wahrscheinlichkeitsdichte der einlaufenden Welle auf ein Teilchen pro Volumeneinheit. Bezeichnet man die Amplituden der reflektierten Welle mit  $r$ , die der transmittierten mit  $t$  und die Wellenzahlen in den Halbräumen mit  $k_1$  bzw.  $k_2$  so erhält man wie in Abschnitt (5.4.3) die Wellenfunktion

$$\psi = \begin{cases} \exp(ik_1x) + r \exp(-ik_1x) & ; \quad x < 0 \\ t \exp(ik_2x) & ; \quad x > 0. \end{cases} \quad (8.65)$$

mit

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}, \quad k_{1,2} = \frac{\sqrt{2m(E - V_{1,2})}}{\hbar}.$$

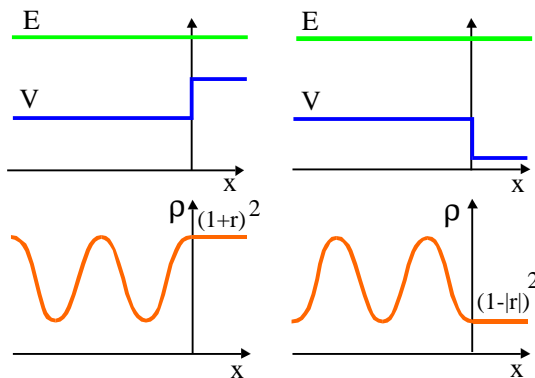


Abbildung 8.1: Reflexion und Transmission an einer Potentialstufe mit  $E > V$ . Die stehende Welle besitzt an der Stufe ein Maximum bei einem Potentialanstieg und ein Minimum bei einem Potentialabfall.

Zur Diskussion dieses Ergebnisses unterscheiden wir die Fälle  $E > V_2$  und  $E < V_2$ . Für  $E > V_2$  ist die Stufe für den Teilchenstrom partiell durchlässig. Es existiert eine transmittierte Welle mit einer reellen Wellenzahl  $k_2$ . Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit besitzt die Form,

$$\varrho = \begin{cases} 1 + r^2 + 2r \cos(2k_1x) & ; \quad x < 0 \\ t^2 & ; \quad x > 0. \end{cases} \quad (8.66)$$

Sie ist zeitunabhängig, da es sich um einen stationären Zustand handelt. Durch die Reflexion der einlaufenden Welle bildet sich im linken Halbraum eine stehende Welle, deren Wellenlänge halb so groß ist wie die der einlaufenden Welle. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit besitzt bei  $x = 0$  den Wert

$$\varrho(0) = (1 + r)^2 = t^2,$$

der entweder ein Maximum ( $r > 0$ ) oder ein Minimum ( $r < 0$ ) der stehenden Welle darstellt. Für  $r > 0$  ist  $V_2 > V_1$ , so daß die Teilchen an der Stufe abgebremst und verdichtet werden. Umgekehrt ist  $V_2 < V_1$  für  $r < 0$ . Die Teilchen werden an der Stufe beschleunigt, so daß eine Verdünnung eintritt. In beiden Fällen ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei  $x = 0$  stetig und für  $x > 0$  konstant.

Wir untersuchen nun den Fall  $E < V_2$ . Hier ist die Stufe undurchlässig und der einfallende Teilchenstrom wird vollständig reflektiert. Setzt man  $k_2 = i\kappa_2$  so kann die Amplitude  $r$  durch eine komplexe Zahl auf dem Einheitskreis dargestellt werden,

$$r = \frac{k_1 - i\kappa_2}{k_1 + i\kappa_2} = \exp(-2i\phi), \quad \tan \phi = \frac{\kappa_2}{k_1}.$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist

$$\varrho = \begin{cases} 4 \cos^2(k_1 x + \phi) & ; \quad x < 0 \\ |t|^2 \exp(-2\kappa_2 x) & ; \quad x > 0. \end{cases} \quad (8.67)$$

Im linken Halbraum ergibt sich eine stehende Welle mit der Phase  $\phi$  bei  $x = 0$ . Die Phase  $\phi$  variiert hier zwischen 0 für  $\kappa_2 \rightarrow 0$  und  $\pi/2$  für  $\kappa_2 \rightarrow \infty$ . Im rechten Halbraum klingt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit exponentiell ab. Im Fall einer unendlich hohen Stufe besitzt die Wellenfunktion eine Nullstelle (Knoten) bei  $x = 0$  und verschwindet im rechten Halbraum.

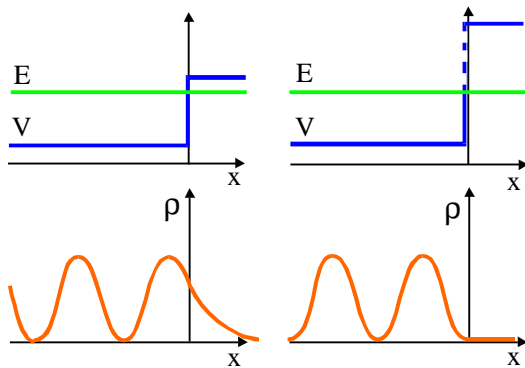


Abbildung 8.2: Reflexion an einer undurchlässigen Potentialstufe mit  $V_1 < E < V_2$ . Die Phase der stehenden Welle wird durch die Stufenhöhe bestimmt. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit hinter der Stufe nimmt exponentiell ab. Für eine unendlich hohe Stufe ergibt sich ein Knoten an der Stufe.

Im Gegensatz zur Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist die Wahrscheinlichkeitsstromdichte im gesamten Raum konstant. Dies folgt für eine stationäre eindimensionale

Dichte unmittelbar aus der Kontinuitätsgleichung (8.35). Die explizite Berechnung der Stromdichte für die Wellenfunktion (8.65) ergibt den Ausdruck

$$j = \frac{\hbar k_1}{m} (1 - |r|^2) = \frac{\hbar \Re\{k_2\}}{m} |t|^2 \exp(-2\Im\{k_2\}x). \quad (8.68)$$

Der Wahrscheinlichkeitsstrom ist immer reell. Die Wellenzahl  $k_1$  ist nach Voraussetzung reell. Die Wellenzahl  $k_2$  ist für  $E > V_2$  reell und für  $E < V_2$  rein imaginär. Im ersten Fall verschwindet der ortsabhängige Exponent, im zweiten Fall der gesamte Strom der transmittierten Welle.

Normiert man die Stromdichte auf die Stromdichte der einfallenden Welle, so läßt sich diese Gleichung auch in der Form

$$\boxed{R + T = 1, \quad R = |r|^2, \quad T = \frac{\Re\{k_2\}}{k_1} |t|^2.} \quad (8.69)$$

darstellen. Man bezeichnet  $R$  als das Reflexionsvermögen und  $T$  als das Transmissionsvermögen der Stufe.

## 8.5.2 Potentialtopf

Ein zweites einfaches Stufenpotential ist ein rechteckiger Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ +\infty & x < 0, x > L \end{cases} . \quad (8.70)$$

Im Gegensatz zu den bisher betrachteten Zuständen freier Teilchen treten hier Zustände gebundener Teilchen auf. Diese existieren nur für bestimmte diskrete Energieeigenwerte.

Da die Wellenfunktion an einer unendlich hohen Potentialstufe einen Knoten besitzt, müssen die Eigenfunktionen bei  $x = 0$  und  $x = L$  verschwinden. Die allgemeine Lösung (8.61) für das Intervall  $0 < x < L$  muß daher die Bedingungen

$$A + B = 0, \quad A(e^{ikL} - e^{-ikL}) = 0, \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar$$

erfüllen. Diese Randbedingungen bestimmen die möglichen Wellenzahlen und Energieeigenwerte,

$$\boxed{k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots .} \quad (8.71)$$

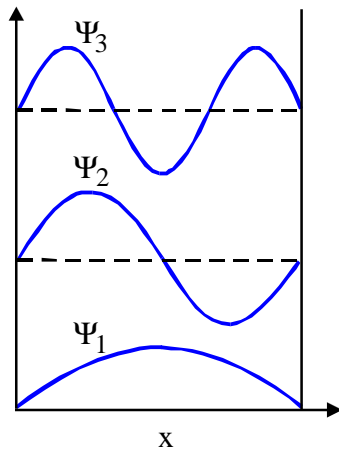


Abbildung 8.3: Schematische Darstellung der Eigenfunktionen  $\psi_n(x)$  eines unendlich hohen rechteckigen Potentials für die Quantenzahlen  $n = 1, 2, 3$ . Die Kurven sind in vertikaler Richtung gegeneinander verschoben.

Die natürlichen Zahlen  $n$  werden als Quantenzahlen der Zustände bezeichnet. In diesem Fall wächst die Energie quadratisch mit der Quantenzahl. Normiert man die Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf eins, so lauten die zugehörigen Eigenfunktionen

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x) . \quad (8.72)$$

Diese stationären Zustände stellen stehende Wellen dar, die innerhalb des Topfes  $n$  Extrema bzw.  $n - 1$  Knoten besitzen. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\psi_n|^2 \Delta x$  in einem vorgegebenen Intervall  $\Delta x$  variiert je nach Lage und Größe des Intervalls zwischen 0 und  $2\Delta x/L$ . Für Zustände mit hohen Quantenzahlen fallen in ein gegebenes Meßintervall  $\Delta x$  viele Oszillationen der stehenden Welle. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit nähert sich dann dem Mittelwert  $\Delta x/L$ , den man auch klassisch für ein Teilchenensemble mit zufälligen Orten erwarten würde.

## 8.6 Harmonischer Oszillator

In vielen Systemen können kleine Schwingungen um eine Gleichgewichtslage zumindest näherungsweise durch harmonische Oszillatoren beschrieben werden. Daher ist

der harmonische Oszillator ein besonders wichtiges Modellsystem. Außerdem kann das Eigenwertproblem des harmonischen Oszillators mit darstellungsunabhängigen Operatoren und Vektoren exakt gelöst werden. Es ist daher auch von prinzipiellem methodischem Interesse.

Ein harmonisch gebundenes Teilchen besitzt in der klassischen Mechanik die Energie

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (8.73)$$

Hierbei ist  $m$  die Masse des Teilchens,  $\omega = \sqrt{f/m}$  die Frequenz der Schwingung und  $f$  die Federkonstante der Rückstellkraft  $F = -fx$ . Der quantenmechanische harmonische Oszillator wird durch den entsprechenden Hamiltonoperator definiert, wobei der Orts- und Impulsoperator die kanonische Vertauschungsrelation erfüllen,

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2, \quad [X, P] = i\hbar. \quad (8.74)$$

Es ist hilfreich mit Hilfe der Konstanten  $m$ ,  $\omega$  und  $\hbar$  zu dimensionslosen Variablen überzugehen,

$$\tilde{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X, \quad \tilde{P} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} P, \quad \tilde{H} = \frac{1}{\hbar\omega} H.$$

Damit folgt die dimensionslose Darstellung,

$$\tilde{H} = \frac{1}{2} (\tilde{P}^2 + \tilde{X}^2), \quad [\tilde{X}, \tilde{P}] = i. \quad (8.75)$$

Eine weitere Vereinfachung ergibt sich durch Einführung der Operatoren

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{X} + i\tilde{P}), \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{X} - i\tilde{P}). \quad (8.76)$$

Diese Operatoren sind nicht hermitesch. Der zu  $a$  adjungierte Operator ist der Operator  $a^+$ . Die Umkehrung dieser Transformation lautet

$$\tilde{X} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^+ + a), \quad \tilde{P} = \frac{i}{\sqrt{2}} (a^+ - a). \quad (8.77)$$

Im klassischen System entspricht diese Transformation dem Übergang von den reellen Schwingungsvariablen

$$\tilde{x} = \sqrt{2\tilde{E}} \cos(\omega t), \quad \tilde{p} = -\sqrt{2\tilde{E}} \sin(\omega t),$$

zu komplexen Schwingungsamplituden,

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{x} + i\tilde{p}) = \sqrt{\tilde{E}} e^{-i\omega t}, \quad \alpha^* = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{x} - i\tilde{p}) = \sqrt{\tilde{E}} e^{+i\omega t}. \quad (8.78)$$

Die komplexe Amplitude ist so normiert, daß ihr Betrag die Energie des Teilchens angibt,

$$\tilde{E} = \frac{1}{2} (\tilde{p}^2 + \tilde{x}^2) = |\alpha|^2 .$$

Die klassische Analogie darf aber nicht mißverstanden werden. Im Unterschied zu den klassischen Amplituden sind  $a$  und  $a^+$  Operatoren, die andere algebraische Eigenschaften besitzen. Diese werden im folgenden hergeleitet und dann zur Berechnung des Energiespektrums angewandt.

### 8.6.1 Stationäre Zustände

Ersetzt man in (8.75) die Operatoren  $\tilde{X}$   $\tilde{P}$  durch  $a$  und  $a^+$ , so folgt

$$\tilde{H} = N + \frac{1}{2}, \quad N = a^+a, \quad [a, a^+] = 1 . \quad (8.79)$$

Diese Beziehungen ergeben sich unmittelbar durch Berechnung der Produkte

$$\begin{aligned} a^+a &= \frac{1}{2}(\tilde{X} - i\tilde{P})(\tilde{X} + i\tilde{P}) = \tilde{H} + \frac{i}{2}[\tilde{X}, \tilde{P}] = \tilde{H} - \frac{1}{2}, \\ aa^+ &= \frac{1}{2}(\tilde{X} + i\tilde{P})(\tilde{X} - i\tilde{P}) = \tilde{H} - \frac{i}{2}[\tilde{X}, \tilde{P}] = \tilde{H} + \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Die Operatoren  $H$  und  $N$  besitzen ein gemeinsames System von Eigenzuständen,

$$N|n\rangle = n|n\rangle, \quad \tilde{H}|n\rangle = \tilde{E}_n|n\rangle, \quad \tilde{E}_n = n + \frac{1}{2}. \quad (8.80)$$

Dieses Eigenwertproblem bestimmt die stationären Zustände des harmonischen Oszillators.

Wir untersuchen nun die Wirkung der Operatoren  $a$  und  $a^+$  auf die Eigenzustände  $|n\rangle$ . Dazu berechnen wir zuerst die Kommutatoren,

$$[N, a] = (a^+a)a - a(a^+a) = (a^+a - aa^+)a = -[a, a^+]a = -a,$$

$$[N, a^+] = (a^+a)a^+ - a^+(a^+a) = a^+(aa^+ - a^+a) = a^+[a, a^+] = a^+ .$$

Damit läßt sich zeigen, daß der Vektor  $a|n\rangle$  ein Eigenzustand zu  $N$  mit dem Eigenwert  $n - 1$  ist,

$$Na|n\rangle = (aN - a)|n\rangle = (n - 1)a|n\rangle .$$



Ebenso folgt, daß  $a^+|n\rangle$  ein Eigenzustand zu  $N$  mit dem Eigenwert  $n+1$  ist,

$$Na^+|n\rangle = (a^+N + a^+)|n\rangle = (n+1)a^+|n\rangle.$$

Wegen dieser Eigenschaft nennt man  $a$  Absteigeoperator und  $a^+$  Aufsteigeoperator.

Die möglichen Eigenwerte  $n$  werden dadurch eingeschränkt, daß die Eigenvektoren, die man durch mehrfache Anwendung des Absteigeoperators  $a$  erhält alle normierbar sein müssen. Für die Norm des Zustandes  $|\psi\rangle = a|n\rangle$  gilt,

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle n|a^+a|n\rangle = n\langle n|n\rangle \geq 0.$$

Daher ist  $n$  entweder positiv oder Null. Für  $n=0$  ist  $|\psi\rangle$  der Nullvektor, d.h. es gilt

$$a|0\rangle = 0. \quad (8.81)$$

Ausgehend von einem beliebigen positiven  $n$  könnte man durch  $p$ -malige Anwendung von  $a$  einen Eigenvektor zu einem negativen Eigenwert  $n-p < 0$  erhalten. Dies wäre im Widerspruch zur Normierbarkeitsbedingung  $n-p > 0$ . Daher kann  $n$  nur eine nicht-negative ganze Zahl sein. Die Folge der Eigenvektoren bricht dann ab, da für  $n-p=0$  die Bedingung (8.81) gilt. Die Eigenwerte des Harmonischen Oszillators sind daher

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots \quad (8.82)$$

Der Zustand mit der Quantenzahl  $n=0$  besitzt die niedrigste Energie  $E_0 = \hbar\omega/2$ . Er wird Grundzustand genannt. Die Energien der angeregten Zustände erhält man durch Addition eines ganzzahligen Vielfaches der Energie  $\hbar\omega$ .

Die diskreten Zustände  $|n\rangle$  können auf 1 normiert werden. Die Wirkung der Auf- und Absteigeoperatoren auf diese normierten Zustände ist dann

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (8.83)$$

Die Faktoren auf der rechten Seite sind so gewählt, daß sich die richtige Norm für diese Zustände ergibt,

$$\langle n|a^+a|n\rangle = n, \quad \langle n|aa^+|n\rangle = \langle n|a^+a+1|n\rangle = n+1.$$

Die Matrixdarstellung der Auf- und Absteigeoperatoren bezüglich der Energieeigenzustände ist

$$\langle m|a^+|n\rangle = \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1}, \quad \langle m|a|n\rangle = \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \quad (8.84)$$

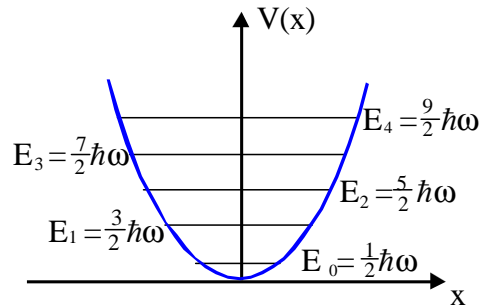


Abbildung 8.4: Oszillatorpotential und Energieniveaus der stationären Zustände. Im Grundzustand besitzt der Oszillator die Energie  $\hbar\omega/2$ . Die Energieniveaus der angeregten Zustände sind äquidistant um jeweils  $\hbar\omega$  nach oben verschoben.

Ausgehend vom Grundzustand können alle Zustände durch die mehrfache Anwendung des Aufsteigeoperators erzeugt werden,

$$\begin{aligned} |1\rangle &= a^+|0\rangle, \\ |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}a^+|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^+)^2|0\rangle, \\ |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle. \end{aligned}$$

### 8.6.2 Ortsdarstellung

Die Wellenfunktionen der stationären Zustände des harmonischen Oszillators erhält man aus den Zustandsvektoren  $|n\rangle$  durch den Übergang zur Ortsdarstellung. Als Ergebnis findet man für die Wellenfunktion zum Energieeigenwert  $\tilde{E}_n = n + 1/2$ ,

$$\tilde{\psi}_n(\tilde{x}) = \langle \tilde{x} | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^n n!}} H_n(\tilde{x}) \exp\left(-\frac{\tilde{x}^2}{2}\right). \quad (8.85)$$

Sie ist proportional zum Produkt einer Gaußfunktion mit dem Hermiteschen Polynom  $n$ -ter Ordnung  $H_n(\tilde{x})$ . Die Hermiteschen Polynome der 4 niedrigsten Ordnungen sind z.B.,

$$H_0 = 1, \quad H_1 = 2\tilde{x}, \quad H_2 = 4\tilde{x}^2 - 2, \quad H_3 = 8\tilde{x}^3 - 12\tilde{x}.$$

Das  $n$ -te Polynom besitzt  $n$  reelle Nullstellen und die Symmetrieeigenschaft,

$$H_n(-\tilde{x}) = (-1)^n H_n(\tilde{x}) .$$

Daher hat die Wellenfunktion im  $n$ -ten Zustand genau  $n$  Knoten. Die definierenden Eigenschaften der Hermiteschen Polynome werden im folgenden abgeleitet. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für die Zustände  $n = 0$ ,  $n = 1$ , und  $n = 10$  zeigt Abbildung (8.5). Im Grundzustand besitzt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ein Maximum bei  $\tilde{x} = 0$ . Bei den höher angeregten Zuständen liegen die höchsten Maxima außerhalb des Ursprungs. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit steigt im Mittel vom Ursprung bis zu den Umkehrpunkten der klassischen Schwingung an.

Kehrt man zu den ursprünglichen dimensionsbehafteten Größen zurück, so lautet die Lösung des Eigenwertproblems des harmonischen Oszillators,

$$\begin{aligned} E_n &= \hbar\omega\tilde{E}_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), & n &= 0, 1, 2, 3, \dots \\ \psi_n(x) &= \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/4} \tilde{\psi}_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right). \end{aligned} \quad (8.86)$$

Hierbei wurde verwendet, daß die Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\psi_n|^2 dx = |\tilde{\psi}_n|^2 d\tilde{x}$  als dimensionslose Größe invariant ist.

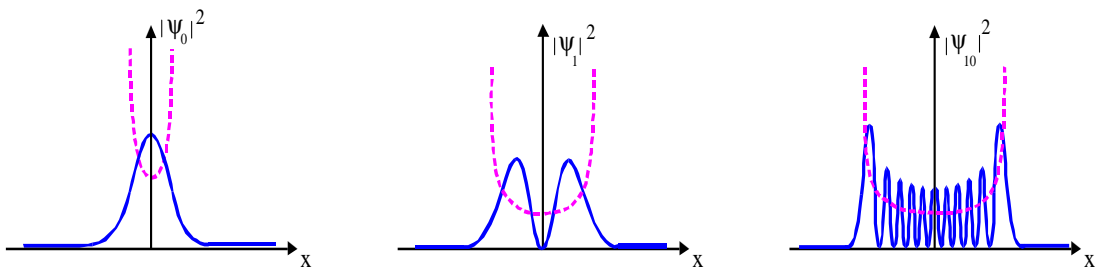


Abbildung 8.5: Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für die Oszillatorzustände  $n = 0$ ,  $n = 1$  und  $n = 10$ . Zum Vergleich ist die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit eingezeichnet, die an den Umkehrpunkten jeweils eine Asymptote besitzt.

Zur Herleitung von (8.85) beginnen wir mit dem Grundzustand. Der Zustandsvektor  $|0\rangle$  wird durch (8.81) definiert. Multipliziert man diese Gleichung von links mit

$\langle \tilde{x} |$  und verwendet die Definition des Absteigeoperators (8.76), so folgt eine Bestimmungsgleichung für die Orstdarstellung  $\tilde{\psi}_0(\tilde{x}) = \langle \tilde{x} | 0 \rangle$  des Grundzustandes,

$$\langle \tilde{x} | a | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \langle \tilde{x} | \tilde{X} + i\tilde{P} | 0 \rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \tilde{x} + \frac{d}{d\tilde{x}} \right) \tilde{\psi}_0(\tilde{x}) = 0 .$$

Die Integration dieser Gleichung ergibt

$$\int \frac{d\tilde{\psi}_0}{\tilde{\psi}_0} = - \int d\tilde{x} \tilde{x}, \quad \log \tilde{\psi}_0 = -\frac{1}{2}\tilde{x}^2 + \text{const}, \quad \tilde{\psi}_0 = c \exp\left(-\frac{1}{2}\tilde{x}^2\right).$$

Die Integrationskonstante  $c$  kann reell gewählt und durch Normierung bestimmt werden,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{x} |\tilde{\psi}_0|^2 = c^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{x} \exp(-\tilde{x}^2) = c^2 \sqrt{\pi} = 1.$$

Die Wellenfunktion des Grundzustandes ist somit die Gaußfunktion,

$$\tilde{\psi}_0(\tilde{x}) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{\tilde{x}^2}{2}\right) . \quad (8.87)$$

Der erste angeregte Zustand wird durch  $|1\rangle = a^+ |0\rangle$  definiert. Die Orstdarstellung dieser Gleichung ergibt die Wellenfunktion

$$\tilde{\psi}_1 = \langle \tilde{x} | 1 \rangle = \langle \tilde{x} | a^+ | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \tilde{x} | \left( \tilde{X} - i\tilde{P} \right) | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \tilde{x} - \frac{d}{d\tilde{x}} \right) \tilde{\psi}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} 2\tilde{x} \tilde{\psi}_0.$$

Dieses Verfahren kann fortgesetzt werden. Wir zeigen nun, daß die Wellenfunktion des  $n$ -ten stationären Zustandes die Form

$$\tilde{\psi}_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\tilde{x}) \tilde{\psi}_0, \quad (8.88)$$

besitzt. Für die Wellenfunktion des  $(n+1)$ -ten stationären Zustandes gilt

$$\tilde{\psi}_{n+1} = \langle \tilde{x} | n+1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \langle \tilde{x} | a^+ | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \tilde{x} - \frac{d}{d\tilde{x}} \right) \tilde{\psi}_n. \quad (8.89)$$

Mit dem Lösungsansatz (8.88) und mit der Operatoridentität

$$\tilde{x} - \frac{d}{d\tilde{x}} = -e^{\tilde{x}^2/2} \frac{d}{d\tilde{x}} e^{-\tilde{x}^2/2}$$

ergibt (8.89),

$$H_{n+1} = e^{\tilde{x}^2/2} \left( \tilde{x} - \frac{d}{d\tilde{x}} \right) \left( e^{-\tilde{x}^2/2} H_n \right) = -e^{\tilde{x}^2} \frac{d}{d\tilde{x}} \left( e^{-\tilde{x}^2} H_n \right).$$

Die Lösung dieser Rekursionsformel zu der Anfangsbedingung  $H_0 = 1$  ist,

$$H_n = \left( -e^{\tilde{x}^2} \frac{d}{d\tilde{x}} e^{-\tilde{x}^2} \right)^n = (-1)^n e^{\tilde{x}^2} \frac{d^n}{d\tilde{x}^n} e^{-\tilde{x}^2}. \quad (8.90)$$

Dies ist eine allgemeine Darstellung der Hermiteischen Polynome.

Die Hermiteischen Polynome besitzen eine Orthogonalitätseigenschaft, die aus der Orthogonalität der normierten Eigenfunktionen folgt,

$$\begin{aligned} \langle n | m \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{x} \langle n | \tilde{x} \rangle \langle \tilde{x} | m \rangle = \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{x} e^{-\tilde{x}^2} H_n H_m, \\ &\int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{x} e^{-\tilde{x}^2} H_n H_m = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm} \end{aligned}$$

Die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit soll jetzt noch mit der entsprechenden klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit verglichen werden. Dazu betrachten wir ein Ensemble von klassischen Teilchen, die alle dieselbe Energie  $\tilde{E}_n$  besitzen aber ansonsten zufällig im Phasenraum verteilt sind. Dieses Ensemble besitzt die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$w(\tilde{p}, \tilde{x}) = \frac{1}{Z} \delta(\tilde{E}_n - \frac{1}{2}[\tilde{p}^2 + \tilde{x}^2]),$$

wobei  $Z$  eine Normierungskonstante darstellt. Die Normierung der Wahrscheinlichkeit auf eins ergibt

$$Z = \int d\tilde{p} d\tilde{x} \delta(\tilde{E}_n - \frac{1}{2}[\tilde{p}^2 + \tilde{x}^2]) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty d\left(\frac{r^2}{2}\right) \delta\left(\tilde{E}_0 - \frac{r^2}{2}\right) = 2\pi.$$

Zur Integration wurden die kartesischen Koordinaten  $\tilde{x}$ ,  $\tilde{p}$  durch Polarkoordinaten  $r$ ,  $\phi$  ersetzt. Die Normierungskonstante zeigt, daß die Phasen der Oszillatoren zufällig im Intervall  $[0, 2\pi]$  verteilt sind.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $W(\tilde{x})$  im Ortsraum erhält man durch Integration über den Impulsraum,

$$\begin{aligned} W(\tilde{x}) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{p} w(\tilde{p}, \tilde{x}) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\tilde{p} \delta(\tilde{E}_n - \frac{1}{2}[\tilde{p}^2 + \tilde{x}^2]) \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\tilde{E} \frac{\delta(\tilde{E}_n - \tilde{E})}{\sqrt{2\tilde{E} - \tilde{x}^2}} = \frac{1}{\pi\sqrt{2\tilde{E}_n - \tilde{x}^2}}. \end{aligned}$$

Hierbei wurde die Integrationsvariable  $\tilde{p}$  durch  $\tilde{E} = (\tilde{p}^2 + \tilde{x}^2)/2$  substituiert. Die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte besitzt ein Minimum bei  $\tilde{x} = 0$  und Asymptoten an den Umkehrpunkten  $\tilde{x} = \pm\sqrt{2\tilde{E}_n} = \pm\sqrt{2n+1}$ . Abbildung (8.5) zeigt schematisch den Vergleich der quantenmechanischen und der klassischen Wahrscheinlichkeitsdichten.

### 8.6.3 Erwartungswerte

Befindet sich ein harmonischer Oszillator in einen stationären Zustand  $|n\rangle$ , so gilt

$$\begin{aligned} \langle \tilde{X} \rangle &= \langle \tilde{P} \rangle = 0, \\ \langle \frac{\tilde{X}^2}{2} \rangle &= \langle \frac{\tilde{P}^2}{2} \rangle = \frac{1}{2}\tilde{E}_n, \\ \Delta\tilde{X} &= \Delta\tilde{P} = \sqrt{\tilde{E}_n}, \\ \Delta X \Delta P &= \frac{E_n}{\omega} \end{aligned} \tag{8.91}$$

Die Erwartungswerte von Ort und Impuls verschwinden, die Erwartungswerte der kinetischen und potentiellen Energien sind gleichverteilt und jeweils gleich der halben Gesamtenergie. Daraus ergeben sich die Orts- und Impulsunschärfen. Dieses Ergebnis würde man auch von einem klassischen Ensemble mit zufälligen Phasen erwarten.

Die Diagonalelemente der Auf- und Absteigeoperatoren sind Null. Daher verschwinden die Erwartungswerte der Orts- und Impulsoperatoren

$$\langle \tilde{X} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle n | a^+ + a | n \rangle = 0,$$

$$\langle \tilde{P} \rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} \langle n | a^+ - a | n \rangle = 0$$

Bei der Berechnung der Erwartungswert von  $\tilde{X}^2$  und  $\tilde{P}^2$  gibt es nichtverschwindende Beiträge von den Diagonalelementen von  $N = a^+a$ ,

$$\langle \tilde{X}^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle n | (a^+ + a)^2 | n \rangle = \langle n | \frac{a^+a + aa^+}{2} | n \rangle = \langle n | \frac{2a^+a + 1}{2} | n \rangle = n + \frac{1}{2}.$$

$$\langle \tilde{P}^2 \rangle = \frac{-1}{2} \langle n | (a^+ - a)^2 | n \rangle = \langle n | \frac{a^+a + aa^+}{2} | n \rangle = \langle n | \frac{2a^+a + 1}{2} | n \rangle = n + \frac{1}{2}.$$

### 8.6.4 Kohärente Zustände

Stationäre Zustände sind zur Beschreibung der Grundzustandseigenschaften von Atomen oder Festkörpern besonders ausgezeichnet. Systeme im Grundzustand befinden sich definitionsgemäß in einem stationären Zustand. Bei angeregten Systemen spielen dagegen zeitabhängige Zustände eine wichtige Rolle, die durch ihre Anfangsbedingungen bestimmt sind. Von besonderem Interesse sind quasiklassische Zustände deren Erwartungswerte die klassische Bewegung eines Teilchens approximieren und dabei im Phasenraum minimale quantenmechanische Unschärfen besitzen. Solche Zustände werden als kohärente Zustände bezeichnet. Für ein freies Teilchen sind die kohärenten Zustände gaußförmige Wellenpakete. Im folgenden werden die kohärenten Zustände des harmonischen Oszillators untersucht.

Der Unterschied zwischen einem stationären Zustand  $|n\rangle$  und einem kohärenten Zustand  $|\alpha\rangle$  des harmonischen Oszillators wird besonders deutlich, wenn man die Erwartungswerte der Operatoren  $a$  und  $a^+a$  miteinander vergleicht. Für den stationären Zustand gilt

$$\langle a \rangle = \langle n | a | n \rangle = 0, \quad \langle a^+a \rangle = \langle n | a^+a | n \rangle = n.$$

Aufgrund der Definition (8.76) der Operatoren  $a$  und  $a^+$  sollten diese Erwartungswerte im klassischen Grenzfall in die komplexe Amplitude  $\alpha$  der Schwingung und deren Betragsquadrat  $|\alpha|^2$  übergehen. Dies ist aber für den stationären Zustand offensichtlich nicht der Fall. Daher stellt sich die Frage ob es Zustände gibt, die die gewünschte Eigenschaft

$$\langle a \rangle = \langle \alpha | a | \alpha \rangle = \alpha, \quad \langle a^+a \rangle = \langle \alpha | a^+a | \alpha \rangle = |\alpha|^2 \quad (8.92)$$

besitzen. Aus dieser Forderung kann man eine einfache Definition der kohärenten Zustände ableiten. Setzt man  $|\beta\rangle = a|\alpha\rangle$  und  $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$ , dann folgt aus (8.92)

$$\langle a^+a \rangle - |\langle a \rangle|^2 = \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle - |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 = 0.$$

Nach der Schwarzischen Ungleichung ist dieser Ausdruck genau dann Null, wenn die Vektoren  $|\alpha\rangle$  und  $|\beta\rangle$  linear abhängig sind. Der Zustand  $|\alpha\rangle$  ist daher ein Eigenzustand des Absteigeoperator  $a$  zum Eigenwert  $\alpha$ ,

$$\boxed{a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle}, \quad (8.93)$$

Da der Operator  $a$  nicht hermitesch ist, sind die Eigenwerte  $\alpha$  komplex. Gleichung (8.93) kann als Definition des kohärenten Zustandes verstanden werden: Ein kohärenter Zustand  $|\alpha\rangle$  des harmonischen Oszillators ist ein Eigenzustand von  $a$  zum komplexen Eigenwert  $\alpha$ .

Die Lösung der Eigenwertgleichung kann man sowohl in der Energiedarstellung als auch in der Ortsdarstellung gewinnen. Wir beginnen mit der Energiedarstellung,

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} \langle n|a|m\rangle \langle m|\alpha\rangle &= \alpha \langle n|\alpha\rangle \\ \sqrt{n+1} \langle n+1|\alpha\rangle &= \alpha \langle n|\alpha\rangle \\ \langle n|\alpha\rangle &= \frac{\alpha}{\sqrt{n}} \langle n-1|\alpha\rangle \\ &= \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle 0|\alpha\rangle \end{aligned}$$

Die Normierungsbedingung für  $|\alpha\rangle$  ergibt

$$\langle \alpha|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \alpha|n\rangle \langle n|\alpha\rangle = |\langle 0|\alpha\rangle|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |\langle 0|\alpha\rangle|^2 e^{|\alpha|^2} = 1.$$

Wählt man die Normierungskonstante reell, so erhält man für die Entwicklung des kohärenten Zustandes nach stationären Zuständen die Reihe

$$\boxed{|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle}. \quad (8.94)$$

Befindet sich ein harmonischer Oszillator in einem kohärenten Zustand, so ist die Quantenzahl  $n$  und damit auch die Energie unscharf. Die Wahrscheinlichkeit mit der die Quantenzahl  $n$  in einem kohärenten Zustand bei einer Energiemessung auftritt, erhält man aus (8.94),



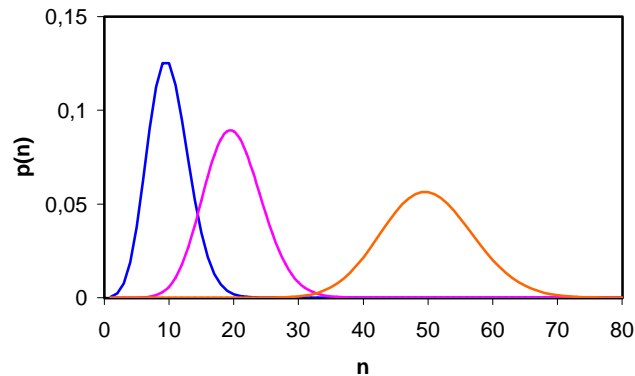


Abbildung 8.6: Poissonverteilung zu den Mittelwerten  $\bar{n} = 10, 20$  und  $50$ . Die Breite der Verteilung ist  $\Delta n = \sqrt{\bar{n}}$ . Die relative Breite  $\Delta n/\bar{n}$  nimmt mit wachsendem  $\bar{n}$  ab.

$$p_n = |\langle n | \alpha \rangle|^2 = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = \frac{\bar{n}^n e^{-\bar{n}}}{n!}. \quad (8.95)$$

Dies ist eine *Poissonverteilung* mit dem Mittelwert  $\bar{n} = |\alpha|^2$  (Abb.8.6). Um ein Maß der Energieunschärfe zu finden, berechnen wir das mittlere Schwankungsquadrat  $\Delta n^2$ ,

$$\begin{aligned} \bar{n} &= \langle a^+ a \rangle = |\alpha|^2, \\ \Delta n^2 &= \langle a^+ a a^+ a \rangle - \langle a^+ a \rangle^2 = \langle a^+ (a^+ a + 1) a \rangle - \langle a^+ a \rangle^2 = |\alpha|^2. \end{aligned}$$

Die relative Schwankung um den Mittelwert ist

$$\frac{\Delta n}{\bar{n}} = \frac{1}{\sqrt{\bar{n}}}. \quad (8.96)$$

Im Grenzfall großer Quantenzahlen wird die relative Energieunschärfe sehr klein, so daß man solche Zustände hinreichend genau durch ihre mittlere Energie beschreiben kann.

Die Zeitentwicklung der kohärenten Zustände kann ebenfalls aus der Darstellung (8.94) abgelesen werden. Mit der bekannten Zeitabhängigkeit der stationären Zustände folgt

$$|\alpha(t)\rangle = e^{-|\alpha(0)|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha(0)^n e^{-i(n+1/2)\omega t}}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-i\omega t/2} |\alpha(0)e^{-i\omega t}\rangle \quad (8.97)$$

Bis auf einen Phasenfaktor wird die Zeitentwicklung der kohärenten Zustände durch den zeitabhängigen Eigenwert

$$\alpha(t) = \alpha(0)e^{-i\omega t}, \quad |\alpha(t)|^2 = |\alpha(0)|^2 \quad (8.98)$$

bestimmt. Damit läßt sich die Zeitentwicklung der Erwartungswerte in einem kohärenten Zustand angeben. Setzt man  $\alpha(0) = \alpha_0 e^{i\varphi}$  mit einer reellen Amplitude  $\alpha_0$  so folgt,

$$\begin{aligned} \langle a \rangle &= \langle \alpha | a | \alpha \rangle = \alpha = \alpha_0 e^{-i(\omega t - \varphi)} \\ \langle \tilde{X} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \alpha | a^+ + a | \alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha^* + \alpha) = \sqrt{2}\alpha_0 \cos(\omega t - \varphi) \\ \langle \tilde{P} \rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}} \langle \alpha | a^+ - a | \alpha \rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (\alpha^* - \alpha) = -\sqrt{2}\alpha_0 \sin(\omega t - \varphi) . \\ \langle H \rangle &= \langle \alpha | a^+ a + \frac{1}{2} | \alpha \rangle = |\alpha|^2 + \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (8.99)$$

Diese Erwartungswerte verhalten sich genauso, wie die entsprechenden Variablen des klassischen harmonischen Oszillators. Nur der Zusammenhang zwischen der Energie und der komplexen Amplitude ist etwas anders. Für große Quantenzahlen erhält man aber auch hier näherungsweise die klassische Beziehung  $\langle H \rangle = |\alpha|^2$ .

Die Eigenwertgleichung der kohärenten Zustände kann auch in der Ortsdarstellung gelöst werden. Man erhält so eine Bestimmungsgleichung für die Wellenfunktion  $\tilde{\psi}_\alpha(\tilde{x}) = \langle \tilde{x} | \alpha \rangle$  der kohärenten Zustände:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{x} | a | \alpha \rangle &= \alpha \langle \tilde{x} | \alpha \rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \tilde{x} + \frac{d}{d\tilde{x}} \right) \tilde{\psi}_\alpha &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \langle \tilde{X} \rangle + i \langle \tilde{P} \rangle \right) \tilde{\psi}_\alpha . \end{aligned}$$

In der zweiten Zeile wurde  $a$  durch die Orts- und Impulsoperatoren und  $\alpha$  durch deren Erwartungswerte substituiert. Die Integration und anschließende Normierung ergibt die Wellenfunktion

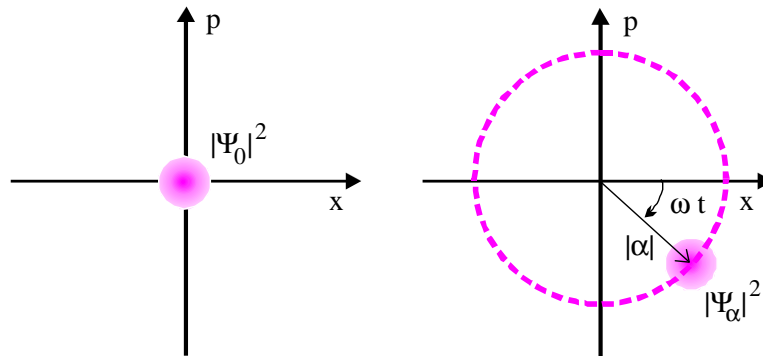


Abbildung 8.7: Schematischer Vergleich der Phasenraumaufenthaltswahrscheinlichkeit des harmonischen Oszillators für den Grundzustand  $\psi_0$ , den kohärenten Zustand  $\psi_\alpha$  und die klassische Schwingungsamplitude  $\alpha = |\alpha|e^{-i\omega t}$ .

$$\tilde{\psi}_\alpha = \frac{1}{\pi^{1/4}} \exp\left(i\langle \tilde{P} \rangle \tilde{x} - \frac{1}{2}(\tilde{x} - \langle \tilde{X} \rangle)^2\right). \quad (8.100)$$

Das schwingende Teilchen wird hier durch die an den Ort  $\langle \tilde{X} \rangle$  verschobene Wellenfunktion des Grundzustandes beschrieben. Das Maximum des Wellenpaketes führt die klassische Schwingungsbewegung aus. Durch Vergleich mit dem Gaußschen Wellenpaket (8.55) eines freien Teilchens sieht man, daß die zugehörigen Orts- und Impulsschwankungen hier zeitunabhängig sind und die Bedingung minimaler Unschärfe erfüllen,

$$\Delta \tilde{X} = \Delta \tilde{P} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \Delta \tilde{X} \Delta \tilde{P} = \frac{1}{2}. \quad (8.101)$$

Die kohärenten Zustände des harmonischen Oszillators stellen somit ein instruktives Beispiel dafür dar, wie die Bewegung eines klassischen Teilchens im Grenzfall hoher Quantenzahlen aus der Quantenmechanik abgeleitet werden kann.